



ใบรับรองวิทยานิพนธ์
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิทยาศาสตร์มหาบัณฑิต (พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร)

ปริญญา

พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร

พัฒนาผลิตภัณฑ์

สาขา

ภาควิชา

เรื่อง การประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด

Evaluation of Sweet Chili Sauce Qualities by Near Infrared Spectroscopy (NIRS)

นามผู้วิจัย นางสาวกรรช วรรณกุล

ได้พิจารณาเห็นชอบโดย

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก (รองศาสตราจารย์ธงชัย สุวรรณสิขณน์, Ph.D.)

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม (อาจารย์วราวุธ ชนะพลชัย, วท.ม.)

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม (อาจารย์สุมาพร เกษมสำราญ, Ph.D.)

หัวหน้าภาควิชา (รองศาสตราจารย์อนุวัตร แจ่มชัด, Ph.D.)

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์รับรองแล้ว

(รองศาสตราจารย์กัญญา วีระกุล, D.Agr.)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่ เดือน พ.ศ.

สิงสิงห์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิทยานิพนธ์

เรื่อง

การประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด

Evaluation of Sweet Chili Sauce Qualities by Near Infrared Spectroscopy (NIRS)

โดย

นางสาวกรกช วรรณกุล

เสนอ

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

เพื่อความสมบูรณ์แห่งปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร)

พ.ศ. 2553

ลิขสิทธิ์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

กรกช วรรณกุล 2553: การประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด ปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (พัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร) สาขาพัฒนาผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรมเกษตร ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รองศาสตราจารย์รัชชัย สุวรรณสีชนัน, Ph.D. 166 หน้า

น้ำจิ้มไก่เป็นสินค้าส่งออกที่มีการขยายตัวทางการตลาดเพิ่มขึ้นทุกปี การพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ให้มีความถูกต้องแม่นยำและรวดเร็วจะเป็นประโยชน์ต่อการส่งออก ดังนั้นงานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อประยุกต์ใช้เทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด (NIRS) ในการตรวจสอบคุณภาพน้ำจิ้มไก่ โดยศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างเพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสง และสร้างสมการทำนายคุณภาพทางเคมีกายภาพและทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ ผลการศึกษาพบว่า การคนตัวอย่าง 10-15 ครั้ง แล้วบรรจุลงอุปกรณ์ใส่ตัวอย่างชนิด British cup เป็นวิธีเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสมที่สุดการสร้างสมการทำนายคุณภาพทางเคมีและกายภาพ ใช้น้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ทำการวิเคราะห์ค่าคุณภาพในเรื่อง ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (TSS) น้ำตาลรีดิวซ์ น้ำตาลทั้งหมด กรดทั้งหมด ค่า pH และค่าสี (L^* a^* b^* C^* และ h) ยกเว้นปริมาณแคปไซซิน และค่า Scoville heat units (SHU) ใช้ตัวอย่างเพียง 100 ตัวอย่าง พร้อมวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยหลักการส่องผ่านสะท้อนในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร และปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมด้วยวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) จากนั้นนำชุดข้อมูลค่าเคมีและกายภาพแต่ละค่า กับข้อมูลสเปกตรัมมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธี Partial least squares regression (PLSR), Moving window partial least squares regression (MWPLSR) และ Searching combination moving window partial least squares regression (SCMWPLSR) พบว่าสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี SCMWPLSR เป็นสมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณ TSS น้ำตาลรีดิวซ์ และน้ำตาลทั้งหมด โดยมีค่า R เท่ากับ 0.992, 0.959 และ 0.956 ตามลำดับ ในขณะที่สมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี MWPLSR เป็นสมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณกรดทั้งหมด ปริมาณแคปไซซิน และค่า SHU โดยมีค่า R เท่ากับ 0.938, 0.964 และ 0.941 ตามลำดับ สำหรับการใช้เทคนิค NIRS ในการสร้างสมการทำนายคุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ด ใช้น้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง ทำการวิเคราะห์ระดับความเผ็ด โดยผู้ทดสอบที่ผ่านการฝึกฝนจำนวน 10 คน พร้อมวัดค่าการดูดกลืนแสงและปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมเช่นเดียวกับวิธีที่กล่าวมาข้างต้น พบว่าสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี Back propagation artificial neural network (BP-ANN) เป็นสมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ โดยมีค่า R อยู่ในช่วง 0.820-0.910 จากผลการศึกษาทั้งหมดชี้ให้เห็นว่าเทคนิค NIRS สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการตรวจสอบคุณภาพทางเคมี กายภาพ และทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ได้

Korrakot Wannagul 2010: Evaluation of Sweet Chili Sauce Qualities by Near Infrared Spectroscopy (NIRS). Master of Science (Agro-Industrial Product Development), Major Field: Agro-Industrial Product Development, Department of Product Development. Thesis Advisor: Associate Professor Thongchai Suwonsichon, Ph.D. 166 pages.

Sweet chili sauce is the important exported product which its market growth increases every year. The development of an accurate and rapid technique for quality evaluation of sweet chili sauce will be very useful for exporting. This research aimed to apply of near infrared spectroscopy (NIRS) for quality determination of sweet chili sauce. Sample preparation for near infrared (NIR) measurement and development of physiochemical and heat sensation model were investigated. Results showed that sample manually stirred about 10-15 times before pouring into the British cup holder was suitable method for sample preparation. For physiochemical models, 180 samples were analyzed to quantify the total soluble solids (TSS), reducing sugar (RS), total sugar (TS), total acidity (TA), pH and color of L*, a*, b*, C* and h, while 100 samples were used to analyzed capsaicin content and scoville heat units (SHU). The transmittance spectra in the region of 1100-2500 nm were scanned in each sample and original spectra were treated by multiplicative scatter correction (MSC). Both spectra and physiochemical data were used to develop the predictive partial least squares regression (PLSR), the moving window partial least squares regression (MWPLSR) and the searching combination moving window partial least squares regression (SCMWPLSR) models. Results showed that the SCMWPLSR models for predicting TSS, RS and TS yielded the best prediction results, their highest correlation coefficient (R) values were 0.992, 0.959 and 0.956, respectively. While the MWPLSR was the best method for predicting TA, capsaicin content and SHU, their highest R values were 0.938, 0.964 and 0.941, respectively. For heat sensation models, 50 samples were evaluated by 10 trained panelists and were also scanned by NIRS. Results showed that the back propagation artificial neural network (BP-ANN) was suitable method to develop predictive heat sensation models. Their highest R values were 0.820-0.910. According to these results, NIRS could be potentially used for predicting physiochemical and heat sensation quality of sweet chili sauce.

Student's signature

Thesis Advisor's signature

กิตติกรรมประกาศ

ขอกราบขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ธงชัย สุวรรณสิขณน์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก อาจารย์วราวุฒิ ธนะแพทย์ และ ดร. สุมาพร เกษมสำราญ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม ที่ได้กรุณาให้คำแนะนำในระหว่างการค้นคว้าวิจัย ตลอดจนการตรวจแก้ไขในการทำวิทยานิพนธ์ให้สำเร็จลุล่วงไปด้วยดี และขอกราบขอบพระคุณ ดร. ทานตะวัน พิทักษ์ ประธานการสอบ และ ดร. ปิติพร ฤทธิ์เรืองเดช ผู้ทรงคุณวุฒิภายนอก ที่กรุณาตรวจแก้ไขและให้คำแนะนำเพิ่มเติมเพื่อให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สมบูรณ์ยิ่งขึ้น

ขอขอบพระคุณสถาบันคั่นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่ให้ความอนุเคราะห์เครื่องมือและอุปกรณ์ในงานวิจัย ขอขอบพระคุณเจ้าหน้าที่ห้องปฏิบัติการเคมี กายภาพ และประสาทสัมผัส ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ คณะอุตสาหกรรมเกษตร ที่ให้คำปรึกษาเกี่ยวกับการวิเคราะห์คุณภาพต่างๆ ขอขอบคุณพี่ๆ เพื่อนๆ และน้องๆ นิสิตปริญญาโทและเอกทุกคน ที่ช่วยเหลือในการปฏิบัติงาน ตลอดจนเป็นกำลังใจในการดำเนินงานวิจัยจนวิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จอย่างสมบูรณ์

ข้าพเจ้าขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา และพี่ชาย ที่ให้การสนับสนุน ช่วยเหลือ ตลอดจนเป็นกำลังใจให้จนกระทั่งสำเร็จการศึกษา และสุดท้ายนี้ข้าพเจ้าขอมอบส่วนที่ดีในวิทยานิพนธ์ให้แก่ครูอาจารย์และผู้มีพระคุณทุกท่าน หากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้มีความผิดพลาดประการใด ข้าพเจ้าขออภัยและขอน้อมรับไว้แต่เพียงผู้เดียว

กรกช วรรณกุล

พฤษภาคม 2553

สารบัญ

หน้า

สารบัญ	(1)
สารบัญตาราง	(2)
สารบัญภาพ	(6)
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ	(13)
คำนำ	1
วัตถุประสงค์	2
ตรวจเอกสาร	3
อุปกรณ์และวิธีการ	34
อุปกรณ์	34
วิธีการ	36
ผลและวิจารณ์	51
สรุปและข้อเสนอแนะ	134
สรุป	134
ข้อเสนอแนะ	137
เอกสารและสิ่งอ้างอิง	138
ภาคผนวก	148
ภาคผนวก ก วิธีวิเคราะห์คุณภาพทางเคมี	149
ภาคผนวก ข วิธีวิเคราะห์คุณภาพทางกายภาพ	156
ภาคผนวก ค วิธีวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัส	158
ภาคผนวก ง การวัดค่าการดูดกลืนแสง	162
ประวัติการศึกษาและการทำงาน	166

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1	ประสิทธิภาพของสมการทำนาย โดยพิจารณาจากค่า R และ RPD	21
2	การใช้ประโยชน์เทคนิค NIRS ในประเทศไทย	22
3	สิ่งทดลองหรือโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียม สำหรับการศึกษาคโครงสร้างที่เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียม ในการสร้างสมการทำนายความเค็มของน้ำจิ้มไก่	49
4	ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี ก) การคน ข) การปั่น และ ค) การกรอง	51
5	การเปรียบเทียบค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR ของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี (การคน การปั่น และการกรอง) เพื่อทำนายปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	55
6	ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของปริมาณ TSS ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ปริมาณกรดทั้งหมด ค่า pH ค่าสี L^* a^* b^* C^* และ h ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	57
7	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	61
8	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	62
9	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณน้ำตาลทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	62
10	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณกรดทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	63
11	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่า pH ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	63
12	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี L^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	64

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
13	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี a^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	64
14	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี b^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	65
15	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี C^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	65
16	ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี h ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	66
17	สรุปวิธีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมที่เหมาะสมในการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	67
18	กลุ่มพันธะและโมเลกุลที่เกี่ยวข้องกับช่วงความยาวคลื่นที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR สำหรับการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่	75
19	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR สำหรับการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่	76
20	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นแบบการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด ด้วยวิธี PLSR และแบบการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เพื่อทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง	78
21	ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของปริมาณแคปไซซินและค่า SHU (ได้จากการคำนวณ) ของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง	97
22	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR สำหรับการสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่	100
23	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นแบบการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด ด้วยวิธี PLSR และแบบการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เพื่อทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง	102

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
24	ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	107
25	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR สำหรับการสร้างสมการทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่	111
26	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นแบบการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด ด้วยวิธี PLSR และแบบคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เพื่อทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	112
27	ค่าความแปรปรวนทั้งหมดที่สามารถอธิบายได้ ความยาวคลื่นที่สามารถอธิบายได้ และหมู่พันธุ์ที่เกี่ยวข้องในแต่ละ PC ของข้อมูลสเปกตรัมน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	121
28	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนาย ที่สร้างขึ้นด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้จำนวนข้อมูลนำเข้าแตกต่างกัน (ใช้โครงสร้างจำนวนชั้นซ่อน 2 ชั้น และจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน 10 นิวรอน) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	122
29	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	124
30	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	126
31	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	128

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
32	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	130
33	การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายแบบเชิงเส้นด้วยวิธี MWPLSR และแบบไม่เชิงเส้นด้วยวิธี BP-ANN ที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายค่าความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง	132
34	จำนวนตัวอย่าง และช่วงข้อมูลของค่าเคมี ค่ากายภาพ และค่าความเผ็ดทางประสาทสัมผัส ของน้ำจิ้มไก่	135
ตารางผนวกที่		
ค1	คุณลักษณะและคำจำกัดความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่	160

สารบัญภาพ

ภาพที่	หน้า
1 โครงสร้างสารกลุ่มแคปไซซินอยด์ในพริก	4
2 ตลาดส่งออกเครื่องปรุงรสที่สำคัญของไทย ปี 2551 (จำแนกตามมูลค่า: ล้านบาท)	7
3 รูปแบบการวัดการดูดกลืนแสงของเทคนิค NIRS ก) Transmittance ข) Transflectance ค) Diffuse transflectance ง) Interactance และ จ) Transmittance through scattering medium โดย I_0 คือแสงที่มาจากแหล่งกำเนิดแสง และ I_s คือแสงที่ออกมาจากตัวอย่าง	10
4 ช่วงข้อมูลในการทำ Savitzky-Golay smoothing (m คือจำนวนจุดทั้งสองด้านของจุดศูนย์กลาง เท่ากับ 3)	15
5 ช่วงข้อมูลในการแปลงค่าเป็นอนุพันธ์ โดย A คือช่วงที่หนึ่ง B คือช่วงที่สอง และ C คือช่วงที่สาม)	18
6 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนายและการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น	19
7 ขั้นตอนการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี SCMWPLSR	29
8 ฟังก์ชันส่งผ่านแบบล็อกซิกมอยด์	32
9 ฟังก์ชันส่งผ่านแบบแทนเจนต์ซิกมอยด์	32
10 ฟังก์ชันส่งผ่านแบบเส้นตรง	33
11 ขั้นตอนการศึกษาวิธีเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR	36
12 ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพโดยการหาความสัมพันธ์ทางสถิติระหว่างการวัดค่าด้วย NIRS กับการวิเคราะห์ค่าเคมีและกายภาพ และการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่ได้	41
13 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนายที่ดีที่สุดในการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่โดยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เปรียบเทียบกับวิธี PLSR	43
14 ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าความเผ็ด โดยการหาความสัมพันธ์ทางสถิติระหว่างการวัดค่าด้วย NIRS กับกับการวิเคราะห์ค่าความเผ็ด และการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่ได้	46

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
15	โครงสร้างเครือข่ายใยประสาทเทียมแบบทำนายทีละ 1 ข้อมูลนำออก	48
16	น้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างทั้ง 3 วิธี ก) การคน ข) การปั่น และ ค) การกรอง	51
17	สเปกตรัมเฉลี่ยของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี (การคน การปั่น และการกรอง) โดยแสดง ก) ช่วงความยาวคลื่นทั้งหมด และ ข) ภาพขยายช่วงความยาวคลื่น 1900-2400 นาโนเมตร	53
18	สเปกตรัมเฉลี่ยของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี (การคน การปั่น และการกรอง) ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร	54
19	สเปกตรัมเริ่มต้นของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร	58
20	ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีแตกต่างกันด้วยโปรแกรม Unscrambler® ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ก) วิธี Savitzky-Golay smoothing ข) วิธี MSC ค) วิธี MSC และ First derivative ง) วิธี MSC และ Second derivative จ) วิธี First derivative ฉ) วิธี First derivative และ MSC ช) วิธี Second derivative และ ซ) วิธี Second derivative และ MSC	59
21	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่เรเงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่	68
22	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่เรเงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ ก) ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ข) ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ค) ปริมาณกรดทั้งหมด ง) ค่า pH จ) ค่าสี L* ฉ) ค่าสี a* ช) ค่าสี b* ซ) ค่าสี C* และ ฉ) ค่าสี h	70
23	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1506-1618 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโนเมตร ด้วยวิธี SCMWPLSR	83

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
24	ค่าปริมาณ TSS ของน้ำจืดที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ SCMWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	83
25	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ของน้ำจืด ที่ช่วงความยาวคลื่น 1698-1746 นาโนเมตร และ 2194-2278 นาโนเมตร ด้วยวิธี SCMWPLSR	84
26	ค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ของน้ำจืดที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	85
27	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณน้ำตาลทั้งหมดของ น้ำจืด ที่ช่วงความยาวคลื่น 1708-1814 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโน เมตร ด้วยวิธี SCMWPLSR	86
28	ค่าปริมาณน้ำตาลทั้งหมดของน้ำจืดที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ SCMWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	86
29	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณกรดทั้งหมดของน้ำจืด ที่ช่วงความยาวคลื่น 1600-1900 นาโนเมตร และ 2036-2292 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	87
30	ค่าปริมาณกรดทั้งหมดของน้ำจืดที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	88
31	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่า pH ของน้ำจืด ที่ช่วงความ ยาวคลื่น 1558-2054 นาโนเมตร และ 2194-2334 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	89
32	ค่า pH ของน้ำจืดที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	89

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า	
33	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี L^* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1264 นาโนเมตร และ 1650-1814 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	90
34	ค่าสี L^* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	90
35	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี a^* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1266 นาโนเมตร และ 1618-1824 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	91
36	ค่าสี a^* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	92
37	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี b^* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1350 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	93
38	ค่าสี b^* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	93
39	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี C^* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1116-1390 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	94
40	ค่าสี C^* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	94
41	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี h ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1378 นาโนเมตร และ 1700-2050 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	95
42	ค่าสี h ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	96
43	สเปกตรัมเริ่มต้นและสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งข้อมูลด้วยวิธี MSC ของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง	98
44	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่เรงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ ก) ปริมาณแคปไซซิน ข) ค่า SHU	99

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
45	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณแคลไชนิน ที่ช่วงความยาวคลื่น 1342-1576 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR 103
46	ค่าปริมาณแคลไชนินของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation 104
47	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1370-1540 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR 105
48	ค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนาย (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation 105
49	สเปกตรัมเริ่มต้นและสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งข้อมูลด้วยวิธี MSC ของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง 107
50	ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่แรเงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ ก) ความเผ็ดโดยรวม ข) ความเผ็ดคลื่น ค) ความเผ็ดเพดานและช่องปาก และ ง) ความเผ็ดคอ 109
51	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2250-2410 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR 114
52	ค่าความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation 115
53	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเผ็ดคลื่นของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2230-2390 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR 116
54	ค่าความเผ็ดคลื่นของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation 116

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า	
55	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเผ็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1630-1730 นาโนเมตร และ 2252-2410 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	117
56	ค่าความเผ็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	118
57	ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1550-1914 นาโนเมตร และ 2250-2420 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR	119
58	ค่าความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	119
59	โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความเผ็ดโดยรวม)	124
60	ค่าความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	125
61	โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความเผ็ดลิ้น)	126
62	ค่าความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	127
63	โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความเผ็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความเผ็ดเพดาน)	128

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
64	ค่าความผิดพลาดและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	129
65	โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความผิดพลาดของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความผิดพลาด)	130
66	ค่าความผิดพลาดของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation	131
ภาพผนวกที่		
ง1	ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่บรรจุในหลอดทดลอง ก่อนนำไปควบคุมให้มีอุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียสใน Water bath	163
ง2	อุปกรณ์ใส่ตัวอย่างชนิด British cup ที่มีความหนาของตัวอย่าง 0.5 มิลลิเมตร	164
ง3	เครื่อง Near infrared (NIR) spectroscopy ยี่ห้อ BRAN + LUEBBE รุ่น InfraAlyzer 500 ประเทศเยอรมนี	164
ง4	สเปกตรัมของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร	165

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

BP-ANN	=	Back propagation artificial neural network
MSC	=	Multiplicative scatter correction
MWPLSR	=	Moving window partial least squares regression
NIR	=	Near infrared
NIRS	=	Near infrared spectroscopy
PC	=	Principal component
PCA	=	Principal component analysis
PLSR	=	Partial least squares regression
R_{cal}	=	Correlation coefficient of calibration
R_{cv}	=	Correlation coefficient of cross-validation
R_{val}	=	Correlation coefficient of validation
RMSEC	=	Root mean square error prediction in calibration
RMSECV	=	Root mean square error prediction in cross-validation
RMSEP	=	Root mean square error prediction in prediction
RPD	=	Ratio of standard error of prediction to standard deviation
SCMWPLSR	=	Searching combination moving window partial least squares regression
SHU	=	Scoville heat units
TSS	=	Total soluble solids

การประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด

Evaluation of Sweet Chili Sauce Qualities by Near Infrared Spectroscopy (NIRS)

คำนำ

น้ำจิ้มไก่ (Sweet chili sauce) จัดเป็นผลิตภัณฑ์ประเภทเครื่องปรุงรสชนิดหนึ่งของไทย นิยมใช้เป็นส่วนประกอบในอาหาร หรือใช้เป็นซอสจิ้มกับอาหารทอด เพื่อช่วยเพิ่มรสชาติอาหาร ให้มีเอกลักษณ์ตามที่ผู้บริโภคต้องการ ปัจจุบันตลาดเครื่องปรุงรสอาหารไทยขยายตัวอย่างรวดเร็ว เนื่องจากกระแสความนิยมบริโภคอาหารเพื่อสุขภาพและมีความสะดวกสบายเพิ่มมากขึ้น จากข้อมูลของศูนย์วิจัยระยะเพื่ออุตสาหกรรมอาหาร (2553) รายงานว่าการส่งออกเครื่องปรุงรสของไทย ในปี 2551 มีปริมาณเพิ่มมากขึ้นเป็น 202,840.8 ตัน คิดเป็นมูลค่า 11,687.49 ล้านบาท โดยมีปริมาณ และมูลค่าเพิ่มมากขึ้นจากปี 2550 เท่ากับ 7.42% และ 21.38% ตามลำดับ สำหรับการซื้อขายน้ำจิ้ม-ไก่ทั้งในประเทศและส่งออกต่างประเทศ ผู้บริโภคหรือผู้นำเข้าสินค้าต่างให้ความสำคัญกับเรื่อง คุณภาพและมาตรฐานความปลอดภัย ดังนั้นการพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ที่มีความ ถูกต้องแม่นยำ และรวดเร็วจะเป็นประโยชน์ต่อการส่งออก อย่างไรก็ตามผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ยังไม่มี มาตรฐานผลิตภัณฑ์ออกมาแน่ชัด แต่เมื่อพิจารณาจากองค์ประกอบของน้ำจิ้มไก่ พบว่าตัวแปรที่ สำคัญในการควบคุมคุณภาพ ได้แก่ น้ำตาล กรด สี และความเผ็ด โดยวิธีการตรวจวิเคราะห์ค่า คุณภาพเหล่านี้เป็นการตรวจสอบที่ใช้เวลาในการตรวจวิเคราะห์ และมีค่าใช้จ่ายในการดำเนินการ สูง การนำเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด (Near infrared spectroscopy, NIRS) มาใช้ในการ ตรวจสอบคุณภาพน้ำจิ้มไก่เป็นแนวทางที่น่าสนใจ เนื่องจากเป็นวิธีตรวจสอบคุณภาพที่มีความ รวดเร็วและถูกต้องแม่นยำ ปัจจุบันมีกลุ่มนักวิจัยหลายท่านทำการศึกษาเกี่ยวกับการตรวจวิเคราะห์ คุณภาพเครื่องปรุงรสด้วยเทคนิค NIRS เช่น Chippie *et al.* (2002) ศึกษาการวิเคราะห์ปริมาณไขมัน และความชื้นในมายองเนส Iizuka and Aishima (1997) ศึกษาการจำแนกซอสถั่วเหลือง และ Sáiz-Abajo *et al.* (2004) ศึกษาความเป็นไปได้ในการจำแนกตัวอย่างไวน์และน้ำส้มสายชู เพื่อใช้ในการ ตรวจสอบการปลอมปนของน้ำส้มสายชู เป็นต้น สำหรับการตรวจสอบคุณภาพเครื่องปรุงรสของ ไทยด้วยเทคนิค NIRS ยังไม่เป็นที่แพร่หลายมากนัก มีเพียง Ritthiruangdej *et al.* (2005) ทำการ ตรวจสอบคุณภาพน้ำปลาเท่านั้น ดังนั้นงานวิจัยครั้งนี้จึงได้ทำการศึกษาการตรวจสอบคุณภาพ น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิค NIRS เพื่อนำข้อมูลที่ได้มาใช้ในการพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพของ น้ำจิ้มไก่ และอุตสาหกรรมเครื่องปรุงรสต่อไป

วัตถุประสงค์

1. เพื่อศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR
2. เพื่อสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายคุณภาพทางเคมีและกายภาพ ได้แก่ ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ปริมาณกรด ทั้งหมด ค่า pH ค่าสี L^* a^* b^* C^* และ h ของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่
3. เพื่อสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมในการทำนายความเผ็ดของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่

การตรวจเอกสาร

ปัจจุบันตลาดน้ำจิ้มไก่มีการขยายตัวอย่างรวดเร็ว เพื่อตอบสนองความต้องการที่เพิ่มมากขึ้นทั้งในประเทศและต่างประเทศ การพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ให้มีความถูกต้องแม่นยำและรวดเร็วจัดเป็นสิ่งจำเป็น ดังนั้นการตรวจสอบคุณภาพด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด (Near infrared spectroscopy, NIRS) ซึ่งเป็นเทคนิคการวิเคราะห์คุณภาพโดยไม่ทำลายตัวอย่าง มีความแม่นยำ และสะดวกรวดเร็ว จึงเป็นแนวทางที่น่าสนใจในการเพิ่มศักยภาพการตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ อย่างไรก็ตาม เพื่อให้เข้าใจเกี่ยวกับการตรวจสอบคุณภาพน้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิค NIRS มากขึ้น จึงขอกล่าวรายละเอียดเกี่ยวกับ น้ำจิ้มไก่ เทคนิค NIRS และวิธีการวิเคราะห์ข้อมูลเพื่อสร้างสมการทำนาย ดังนี้

น้ำจิ้มไก่

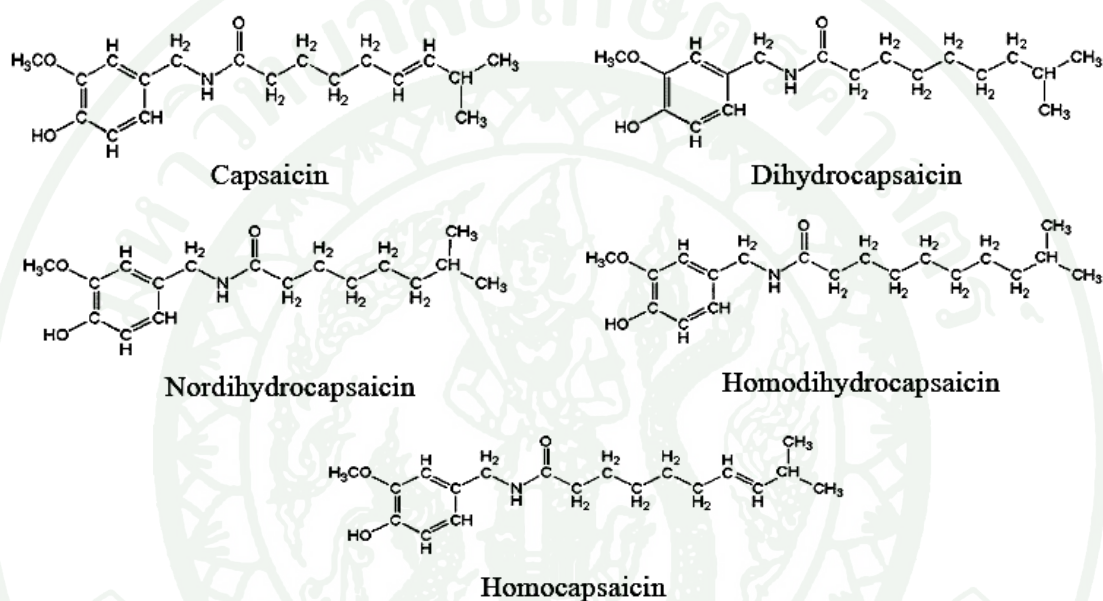
น้ำจิ้มไก่ หมายถึงผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการนำพริกชี้ฟ้าแดงสด กระเทียมสดหรือดองที่บดหยาบแล้วมาเติมน้ำ นำไปต้ม เติมน้ำตาลและส่วนประกอบอื่นๆ เช่น เกลือ กรดอะซิติก กรดซิตริก เกี่ยวจนมีความข้นตามต้องการ (สำนักงานมาตรฐานผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรม, 2547) โดยลักษณะเด่นของน้ำจิ้มไก่ที่ผู้บริโภคส่วนใหญ่ชื่นชอบ คือน้ำจิ้มไก่ที่มีระดับความเผ็ดปานกลาง ความหวานปานกลาง ผลิตภัณฑ์ควรมีสีแดงอมส้ม มีเนื้อพริกกระจายอย่างสม่ำเสมอ และมีลักษณะค่อนข้างข้น ส่วนประกอบโดยประมาณของน้ำจิ้มไก่ ได้แก่ พริกชี้ฟ้าแดงดอง 12.5% พริกชี้ฟ้าสดดอง 3.1% กระเทียมดอง 11.7% น้ำส้มสายชูหมัก 11.7% น้ำตาลทราย 45.1% และน้ำ 13.9% โดยมีชิ้นพริกขนาดประมาณ 6-7 มิลลิเมตร กระจายอย่างสม่ำเสมอในผลิตภัณฑ์ (สายวรุณ, 2551)

1. ส่วนประกอบและกระบวนการผลิตน้ำจิ้มไก่

ส่วนประกอบหลักของน้ำจิ้มไก่ ได้แก่ พริก สารให้ความหวาน กรด เกลือ และสารให้กลิ่นรสอื่นๆ นอกจากนี้อาจมีการเติมวัตถุกันเสีย หรือสารให้ความคงตัว เพื่อช่วยปรับปรุงลักษณะเนื้อสัมผัสของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ โดยรายละเอียดของส่วนประกอบดังกล่าวอธิบายได้ดังนี้

1.1 พริก พริกที่นิยมนำมาใช้ทำน้ำจิ้มไก่ คือพริกชี้ฟ้า (*Capsicum annuum* L.) โดยพริกที่ใช้ควรมีสีแดงจัด สามารถใช้ได้ทั้งในรูปของพริกสดหรือพริกดอง เพื่อให้มีกลิ่นรสและลักษณะ

ปรากฏด้านสีที่ตี สารที่ทำให้เกิดความเผ็ดร้อนในพริกคือสารกลุ่มแคปไซซินอยด์ (Capsaicinoids) ซึ่งประกอบด้วยสารต่างๆ 5 ชนิด ได้แก่ แคปไซซิน (Capsaicin) ไดไฮโดรแคปไซซิน (Dihydrocapsaicin) นอร์ไดไฮโดรแคปไซซิน (Nordihydrocapsaicin) โฮโมแคปไซซิน (Homocapsaicin) และ โฮโมไดไฮโดรแคปไซซิน (Homodihydrocapsaicin) โครงสร้างสารประกอบเหล่านี้แสดงดังภาพที่ 1 โดยสารที่มีความสำคัญมากที่สุดในกลุ่มแคปไซซินอยด์นี้คือ แคปไซซิน เนื่องจากพบในปริมาณมากที่สุด คือ 69% และให้ความเผ็ดมากที่สุด (Wikipedia, 2010)



ภาพที่ 1 โครงสร้างสารกลุ่มแคปไซซินอยด์ในพริก

ที่มา: ดัดแปลงจาก Henning (2010)

ความเผ็ดของพริกมีหน่วยที่เรียกว่าค่าหน่วยความเผ็ดของสโควิลล์ (Scoville heat units, SHU) ตั้งโดยวิลเบอร์ สโควิลล์ (Wilbur Scoville) นักวิทยาศาสตร์ชาวเยอรมัน วิธีการวัดความเผ็ดสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 วิธี คือวิธีการวิเคราะห์ทางประสาทสัมผัส และวิธีการวิเคราะห์ทางเคมี

1.1.1 การวิเคราะห์ทางประสาทสัมผัส วิธี Scoville ใช้ผู้ทดสอบชิมที่ผ่านการฝึกฝน และมีประสบการณ์ในการกินพริก ทำหน้าที่ชิมและให้คะแนนตัวอย่าง หลักการคือการนำสารละลายที่สกัดได้จากพริกมาเจือจางหลายความเข้มข้น จนกระทั่งถึงความเข้มข้นต่ำสุดที่ผู้ทดสอบชิม 3 คนใน 5 คนสามารถรับรสเผ็ดได้ตรงกัน จากนั้นนำค่าคงที่ของการทำให้เจือจาง

(Dilution factor) มาคำนวณหาค่าปริมาณความเผ็ดร้อน โดย 1.5 SHU มีค่าเท่ากับความเผ็ด 1 ส่วน ในน้ำที่นำมาละลายล้านส่วน (ppm)

Allison *et al.* (1999) ใช้วิธีการประเมินทางประสาทสัมผัสเชิงพรรณนา (Descriptive analysis) ในการวัดความเผ็ดของแคปไซซินในซัลซามะเขือเทศ (Tomato salsa) โดยใช้สารละลายแคปไซซินเข้มข้น 0.8, 1.3 และ 2.6 ppm ซึ่งมีระดับความเผ็ดน้อย ปานกลาง และมาก ตามลำดับ เป็นตัวอย่างมาตรฐาน ทำการฝึกฝนผู้ทดสอบให้มีความเคยชิน จนสามารถจดจำระดับความเผ็ดได้จึงทำการทดสอบความเผ็ดภายในปาก 3 ตำแหน่ง คือ บริเวณลิ้น ช่องปาก และลำคอ ผู้ทดสอบจะอมตัวอย่างไว้ในปากนาน 5 วินาที จากนั้นจึงให้คะแนนตัวอย่างหลังจากบ้วน 30 วินาที

ปณัฐ และคณะ (2551) ใช้วิธีการประเมินความเข้มของลักษณะทางประสาทสัมผัสตามเวลา (Time intensity) ในการจำแนกลักษณะความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ในประเทศไทย โดยใช้สเกล 0 ถึง 15 ประเมินความเผ็ดทุก 5 วินาที จนถึง 120 วินาที พบว่าสามารถจัดกลุ่มความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ได้ 4 รูปแบบคือ 1) ความเผ็ดน้อย มีอัตราการเกิดความเผ็ดและการลดระดับความเผ็ดค่อนข้างช้า 2) ความเผ็ดปานกลาง มีอัตราการเกิดความเผ็ดและการลดระดับความเผ็ดปานกลาง 3) ความเผ็ดปานกลาง มีอัตราการเกิดความเผ็ดปานกลางและอัตราการลดระดับความเผ็ดสูงกว่าตัวอย่างในกลุ่มที่ 2 และ 4) ความเผ็ดสูงที่สุด และตกค้างยาวนานมากที่สุด

1.1.2 การวิเคราะห์ทางเคมี การวัดความเผ็ดคือการวัดปริมาณแคปไซซินที่มีอยู่ในตัวอย่าง สามารถทำได้หลายวิธี เช่น วิธีการวัดค่าสีเนื่องจากปฏิกิริยา (Colorimetric) วิธีแกสโครมาโตกราฟี (Gas chromatography, GC) วิธีทีนเลเยอร์โครมาโตกราฟี (Thin layer chromatography, TLC) เป็นต้น แต่วิธีที่นิยมใช้มากในปัจจุบัน คือ วิธีโครมาโตกราฟีแบบของเหลวสมรรถนะสูง (High performance liquid chromatography, HPLC) เนื่องจากให้ผลที่แม่นยำและรวดเร็ว สามารถวิเคราะห์ตัวอย่างได้ครั้งละหลายๆ (ปารมี และทิพยา, 2553)

ตัณญา (2553) ศึกษาการวิเคราะห์หาปริมาณสารให้ความเผ็ดในผลพริก โดยใช้เทคนิค HPLC พบว่าพริกพันธุ์และแหล่งต่างๆ ที่ปลูกภายในประเทศมีปริมาณแคปไซซิน ไดไฮโดรแคปไซซิน และนอร์ไดไฮโดรแคปไซซิน อยู่ในช่วง 0.0120-0.5333, 0.0079-0.2184 และ 0.0010-0.0570%w/w ตามลำดับ ตัวอย่างพริกส่วนใหญ่มีปริมาณแคปไซซินอยุ่ในช่วง 0.3-0.5%w/w คิดเป็น 45.8% ของตัวอย่างทั้งหมด

1.2 สารให้ความหวาน (Sweetening agents) เป็นส่วนประกอบที่มีปริมาณมากที่สุดคือน้ำจิ้มไก่ ซึ่งมีปริมาณอยู่ในช่วง 3.4-50.0%w/w สารให้ความหวานที่ใช้ในน้ำจิ้มไก่ ได้แก่ น้ำตาลทราย (น้ำตาลซูโครส) คอร์นไซรัป (Corn syrup) หรือเบะแซ เพื่อให้ผลิตภัณฑ์มีความหวานและเนื้อสัมผัสข้นหนืด

1.3 กรด เป็นตัวให้กลิ่นรสและเป็น Preservative แก่น้ำจิ้มไก่ กรดที่ใช้ในน้ำจิ้มไก่อมีหลายชนิด เช่น กรดอะซิติก (Acetic acid) กรดมาลิก (Malic acid) และกรดซิตริก (Citric acid) เป็นต้น แต่นิยมใช้กรดอะซิติกมากที่สุด โดยใช้ในรูปของน้ำส้มสายชู สำนักงานคณะกรรมการอาหารและยา กระทรวงสาธารณสุข (2546) มีประกาศกระทรวงสาธารณสุข (ฉบับที่ 201) พ.ศ. 2543 เรื่องข้อบังคับ กำหนดไว้ว่าปริมาณกรดอะซิติกในซอสพริกจะต้องไม่เกิน 10%w/w ซึ่งหมายความว่ารวมถึงผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วย

1.4 สารให้กลิ่นรสอื่นๆ ได้แก่ กระเทียม หอมหัวใหญ่ มะนาว สับปะรด หรือผลไม้อื่นตามแต่วัตถุประสงค์ในการใช้ เพื่อให้ผลิตภัณฑ์มีกลิ่นรสเปลี่ยนไปตามต้องการ

1.5 เกลือ ช่วยให้ผลิตภัณฑ์มีรสชาติดีและช่วยเน้นกลิ่นรสของส่วนผสมอื่นๆ เช่น ช่วยให้ความหวานของน้ำตาลเด่นชัดขึ้น เป็นต้น ชนิดของเกลือที่ใช้ส่วนใหญ่เป็นเกลือแกง หรือโซเดียมคลอไรด์ (NaCl) แต่ในปัจจุบัน จากข้อมูลของศูนย์ข้อมูลอาหาร มหาวิทยาลัยมหิดล (2553) ได้ทำการพัฒนาเครื่องปรุงรสสูตรเกลือและน้ำตาลต่ำ โดยใช้โปแตสเซียมคลอไรด์ (KCl) ทดแทน พบว่าสามารถพัฒนาผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ให้เป็นสูตรมีโซเดียมลดลงได้ถึง 40% จากสูตรปกติ

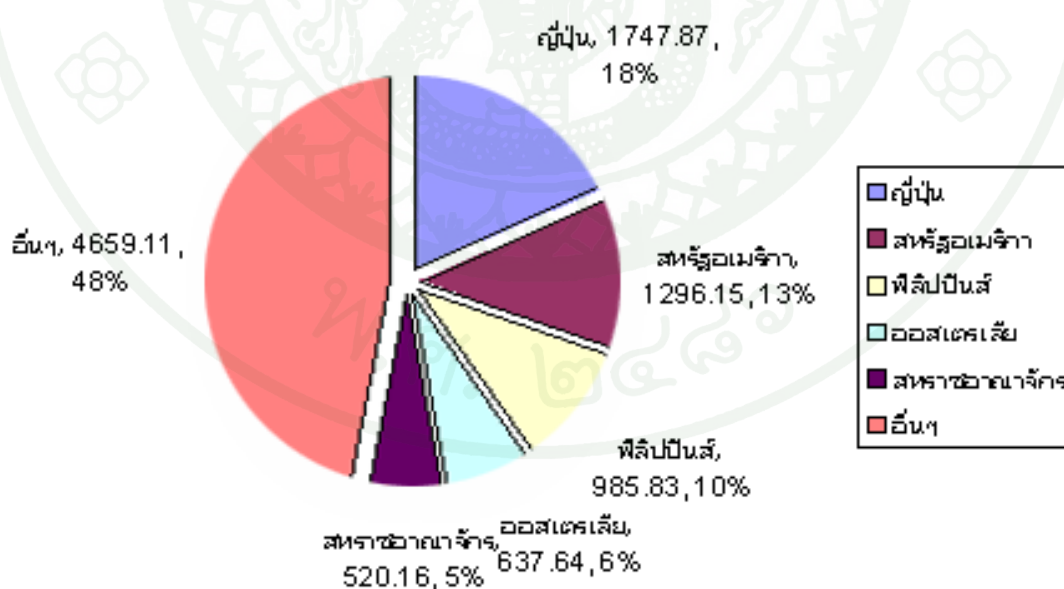
1.6 สารให้ความคงตัว ใช้เพื่อปรับปรุงลักษณะเนื้อสัมผัสของผลิตภัณฑ์ โดยน้ำจิ้มไก่ส่วนใหญ่ควรมีลักษณะข้นหนืดและขึ้นพริกหรือกระเทียมกระจายตัวอย่างสม่ำเสมอ ซึ่งสารให้ความคงตัวที่สำคัญในน้ำจิ้มไก่คือ แป้ง (Starch) หรือ โมดิไฟด์สตาร์ช (Modified starch) โดยนิยมใช้โมดิไฟด์สตาร์ชที่ทำจากแป้งข้าวโพด และข้าวเหนียว เพราะให้ความหนืดคงตัว ไม่เกิดเจล หรือการแยกชั้น (ศิวาพร, 2546)

กระบวนการผลิตน้ำจิ้มไก่ มีขั้นตอนดังนี้ 1) เตรียมตัวอย่างพริก (พริกสดหรือพริกดอง) และกระเทียม โดยทำการสับหรือบดหยาบ 2) นำน้ำส้มสายชูและน้ำเปล่าใส่ลงในหม้อเป็นอันดับแรก อาจมีการใส่แป้งมันลงไปเพื่อให้ส่วนผสมมีความข้น จากนั้นใส่น้ำตาลและปรุงรสด้วยเกลือ โดยในขณะเติมน้ำตาลต้องทำการคนส่วนผสมตลอดเวลาจนน้ำตาลละลายหมด 3) ใส่พริกและ

กระเทียมจากข้อที่ 1 ต้มส่วนผสมทั้งหมดให้เข้ากัน ใช้ความร้อน 85 องศาเซลเซียส นาน 30 นาที โดยต้องทำการสังเกตอุณหภูมิและส่วนผสมไม่ให้จับกันเป็นก้อน และ 4) เมื่อครบกำหนดเวลาแล้ว จึงนำน้ำจิ้มไก่ที่ได้ บรรจุลงบรรจุภัณฑ์ที่ผ่านการฆ่าเชื้อ โดยบรรจุขณะร้อน จากนั้นนำไปทำให้เย็น ตีคนลาก แล้วบรรจุลงในกล่อง และจัดเก็บเพื่อรอจัดจำหน่ายต่อไป (พิสิทส์ราชมงคล, 2553)

2. การตลาดและการส่งออกเครื่องปรุงรสของไทย

อุตสาหกรรมเครื่องปรุงรสไทยเป็นอุตสาหกรรมที่มีการเติบโตอย่างต่อเนื่องและพัฒนาสู่อุตสาหกรรมขนาดใหญ่มากขึ้น รวมทั้งมีการปรับปรุงรูปแบบผลิตภัณฑ์ให้หลากหลาย เหมาะสมต่อความต้องการของผู้บริโภค สถานการณ์ส่งออกเครื่องปรุงรสในปี 2551 มีปริมาณเพิ่มมากขึ้น เป็น 202,840.8 ตัน คิดเป็นมูลค่า 11,687.49 ล้านบาท โดยมีปริมาณและมูลค่าเพิ่มมากขึ้นจากปี 2550 เท่ากับ 7.42% และ 21.38% ตามลำดับ ตลาดส่งออกเครื่องปรุงรสที่สำคัญของไทยแสดงดังภาพที่ 2 โดยตลาดส่งออกหลักได้แก่ ญี่ปุ่น มูลค่าส่งออก 1,747.87 ล้านบาท (สัดส่วน 17.75% และเติบโต 22.66%) สหรัฐอเมริกา มูลค่าส่งออก 1,296.15 ล้านบาท (สัดส่วน 13.16% และเติบโต 16.58%) และฟิลิปปินส์ มูลค่าส่งออก 985.83 ล้านบาท (สัดส่วน 10.01% และเติบโต 112.30%) (ศูนย์วิจัยเพื่ออุตสาหกรรมอาหาร, 2553)



ภาพที่ 2 ตลาดส่งออกเครื่องปรุงรสที่สำคัญของไทย ปี 2551 (จำแนกตามมูลค่า: ล้านบาท)

ที่มา: ศูนย์วิจัยเพื่ออุตสาหกรรมอาหาร (2553)

เมื่อพิจารณาข้อมูลการส่งออกของผลิตภัณฑ์จะเห็นว่าผลิตภัณฑ์เครื่องปรุงรส (หมายความว่ารวมถึงน้ำจิ้มไก่) เป็นสินค้าอุตสาหกรรมเกษตรชนิดหนึ่งที่มีมูลค่าการส่งออกเพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่อง ทั้งยังมีกระแสการบริโภคอาหารเพื่อสุขภาพและการสนับสนุนจากรัฐบาลทำให้อุตสาหกรรมเครื่องปรุงรสเติบโตได้อย่างรวดเร็ว อย่างไรก็ตามผลิตภัณฑ์เครื่องปรุงรสของไทยก็ยังมีปัญหาที่พบในการส่งออกและการตลาด ดังเช่น ทิพยฉัตร (2548) ศึกษาการวิเคราะห์ความไร้เสถียรภาพการส่งออกผลิตภัณฑ์เครื่องปรุงรสของไทย พบว่าความไร้เสถียรภาพการส่งออกน้ำปลา ซอสพริก ซอสมะเขือเทศ และซอสถั่วเหลืองมีสาเหตุมาจากด้านอุปสงค์ เนื่องจากภาวะเศรษฐกิจถดถอยทำให้กำลังซื้อของผู้บริโภคลดลง และรสนิยมของผู้บริโภคที่เปลี่ยนแปลงอยู่ตลอดเวลา ฐานเศรษฐกิจ (2550) รายงานปัญหาผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ของไทยโดนลอกเลียนแบบทั้งขวดบรรจุ ฝาปิด ตราลากตราสัญลักษณ์ รวมถึงกล่องบรรจุภัณฑ์ วางจำหน่ายเกือบลตลาดจีน ทำให้เสียโอกาสในการได้ขายสินค้าในประเทศจีนไปเป็นมูลค่าเกือบ 100 ล้านบาท ซึ่งแนวทางการแก้ไขปัญหาก็กล่าวมาข้างต้นคือควรควบคุมคุณภาพสินค้าอย่างเคร่งครัด และมีคุณภาพเป็นไปตามมาตรฐาน ดังนั้นจะเห็นได้ว่าการตรวจสอบคุณภาพน้ำจิ้มไก่ให้มีความเหมาะสมตามที่ต้องการจึงมีความสำคัญ

เทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด

เทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด หรือ Near infrared spectroscopy (NIRS) เป็นวิธีการตรวจสอบคุณภาพที่มีความรวดเร็วในการวัดค่า สามารถตรวจสอบคุณภาพผลิตภัณฑ์ได้ทั้งในเชิงปริมาณและคุณภาพ ปัจจุบันเทคนิค NIRS มีการใช้ประโยชน์ในหลายอุตสาหกรรม เช่น อุตสาหกรรมสิ่งทอ อุตสาหกรรมยา และอุตสาหกรรมอาหาร เป็นต้น

1. การวัดการดูดกลืนแสง

โมเลกุลของตัวอย่างประกอบขึ้นด้วยอะตอมที่เชื่อมต่อกันด้วยพันธะเคมี โดยพันธะในโมเลกุลจะมีการสั่นอยู่ตลอดเวลาด้วยความถี่ที่มีค่าเฉพาะ เมื่อแสงช่วงอินฟราเรดย่านใกล้ หรือ Near infrared (NIR) ซึ่งมีความยาวคลื่นประมาณ 800-2500 นาโนเมตร ส่องผ่านเข้าไปในตัวอย่างไม่ความถี่ของรังสี NIR ตรงกับความถี่ค่าเฉพาะของพันธะในโมเลกุล โมเลกุลนั้นจะเกิดการดูดกลืนแสง NIR ทำให้มีพลังงานมากกว่าปกติ โมเลกุลเกิดการเปลี่ยนจากสถานะพื้นไปอยู่ในสถานะกระตุ้น อย่างไรก็ตามโมเลกุลไม่สามารถอยู่ในสถานะกระตุ้นได้จึงต้องคายพลังงานออกมาในรูปความร้อนเพื่อให้กลับสู่สถานะพื้นตามเดิม โดยมีการพบว่าโมเลกุลที่มีการดูดกลืนแสง NIR คือโมเลกุลที่มีไฮโดรเจนอะตอม (X-H) เป็นองค์ประกอบ ได้แก่ C O N และ S โดยปริมาณการ

ดูดกลืนแสงเป็นไปตามกฎของ เบียร์-แลมเบิร์ต (Beer-Lambert) คือค่าการดูดกลืนแสงมีความสัมพันธ์กับความเข้มข้นของสาร ดังสมการที่ (1) และ (2) ทำให้สามารถวิเคราะห์หาปริมาณขององค์ประกอบทางเคมีนั้นๆ ได้ (ศุมาพร, 2552)

กรณีวัดแสงส่องผ่าน

$$A = \epsilon bc = \log(1/T) = \log(I_0/I_t) \quad (1)$$

กรณีวัดแสงสะท้อน

$$A = \epsilon bc = \log(1/R) = \log(I_0/I_r) \quad (2)$$

เมื่อ A คือ ค่าการดูดกลืนแสง

ϵ คือ สภาพดูดกลืนโมลาร์ (Molar absorptivity) เป็นค่าคงที่ของแต่ละสาร

b คือ ความหนาของตัวอย่าง

c คือ ความเข้มข้นของสารที่ดูดกลืนแสง

T คือ แสงที่ผ่านออกมาจากตัวอย่าง

R คือ แสงที่สะท้อนออกมาจากตัวอย่าง

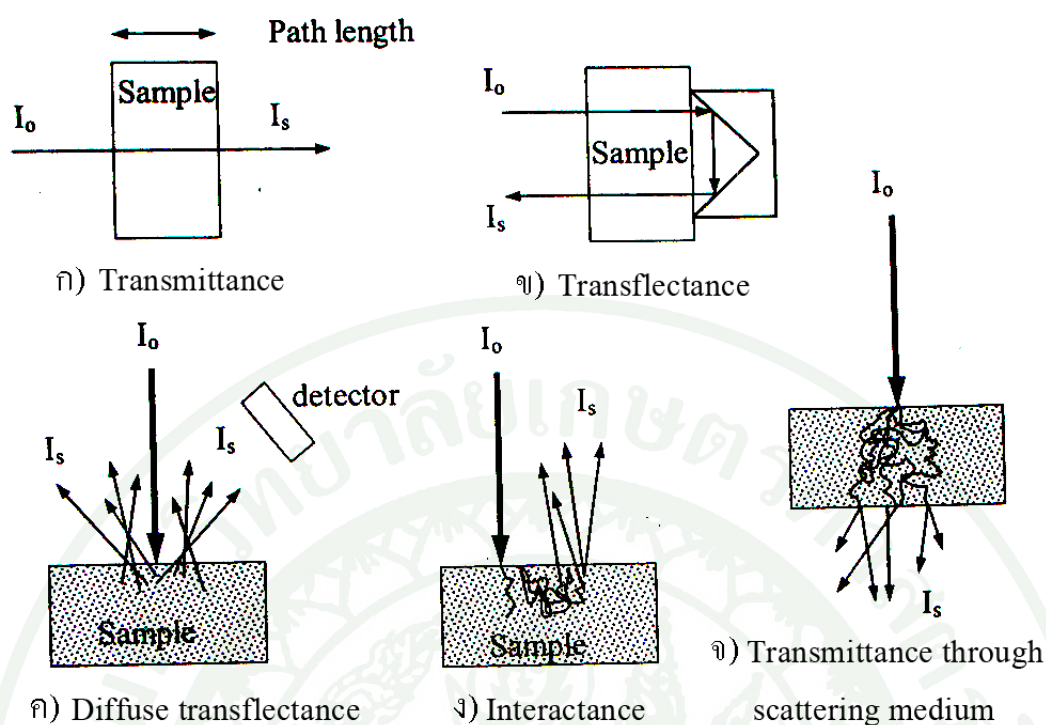
I_0 คือ ความเข้มแสงที่ตกกระทบตัวอย่าง

I_t คือ ความเข้มแสงที่ผ่านออกมาจากตัวอย่าง

I_r คือ ความเข้มแสงที่สะท้อนออกมาจากตัวอย่าง

1.1 รูปแบบการวัดการดูดกลืนแสง

วิธีการวัดแสง NIR ที่นิยมใช้ในปัจจุบันมีอยู่ 5 รูปแบบ ได้แก่ การส่องผ่าน (Transmittance) การส่องผ่านสะท้อน (Transflectance) การสะท้อนแบบแพร่ (Diffuse transflectance) อินเทอร์แอคแทนซ์ (Interactance) และการส่องผ่านตัวอย่างที่มีการกระเจิงแสง (Transmittance through scattering) รูปแบบวิธีการวัดแบบต่างๆ แสดงดังภาพที่ 3



ภาพที่ 3 รูปแบบการวัดการดูดกลืนแสงของเทคนิค NIRS ก) Transmittance ข) Transflectance ค) Diffuse transflectance ง) Interactance และ จ) Transmittance through scattering medium โดย I_0 คือแสงที่มาจากแหล่งกำเนิดแสง และ I_s คือแสงที่ออกมาจากตัวอย่าง

ที่มา: ศิวลักษณ์ และอนุพันธ์ (2552)

1.1.1 วิธี Transmittance แสง NIR จะส่องผ่านตัวอย่างด้านหนึ่งและถูกตรวจวัดอีกด้านหนึ่งหลังจากส่องผ่านตัวอย่าง

1.1.2 วิธี Transflectance แสง NIR จากแหล่งกำเนิดจะส่องผ่านลงไปในตัวอย่างไม่กระทบแผ่นเซรามิก ทอง หรืออะลูมิเนียมในชั้นใต้สุด แล้วสะท้อนกลับมายังอุปกรณ์ตรวจวัดแสง (Detector) งานวิจัยที่ใช้การวัดแสงรูปแบบนี้ ดังเช่น การศึกษาการคัดแยกน้ำมันบริสุทธิ์และนมที่มีการเจือปน (Kasemsumran *et al.*, 2007) การศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างสเปกตรัม NIR และคุณลักษณะทางประสาทสัมผัสของน้ำปลาไทย (Ritthiruangdej and Suwonsichon, 2007) และการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำผึ้ง โดยปลอมปนด้วยน้ำตาลฟรุคโตสและกลูโคส (Downey *et al.*, 2003)

1.1.3 วิธี Diffuse transreflectance แหล่งกำเนิดแสงและ Detector จะติดตั้งเป็นมุมเฉพาะต่อกัน 45 องศา เพื่อหลีกเลี่ยงการวัดแสงแบบสเปกคูลาร์ (Specular light) หรือแสงที่เปลี่ยนไปตามมุมมอง

1.1.4 วิธี Interactance เกิดขึ้นจากการใช้หัววัดใยแก้วนำแสง (Fiber optics probe) แสง NIR จะออกมาจากส่วนวงแหวนด้านนอกของหัววัดมาตกกระทบกับตัวอย่าง และแสงที่สะท้อนออกมาจากเนื้อตัวอย่างจะถูกส่งไปที่ Detector บริเวณส่วนกลางของใยแก้วนำแสง

1.1.5 วิธี Transmittance through scattering medium แสง NIR จะส่องผ่านตัวอย่างด้านหนึ่ง ผ่านตัวอย่างที่ไม่เป็นเนื้อเดียวกันทำให้เกิดการกระเจิงแสง และแสงที่ออกมาจากตัวอย่างนั้นจะถูกตรวจวัดโดย Detector ที่อยู่อีกด้านหนึ่งหลังจากส่องผ่านตัวอย่าง

1.2 การเตรียมตัวอย่าง

เทคนิค NIRS เป็นเทคนิคที่ไม่ต้องมีการเตรียมตัวอย่างหรือมีการเตรียมตัวอย่างเพียงเล็กน้อย เพื่อให้ตัวอย่างที่ทำการวิเคราะห์มีสภาพใกล้เคียงกับตัวอย่างดั้งเดิมมากที่สุด แต่สำหรับตัวอย่างที่มีลักษณะไม่เป็นเนื้อเดียวกัน จะมีปัญหาเกี่ยวกับความแม่นยำในการวัดสเปกตรัม เนื่องจากตัวอย่างจะโดนฉายแสงเพียงบางส่วนเท่านั้น เพื่อลดปัญหาดังกล่าวจึงต้องมีวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสม เช่น การบด (Grinding) สำหรับตัวอย่างที่เป็นของแข็งและมีขนาดอนุภาคไม่สม่ำเสมอ และการผสม (Mixing) หรือการทำให้เป็นเนื้อเดียวกัน (Homogenizing) สำหรับตัวอย่างของเหลว เพื่อให้ตัวอย่างที่นำมาฉายแสงนั้นมีความเป็นไปได้อันใกล้เคียงกับตัวอย่างทั้งหมด

Downey *et al.* (2003) ศึกษาการตรวจสอบน้ำผึ้งที่มีการปลอมปนด้วยน้ำตาลกลูโคสและฟรุคโตส มีวิธีการเตรียมตัวอย่างโดยการนำตัวอย่างน้ำผึ้งไปอบหรือบ่มที่อุณหภูมิ 40 องศาเซลเซียส นานหนึ่งคืน เพื่อละลายสารที่เป็นผลึกในน้ำผึ้ง จากนั้นจึงทำการคนเพื่อให้แน่ใจว่าตัวอย่างเป็นเนื้อเดียวกัน เช่นเดียวกับ Qiu *et al.* (1999) ที่ใช้วิธีการอบหรือบ่มตัวอย่างน้ำผึ้ง แต่ทำที่อุณหภูมิ 50 องศาเซลเซียส ใน Water bath จนกระทั่งผลึกน้ำตาลละลายหมด

Brunet *et al.* (2007) ศึกษาผลของการบดตัวอย่างต่อการวิเคราะห์ปริมาณคาร์บอนและไนโตรเจนในดินจากแอฟริกาและบราซิล มีวิธีการเตรียมตัวอย่างโดยการนำตัวอย่างดินไปร่อนผ่านตะแกรงขนาด 0.2 และ 2 มิลลิเมตร เพื่อให้มีอนุภาคขนาดเล็กก่อนนำไปวิเคราะห์การดูดกลืนแสง

พบว่า การนำตัวอย่างดินไปร่อนผ่านตะแกรงขนาด 0.2 มิลลิเมตร ให้สมการทำนายปริมาณคาร์บอนที่มีความถูกต้องแม่นยำกว่าการร่อนผ่านตะแกรงขนาด 2 มิลลิเมตร แต่สำหรับสมการทำนายปริมาณไนโตรเจน การเตรียมตัวอย่างดินไม่มีผลต่อความแม่นยำของสมการทำนาย

Zhang *et al.* (2008) ศึกษาการวิเคราะห์หึ่งค์ประกอบทางเคมีในใบชาสูบ มีวิธีการเตรียมตัวอย่างโดยการนำตัวอย่างใบชาสูบไปอบที่อุณหภูมิ 45 องศาเซลเซียส จนตัวอย่างแห้ง แล้วจึงนำไปบดให้เป็นผงละเอียดก่อนทำการวัดค่าการดูดกลืนแสง

1.3 อุปกรณ์ใส่ตัวอย่าง

อุปกรณ์สำหรับใส่ตัวอย่างมีรูปร่างและขนาดต่างๆ ทั้งแบบอยู่นิ่ง เคลื่อนที่ และหมุนขณะสแกนตัวอย่าง สำหรับการวัดค่าการดูดกลืนแสงที่มีการฉายแสงจากด้านบน อุปกรณ์ใส่ตัวอย่างควรมีกระจกใสปิดผิวตัวอย่างให้เรียบ แต่ถ้าไม่มีจะต้องใช้อุปกรณ์ใส่ตัวอย่างที่สามารถหมุนได้ เพื่อให้ได้พื้นที่ตัวอย่างหลายๆ ในการสแกน จากนั้นจึงนำค่าการดูดกลืนแสงที่ได้ไปเฉลี่ย นอกจากนี้ความหนาของระยะส่องผ่าน หรือระยะทางระหว่างผิวหน้าตัวอย่างถึงหัววัด (Path length) ที่แตกต่างกันจะมีอิทธิพลต่อการดูดกลืนแสงที่แตกต่างกันด้วย

1.4 การควบคุมอุณหภูมิ

ลักษณะสเปกตรัมของตัวอย่างจะขึ้นกับอุณหภูมิของตัวอย่างขณะทำการวิเคราะห์ โดยเฉพาะตัวอย่างที่มีความชื้นสูง อุณหภูมิจะทำให้ในตัวอย่างเกิดการเคลื่อนที่ ดังนั้นถ้าตัวอย่างที่มีอุณหภูมิแตกต่างกันมาวัดค่าการดูดกลืนแสงจะทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในการวิเคราะห์ได้ ระบบการควบคุมอุณหภูมิที่ใช้ในห้องทดลองส่วนใหญ่มีสองลักษณะ คือ ระบบควบคุมอุณหภูมิที่ใช้น้ำเป็นตัวพาความร้อน เช่น เครื่องควบคุมอุณหภูมิแบบอ่างน้ำ (Water bath) และ ระบบควบคุมที่ใช้ไฟฟ้า

1.5 การควบคุมความชื้น

ความชื้นจัดเป็นสิ่งที่สำคัญที่ต้องควบคุมในการเตรียมตัวอย่างหรือการวิเคราะห์การดูดกลืนแสง เนื่องจากน้ำเป็นองค์ประกอบที่มีการดูดกลืนแสงมากและรูปร่างสเปกตรัมของน้ำจะมียอดสูง ทำให้บดบังยอดสเปกตรัมที่เกิดจากการดูดกลืนแสงขององค์ประกอบอื่นได้ ดังนั้นจึงควรมี

การควบคุมความชื้นของตัวอย่างไม่ให้เปลี่ยนแปลงมากนัก เช่น การวิเคราะห์ตัวอย่างทันทีหลังจาก ลูบตัวอย่าง การเก็บตัวอย่างไว้ในภาชนะปิดเพื่อป้องกันการสูญเสียความชื้น การควบคุมความชื้น ขึ้นกับลักษณะของตัวอย่างเป็นสำคัญ สำหรับตัวอย่างที่มีความชื้นสูง การหลีกเลี่ยงไม่ให้มีการ เปลี่ยนแปลงความชื้นเป็นไปได้ยากกว่าตัวอย่างที่มีความชื้นต่ำ แต่ในกรณีที่ตัวอย่างมีคุณสมบัติไม่ คงความชื้น หรือมีการเปลี่ยนแปลงความชื้นยาก การควบคุมความชื้นก็ไม่มีผลจำเป็นมากนัก

2. การวิเคราะห์ข้อมูลที่ได้จากการวัดค่าด้วยเครื่อง NIR

การวัดค่าการดูดกลืนแสงจะได้ข้อมูลออกมาเป็นเส้นสเปกตรัมที่มีค่าการดูดกลืนแสง $\log 1/R$ หรือ $\log 1/T$ ที่ตำแหน่งความยาวคลื่นต่างๆ จากนั้นนำข้อมูลสเปกตรัมาหาความสัมพันธ์ กับค่าเคมีที่ต้องการศึกษา โดยใช้เทคนิคทางสถิติ เพื่อสร้างสมการทำนาย ซึ่งการวิเคราะห์ข้อมูล ต่างๆ มีรายละเอียดดังต่อไปนี้

2.1 การแบ่งกลุ่มตัวอย่างและจำนวนตัวอย่าง

การสร้างสมการทำนาย จะทำการแบ่งกลุ่มตัวอย่างออกเป็น 2 กลุ่ม คือตัวอย่างกลุ่มที่ใช้สร้างสมการทำนาย (Calibration set) และตัวอย่างกลุ่มที่ใช้ทดสอบความถูกต้องของสมการที่ สร้างขึ้น (Validation set) จำนวนตัวอย่างที่ใช้ทั้งหมดยังไม่มีการกำหนดตายตัว แต่ควรมีขั้นต่ำ จำนวน 100 ตัวอย่างจึงจะสามารถแยกตัวอย่างเป็นสองกลุ่มอิสระจากกันได้ (รณฤทธิ์, 2552) ใน กรณีที่ตัวอย่างมีจำนวนน้อย สามารถใช้ตัวอย่างกลุ่ม Calibration ในการทดสอบความสามารถของ สมการที่สร้างขึ้นได้ โดยเรียกการทดสอบสมการในลักษณะนี้ว่า การทดสอบความแม่นยำภายใน กลุ่ม (Cross validation) สัดส่วนในการแบ่งตัวอย่างออกเป็นกลุ่ม Calibration และ Validation สามารถใช้ได้หลายอัตราส่วน เช่น 80% ต่อ 20% , 75% ต่อ 25% และ 70% ต่อ 30% เป็นต้น

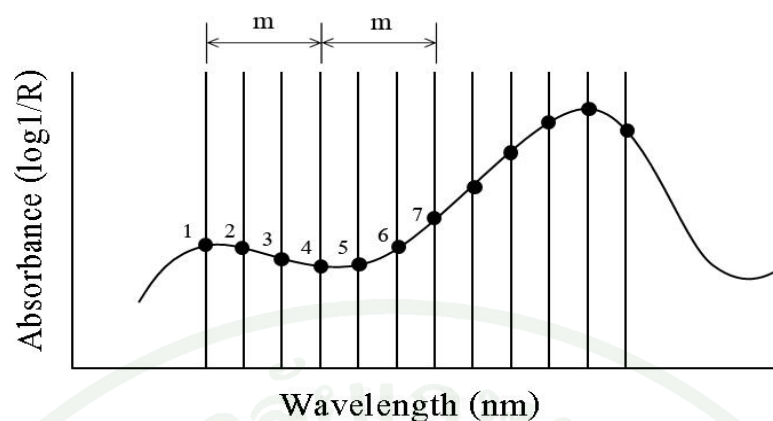
Lucas *et al.* (2008) ทำการวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีและกายภาพของชีสสดและชีสที่ ผ่านการทำแห้งแบบเยือกแข็ง (Freeze dried cheeses) ใช้ตัวอย่างชีสสดจำนวน 440 ตัวอย่าง แบ่งเป็นกลุ่ม Calibration จำนวน 357 ตัวอย่าง (81%) และกลุ่ม Validation 83 ตัวอย่าง (19%) สำหรับตัวอย่างชีสที่ทำแห้งแบบเยือกแข็ง มีจำนวนตัวอย่างทั้งหมด 445 ตัวอย่าง แบ่งเป็น กลุ่ม Calibration จำนวน 362 ตัวอย่าง (81%) และกลุ่ม Validation 83 ตัวอย่าง (19%)

Ritthiruangdej *et al.* (2005) ทำการวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีและกายภาพ และศึกษาการจำแนกตัวอย่างน้ำปลาไทย 100 ตัวอย่าง แบ่งเป็นกลุ่ม Calibration 70 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation 30 ตัวอย่าง สัดส่วนในการแบ่งกลุ่มตัวอย่างเป็น 70% ต่อ 30% เช่นเดียวกับ Liu *et al.* (2010) ที่วัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ในส้ม 128 ตัวอย่าง

2.2 การปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ (Pretreatment)

สเปกตรัม NIR เกิดจากการสั่นแบบ โอเวอร์โทน (Overtone vibration) และแบบ คอมบิเนชัน (Combination vibration) ของกลุ่มฟังก์ชันต่างๆ ในโมเลกุลทำให้สเปกตรัมมีความซับซ้อน อีกทั้งองค์ประกอบที่เป็นน้ำยังมีการดูดกลืนแสงมาก บดบังสเปกตรัมขององค์ประกอบอื่น ทำให้การระบุความยาวคลื่นที่มีการดูดกลืนแสงของกลุ่มฟังก์ชันเฉพาะเป็นไปได้ยาก รวมถึงปัจจัยต่างๆ ที่มีผลต่อการวัดค่าการดูดกลืนแสง ได้แก่ 1) การมีสัญญาณรบกวน ซึ่งอาจเกิดจากสนามไฟฟ้าของอุปกรณ์ไฟฟ้าใกล้เคียงส่งผลให้สเปกตรัมไม่เรียบ 2) การกระเจิงแสง เกิดจากขนาดอนุภาคของตัวอย่าง หรือความชื้นในตัวอย่าง ทำให้แสงเปลี่ยนทิศทาง ไม่ทะลุทะลวงลึกลงไปในตัวอย่งมากและสะท้อนกลับมาจากผิวโดยแทบไม่มีข้อมูลการดูดกลืนแสง ส่งผลต่อการดูดกลืนแสงที่แตกต่างกันตามความยาวคลื่น ดังนั้นก่อนนำข้อมูลสเปกตรัมไปวิเคราะห์ควรมีการดึงข้อมูลที่ไม่เกี่ยวข้องออกจากสเปกตรัมก่อน

2.2.1 Savitzky-Golay smoothing เป็นวิธีที่ปรับให้สัญญาณสเปกตรัมเรียบ โดยมีหลักการคือการแทนที่ค่า $\log(1/R)$ ที่จุดศูนย์กลางข้อมูลด้วยค่าใหม่ที่ได้จากสมการ เริ่มจากการกำหนดช่วงข้อมูลหรือจำนวนจุดที่นำมาหาสมการคือ $n = 2m + 1$ โดยที่ m คือ จำนวนของจุดทั้งสองด้านของจุดศูนย์กลาง ดังแสดงในภาพที่ 4 ในภาพ m เท่ากับ 3 ดังนั้น $n = 2(3) + 1$ เท่ากับ 7 จุด ต่อจากนั้นนำข้อมูลสเปกตรัม หรือ $\log(1/R)$ ในช่วงที่กำหนดมาหาสมการโพลิโนเมียล โดยวิธี Least square สมการที่ได้จะนำมาคำนวณสเปกตรัมใหม่ที่จุดศูนย์กลางช่วงข้อมูล แล้วนำค่าที่คำนวณได้ไปแทนค่าสเปกตรัมเดิมที่จุดศูนย์กลางนั้น ค่าที่คำนวณได้นี้จะถือว่าเป็นค่าที่ใกล้เคียงค่าจริงมากกว่าสเปกตรัมเริ่มต้น เนื่องจากสัญญาณรบกวนได้ถูกกำจัดออกไปแล้ว ขั้นตอนต่อไปคือเลื่อนช่วงที่เท่ากันนี้ไปทางขวา 1 จุด (อาจเป็น 2 หรือ 4 นาโนเมตร ขึ้นกับความละเอียดของข้อมูล) ทำซ้ำตามขั้นตอนข้างต้นจนครบตลอดช่วงความยาวคลื่น สุดท้ายข้อมูลสเปกตรัมที่สร้างขึ้นใหม่จะมีจำนวนข้อมูลช่วงเริ่มต้นหายไป m ข้อมูล และส่วนท้ายหายไป m ข้อมูล ข้อดีของวิธีการนี้คือสัญญาณสเปกตรัมจะเรียบและยังคงรูปร่างไว้เหมือนสเปกตรัมเริ่มต้น



ภาพที่ 4 ช่วงข้อมูลในการทำ Savitzky-Golay smoothing (m คือจำนวนจุดทั้งสองด้านของจุดศูนย์กลาง เท่ากับ 3)

Zhang *et al.* (2008) ใช้วิธี Savitzky-Golay smoothing ร่วมกับวิธีอนุพันธ์อันดับหนึ่ง เพื่อปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างใบยาสูบให้มีลักษณะเรียบและลดปัญหาการเลื่อนตัวของฐานสเปกตรัม ในศึกษาการวิเคราะห์หองค์ประกอบทางเคมีในใบยาสูบ

2.2.2 Multiplicative scatter correction (MSC) หรือการปรับแก้การกระเจิงแบบผลคูณ เป็นเทคนิคที่สร้างขึ้นเพื่อลดผลที่เกิดจากการกระเจิงแสงต่อสเปกตรัม NIR หลักการคือการหมุนสเปกตรัมที่มีความชันเปลี่ยนไปให้มาตรงกับสเปกตรัมเฉลี่ย โดยการหาค่าคงที่ 2 ตัวที่จะใช้ลบและหารค่าการดูดกลืนแสงของทุกจุดหรือทุกความยาวคลื่น เริ่มจากการใช้วิธีวิเคราะห์ความถดถอย (Regression) เพื่อหาสมการเส้นตรงของแต่ละตัวอย่าง ตัวอย่างสมการเส้นตรงดังแสดงในสมการที่ (3) ในแต่ละตัวอย่างจะได้ค่า a_i และ b_i อย่างละค่าแตกต่างกัน ซึ่งค่า a_i และ b_i นี้จะนำมาคำนวณหรือหมุนสเปกตรัม โดยค่าสเปกตรัมใหม่สามารถคำนวณได้ตามสมการที่ (4) โดยรูปร่างของสเปกตรัมหลังจากใช้วิธี MSC แล้วจะมีรูปร่างไม่แตกต่างจากสเปกตรัมก่อนการปรับแก้มาก

Pedro and Ferreira (2007) ศึกษาการสร้างสมการทำนายปริมาณน้ำตาลและกรดในผลิตภัณฑ์จากมะเขือเทศ ปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้วิธี Average smooth และ Fourier filter ตามด้วยอีก 3 วิธีที่แตกต่างกัน คือ วิธี MSC วิธีอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) และวิธีอนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) พบว่าวิธีปรับแต่ง Average smooth และ Fourier filter ตามด้วยวิธี MSC ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากที่สุด

$$x_{iw} = a_i + b_i \bar{x}_w \quad (3)$$

$$x_{i, \text{MSC}} = \frac{(x_{iw} - a_i)}{b_i} \quad (4)$$

เมื่อ x_{iw} คือ ค่า $\log(1/R)$ ของตัวอย่างที่ i ที่ความยาวคลื่น w ของตัวอย่างที่มี p ความยาวคลื่น

$\bar{x}_w$ คือ ค่าเฉลี่ย $\log(1/R)$ ที่ความยาวคลื่น w ของตัวอย่างทั้งหมด

a_i และ b_i คือ ค่าคงที่สำหรับสมการความถดถอยของตัวอย่าง i

W คือ ตำแหน่งข้อมูลสเปกตรัมหรือความยาวคลื่น มีค่าตั้งแต่ 1 ถึง p

Prieto *et al.* (2008) ศึกษาการวิเคราะห์คุณภาพเนื้อวัว ใช้วิธี MSC ในการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัม เพื่อลดความแปรปรวนจากการกระเจิงแสง เนื่องจากตัวอย่างเนื้อวัวที่นำมาวัดการดูดกลืนแสงเป็นตัวอย่างที่ไม่เป็นเนื้อเดียวกัน นอกจากนี้ยังมีการใช้วิธี First derivative และ Second derivative ร่วมด้วย เพื่อลดปัญหาการเลื่อนตัวของฐานสเปกตรัม

2.2.3 Derivative transformation หรือการแปลงค่าด้วยวิธีอนุพันธ์ เป็นวิธีที่ช่วยแก้ปัญหาการซ้อนทับกันของจุดยอดในสเปกตรัมและการเลื่อนขึ้นของสเปกตรัมทั้งแบบสเปกตรัมมีค่าเพิ่มขึ้นคงที่ตลอดช่วงความยาวคลื่น (Baseline offset) และเพิ่มขึ้นเสมือนถูกบวกเพิ่มด้วยเส้นตรงที่มีความชันเป็นบวก (Baseline shift)

ก. อนุพันธ์อันดับหนึ่ง (First derivative) การวิเคราะห์ค่าอนุพันธ์หรือค่าความชันของสเปกตรัม เริ่มจากการกำหนดช่วงข้อมูล โดยกำหนดขนาดของเซกเมนต์ (Segment size) และขนาดของช่องว่าง (Gap size) ดังแสดงในภาพที่ 5 ในภาพขนาดเซกเมนต์เท่ากับ 12 นาโนเมตร และขนาดช่องว่างเท่ากับ 10 นาโนเมตร (ในกรณีนี้สเปกตรัมในแต่ละจุดห่างกัน 2 นาโนเมตร) นำข้อมูลสเปกตรัมทั้ง 7 จุดในช่วงเซกเมนต์แรกมาหาค่าเฉลี่ย จะได้ค่า A เป็นตัวแทนของเซกเมนต์ที่หนึ่ง จากนั้นข้ามสเปกตรัมไปเท่ากับขนาดของช่องว่างและคำนวณหาค่าเฉลี่ยของสเปกตรัมทั้ง 7 จุดในช่วงเซกเมนต์ที่สอง ซึ่งจะได้ค่า B เป็นตัวแทน แล้วจึงนำค่า A ลบออกจากค่า B ดังแสดงในสมการที่ (5) ผลที่ได้นำไปแทนค่าสเปกตรัมที่จุดเริ่มต้นของเซกเมนต์แรก ซึ่งการคำนวณจะทำทุกเซกเมนต์ต่อเนื่องกันไปจนตลอดความยาวคลื่นทั้งหมด ขั้นต่อไปคือเลื่อนเซกเมนต์ไปทางขวา 1 จุด แล้วคำนวณซ้ำเหมือนที่กล่าวมาข้างต้นจนเสร็จสิ้น

$$\text{First derivative} = \text{slope} = B - A \quad (5)$$

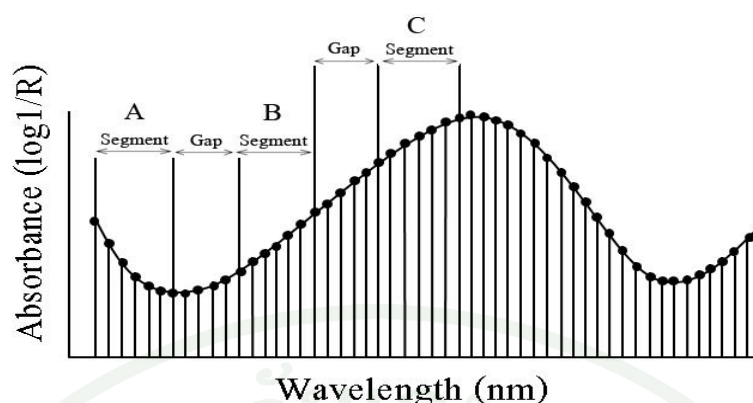
เมื่อ A และ B คือค่าเฉลี่ยสเปกตรัมของเซกเมนต์ที่มีช่วงเท่ากันและอยู่ติดกัน

Abeni and Bergoglio (2001) ใช้วิธี First derivative ในการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมของเนื้อไก่ส่วนอก ที่วัดการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่น 400-2500 นาโนเมตร ในการวิเคราะห์คุณภาพเคมีและกายภาพของเนื้อไก่ต้ม

Downey *et al.* (2005) ศึกษาการสร้างสมการทำนายความแก่อ่อน และคุณลักษณะทางประสาทสัมผัสของชีส ใช้ข้อมูลสเปกตรัม 3 แบบ ได้แก่ 1) สเปกตรัมที่ไม่มีการปรับแต่ง (Raw spectra) 2) สเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธี First derivative ร่วมกับวิธี MSC และ 3) สเปกตรัมที่ปรับแต่งด้วยวิธี Second derivative ร่วมกับวิธี MSC พบว่าการใช้วิธี First derivative ร่วมกับวิธี MSC ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากที่สุด ส่วนวิธี Second derivative ร่วมกับวิธี MSC แม้จะให้ความแม่นยำน้อยกว่า แต่สมการที่สร้างขึ้นมีจำนวนตัวแปรใหม่ (Factor) น้อยกว่า ซึ่งก็อาจทำให้สมการที่สร้างขึ้นมีความสามารถในการทำนายได้ดีเช่นกัน

Terhoeven-Urselmans *et al.* (2008) ใช้วิธี First derivative วิธี Second derivative และ Third derivative ในการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างดิน โดยใช้ขนาดช่องห่าง (Gap size) แตกต่างกัน ตั้งแต่ 1-20 จุดข้อมูล (สเปกตรัมในแต่ละจุดห่างกัน 2 นาโนเมตร) ในการวิเคราะห์คุณภาพดิน พบว่าการปรับแต่งทั้งสามวิธี ให้สมการทำนายคุณภาพดินที่มีความถูกต้องแม่นยำใกล้เคียงกัน

ข. อนุพันธ์อันดับสอง (Second derivative) เป็นการคำนวณผลลบของค่าที่ได้จากอนุพันธ์อันดับหนึ่งที่อยู่ติดกัน หรือเรียกว่าเป็นการคำนวณการเปลี่ยนแปลงความชันของสเปกตรัม การวิเคราะห์เริ่มจากการกำหนดช่วงข้อมูลเช่นเดียวกับที่กล่าวในวิธี First derivative จากนั้นนำค่าสเปกตรัมทั้ง 7 จุดในเซกเมนต์ที่สาม (ดังแสดงในภาพที่ 5) มาหาค่าเฉลี่ยของสเปกตรัมหรือค่า C แล้วคำนวณผลลบของค่าเฉลี่ยในเซกเมนต์ที่หนึ่งและสองซึ่งคือ B - A กับผลลบของค่าเฉลี่ยในเซกเมนต์ที่สองและสามซึ่งก็คือ C - B แล้วนำผลลบค่าแรกลบออกจากผลลบค่าที่สอง ตามสมการที่ (6) ค่าผลลบสุดท้ายที่ได้นำไปแทนค่าสเปกตรัมที่จุดแรกของเซกเมนต์ที่หนึ่ง ซึ่งการคำนวณจะทำทุกเซกเมนต์ต่อเนื่องกันไปจนตลอดความยาวคลื่นทั้งหมด ขึ้นต่อไปคือเลื่อนเซกเมนต์ไปทางขวา 1 จุดแล้วคำนวณซ้ำเหมือนที่กล่าวมาข้างต้นจนเสร็จสิ้น



ภาพที่ 5 ช่วงข้อมูลในการแปลงค่าเป็นอนุพันธ์ โดย A คือช่วงที่หนึ่ง B คือช่วงที่สอง และ C คือช่วงที่สาม)

$$\text{Second derivative} = (B - A) - (C - B) \quad (6)$$

เมื่อ A, B และ C คือค่าเฉลี่ยสเปกตรัมของเซกเมนต์ที่มีช่วงเท่ากันและอยู่ติดกัน

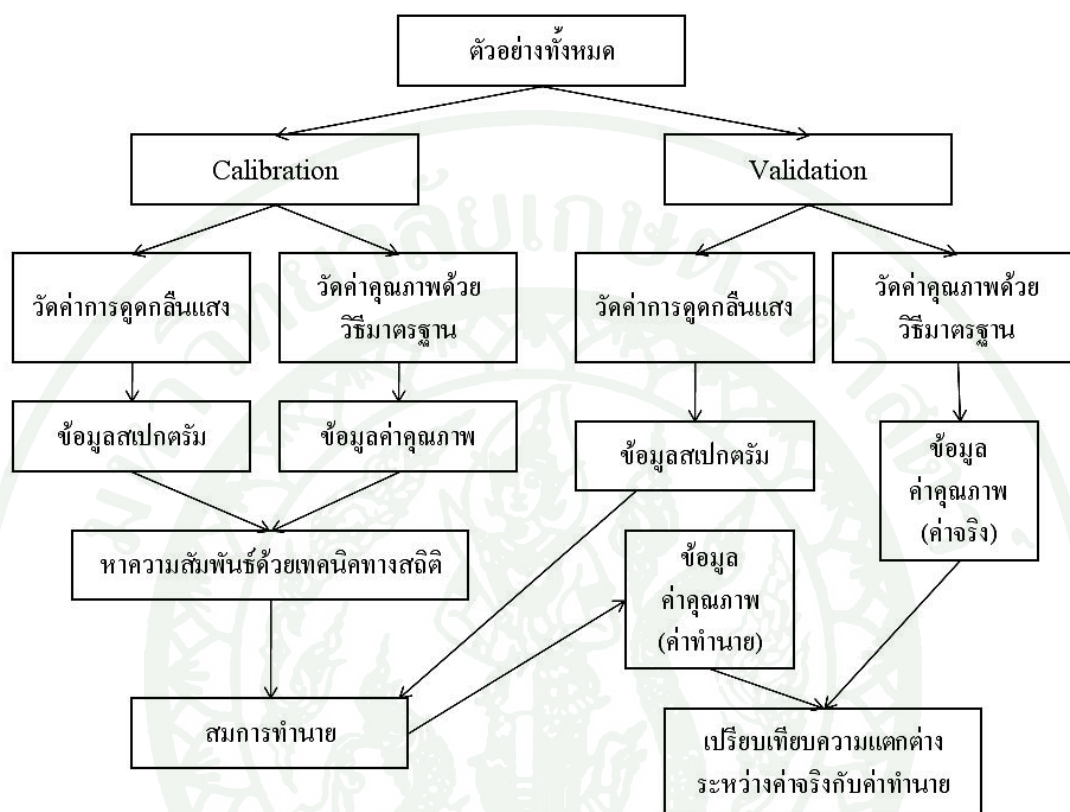
Yano *et al.* (1997) ใช้วิธี Second derivative ในการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมของน้ำส้มสายชู ที่วัดการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่น 400-2500 นาโนเมตร ในการศึกษาการวิเคราะห์ความเข้มข้นของเอทานอลและกรดอะซิติกในน้ำส้มสายชูที่ทำจากข้าว

Kasemsumran *et al.* (2007) ใช้วิธี MSC แบบเต็มรูปแบบ และ MSC ร่วมกับวิธี Second derivative ในการศึกษาการคัดแยกน้ำมันบริสุทธิ์และนมที่มีการเจือปน พบว่าวิธีการปรับแต่งด้วย MSC ร่วมกับวิธี Second derivative ให้ผลการทำนายที่มีประสิทธิภาพสูงสุด เนื่องจากสามารถลดปัญหาการกระเจิงแสงของตัวอย่างนม และขยายให้เห็นความแตกต่างของสเปกตรัมนมบริสุทธิ์และนมที่มีการเจือปน

2.3 การสร้างสมการทำนาย

ขั้นตอนการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมเพื่อสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพ ดังแสดงในภาพที่ 6 ประกอบไปด้วย 2 ขั้นตอนหลัก ได้แก่ 1) ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย (Calibration) เพื่อให้ได้สมการที่จะใช้ในการทำนายค่าคุณภาพ และ 2) ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้น (Validation) เพื่อทดสอบความน่าเชื่อถือของสมการว่ามีความเหมาะสมหรือ

แม่นยำหรือไม่ โดยรายละเอียดขั้นตอนการสร้างสมการและการตรวจสอบความถูกต้องอธิบายได้ดังนี้ (Hruschka, 1990)



ภาพที่ 6 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนายและการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้น

ที่มา: ดัดแปลงจาก Hruschka (1990)

2.3.1 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนาย (Calibration) เริ่มจากการนำตัวอย่างในกลุ่มสร้างสมการมาวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยวิธี NIRS และวิธีมาตรฐาน (Reference methods) จากนั้นนำข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ) และข้อมูลค่าคุณภาพ (ตัวแปรตาม) มาหาความสัมพันธ์ด้วยเทคนิคทางสถิติ เช่น วิธี Partial least squares regression (PLSR) เพื่อสร้างสมการทำนายที่ใช้ในการทำนายค่าคุณภาพที่ต้องการศึกษา ประสิทธิภาพของสมการที่สร้างขึ้นพิจารณาได้จากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) และค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (RMSEC) วิธีการคำนวณ ดังแสดงในสมการที่ (7) และ (8) ตามลำดับ

$$R = \frac{\sum XY - n\bar{X}\bar{Y}}{\sqrt{(\sum X^2 - n\bar{X}^2)(\sum Y^2 - n\bar{Y}^2)}} \quad (7)$$

$$RMSEC = \sqrt{\frac{\sum (X-Y)^2}{n-1}} \quad (8)$$

เมื่อ X คือ ข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ)

Y คือ ข้อมูลค่าคุณภาพ (ตัวแปรตาม)

n คือ จำนวนตัวอย่าง

2.3.2 ขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ (Validation) เป็นการทดสอบว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถนำมาใช้ทำนายข้อมูลชุดอื่นได้หรือไม่ เริ่มจากการนำตัวอย่างกลุ่มใหม่มาวิเคราะห์ตัวอย่างด้วยวิธี NIRS และวิธีมาตรฐาน โดยค่าคุณภาพที่ได้จากวิธีมาตรฐานเรียกว่าค่าที่วัดจริง (Actual value) จากนั้นนำข้อมูลค่าการดูดกลืนแสงของความยาวคลื่นต่างๆ แทนค่าในสมการที่สร้างได้จากขั้นตอน Calibration ข้อ 2.3.1 เพื่อทำนายค่าคุณภาพที่ต้องการทราบ เรียกว่าค่าที่ได้ว่าค่าทำนาย (Predicted value) ทำการเปรียบเทียบค่าที่วัดจริง (กำหนดให้เป็นข้อมูล X) และค่าทำนาย (กำหนดให้เป็นข้อมูล Y) ประสิทธิภาพของสมการพิจารณาได้จากค่า R ค่าความคลาดเคลื่อนจากการทำนาย (Standard error of prediction, SEP) ค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนกำลังสองจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Root mean square error prediction in prediction, RMSEP) และค่า Ratio of standard error of prediction to standard deviation (RPD) วิธีการคำนวณหาค่า SEP, RMSEP และ RPD ดังแสดงในสมการที่ (9), (10) และ (11) ตามลำดับ William (2007) อธิบายการแปลผลว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพในการทำนายหรือไม่สามารถพิจารณาได้จากค่า R และ RPD แสดงดังตารางที่ 1

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum (X-Y)^2 - \frac{(\sum (X-Y))^2}{n}}{n-1}} \quad (9)$$

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum (X-Y)^2}{n-1}} \quad (10)$$

$$RPD = \frac{SD}{SEP} \quad (11)$$

เมื่อ X คือ ข้อมูลค่าที่วัดจริง (Actual value)

Y คือ ข้อมูลค่าทำนาย (Predicted value)

n คือ จำนวนตัวอย่าง

SD คือ ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของชุดข้อมูลตรวจสอบความถูกต้อง

ตารางที่ 1 ประสิทธิภาพของสมการทำนาย โดยพิจารณาจากค่า R และ RPD

R	RPD	ประสิทธิภาพของสมการทำนาย
+/-0.51 - 0.70	0.0 - 2.3	ไม่ดี ไม่สามารถใช้เป็นสมการทำนายได้
+/-0.71 - 0.80	2.4 - 3.0	สามารถใช้ในการคัดเลือกเบื้องต้นได้
+/-0.81 - 0.90	3.1 - 4.9	สามารถใช้ในการคัดเลือก หรือตรวจสอบคุณภาพบางอย่างได้
+/-0.91 - 0.95	5.0 - 6.4	สามารถใช้ในการตรวจสอบคุณภาพได้
+/-0.96 - 0.98	6.5 - 8.0	ดี สามารถใช้ได้กับงานประกันคุณภาพได้
+/-0.99 +	8.1 +	ดีมาก สามารถใช้ได้กับทุกงาน

ที่มา: ดัดแปลงจาก William (2007)

3. การประยุกต์ใช้เทคนิค NIRS ในอุตสาหกรรมเกษตร

การใช้ประโยชน์ของเทคนิค NIRS ในประเทศไทย สามารถแบ่งการใช้งานได้ออกเป็น 2 ด้าน คือ 1) ใช้ในงานวิเคราะห์ด้านปริมาณ (Quantitative analysis) ในลักษณะของวิธีประจำในการวิเคราะห์แบบรวดเร็ว (Rapid analytical routine method) เพื่อหาความเข้มข้นของตัวอย่างหรือสารที่ดูดกลืนแสง NIR การประยุกต์ใช้งานส่วนใหญ่จะเป็นการตรวจสอบคุณภาพของวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์ในขั้นตอนสุดท้าย โดยองค์ประกอบทางเคมีที่มีการตรวจวิเคราะห์ ได้แก่ ความชื้น โปรตีน คาร์โบไฮเดรต ไขมัน เส้นใย และเถ้า และ 2) ใช้ในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (Qualitative analysis) เพื่อจำแนกหรือแบ่งกลุ่มของตัวอย่าง เทคนิค NIRS ถูกนำมาใช้ในอุตสาหกรรมเกษตรและอาหารถึง 70% ของปริมาณการใช้เทคนิค NIRS ทั้งหมด (วารุณี, 2552) โดยอุตสาหกรรมต่างๆ ในประเทศไทยที่มีการใช้เทคนิค NIRS เช่น อุตสาหกรรมมันสำปะหลัง อุตสาหกรรมอาหารสัตว์ และสัตว์น้ำ อุตสาหกรรมแป้งจากข้าวและข้าวสาลี อุตสาหกรรมนมและผลิตภัณฑ์นม และ อุตสาหกรรมน้ำมันพืช เป็นต้น ข้อมูลแสดงดังตารางที่ 2

ตารางที่ 2 การใช้ประโยชน์เทคนิค NIRS ในประเทศไทย

อุตสาหกรรม	ชนิดและวัตถุดิบและผลิตภัณฑ์	องค์ประกอบทางเคมีที่วิเคราะห์
มันสำปะหลัง	มันแผ่นและมันอัดเม็ด	ความชื้น โปรตีน คาร์โบไฮเดรต เส้นใย เถ้า
อาหารสัตว์และสัตว์น้ำ	วัตถุดิบ (ข้าวโพด ข้าวสาลี ปลาป่น กระดูกป่น ถั่วเหลืองป่น ปลาขี้ขาว และผลิตภัณฑ์สำเร็จ)	ความชื้น โปรตีน ไขมัน เส้นใย เถ้า
แป้ง (ข้าวสาลีและอื่นๆ)	วัตถุดิบ (สึนค้ำนำเข้า) และผลิตภัณฑ์สำเร็จ	ความชื้น โปรตีน คาร์โบไฮเดรต เส้นใย เถ้า กลูเตน
นมและผลิตภัณฑ์นม	น้ำนมดิบ นมผง นมหวาน	ความชื้น โปรตีน คาร์โบไฮเดรต ไขมัน
น้ำมันพืช	วัตถุดิบ (ถั่วเหลือง รำข้าว)	ความชื้น โปรตีน น้ำมัน กรดไขมันอิสระ

ที่มา: วารุณี (2552)

3.1 การวิเคราะห์คุณภาพเครื่องปรุงรส

การประยุกต์ใช้เทคนิค NIRS สำหรับตรวจสอบเครื่องปรุงรสของไทยยังไม่เป็นที่แพร่หลายมากนัก มีเพียงการตรวจสอบคุณภาพของน้ำปลาไทยเท่านั้น โดยมีทั้งการตรวจสอบคุณภาพทางด้านเคมีและกายภาพ (Ritthiruangdej *et al.*, 2005) และคุณภาพทางด้านประสาทสัมผัส (Ritthiruangdej and Suwonsichon, 2007) ส่วนงานวิจัยของต่างประเทศที่ศึกษาเกี่ยวกับการใช้เทคนิคนี้ในการตรวจสอบคุณภาพของเครื่องปรุงรสมิได้เช่น การวิเคราะห์ปริมาณไขมันและความชื้นในมายองเนส (Chippie *et al.*, 2002) การศึกษาความเป็นไปได้ในการจำแนกตัวอย่างไวน์และน้ำส้มสายชู เพื่อใช้ในการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำส้มสายชู (Sáiz-Abajo *et al.*, 2004) และการจำแนกซอสถั่วเหลืองโดยใช้ข้อมูลการดูดกลืนแสง (Iizuka and Aishima, 1997) เป็นต้น

3.2 การวิเคราะห์คุณภาพน้ำผึ้ง

ผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ที่ใช้ในการวิจัยในครั้งนี้ เป็นเครื่องปรุงรสที่มีส่วนประกอบหลักคือน้ำตาล มีลักษณะเหนียวและข้นหนืด เช่นเดียวกับผลิตภัณฑ์น้ำผึ้ง ซึ่งงานวิจัยที่ใช้เทคนิค NIRS ในการตรวจสอบคุณภาพของน้ำผึ้งมีดังนี้

Qiu *et al.* (1999) ศึกษาคุณภาพทางเคมีของน้ำผึ้ง โดยองค์ประกอบทางเคมีที่ทำการศึกษาได้แก่ ความชื้น ไฮดรอกซีเมทิลเฟอรูล (Hydroxymethylfurfural, HMF) น้ำตาลฟรุกโตส กลูโคส ซูโครส มอลโตส กรดไขมันอิสระ และแลคโตน พบว่าเทคนิค NIRS สามารถใช้ตรวจสอบปริมาณความชื้น น้ำตาลฟรุกโตส กลูโคส ซูโครส และมอลโตส ซึ่งเป็นส่วนประกอบหลักของน้ำผึ้ง ได้อย่างแม่นยำ แต่ไม่สามารถใช้วิเคราะห์ปริมาณ HMF กรดไขมันอิสระ และแลคโตน ซึ่งเป็นองค์ประกอบรอง หรือองค์ประกอบที่มีปริมาณน้อยได้

García-Alvarez *et al.* (2000) ศึกษาการวิเคราะห์ส่วนประกอบหลักของน้ำผึ้งด้วยเทคนิค NIRS โดยใช้ตัวอย่างน้ำผึ้งซึ่งผลิตในปีแตกต่างกัน 3 ปี พบว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นแยกตามปีที่ผลิตสามารถตรวจสอบปริมาณน้ำตาลฟรุกโตส กลูโคส และความชื้นในน้ำผึ้งที่ผลิตในปีนั้นได้ผลดี แต่ไม่สามารถใช้ทำนายค่าคุณภาพของน้ำผึ้งในปีอื่นได้ ยกเว้นการทำนายปริมาณความชื้น อย่างไรก็ตามเมื่อทำการสร้างสมการทำนายที่รวมน้ำผึ้งทั้ง 3 ปีเข้าไว้ในสมการเดียวกัน พบว่าสามารถสร้างสมการทำนายปริมาณน้ำตาลฟรุกโตส กลูโคส และความชื้นของน้ำผึ้งได้ โดยการตรวจสอบคุณภาพน้ำผึ้งด้วย NIRS เทียบกับวิธีการตรวจสอบมาตรฐาน ไม่มีความแตกต่างกันทางสถิติ ($p > 0.05$)

Downey *et al.* (2003) นำเทคนิค NIR transreflectance spectroscopy มาใช้ศึกษาการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำผึ้ง โดยการใส่น้ำตาลฟรุกโตสและกลูโคสอัตราส่วน 0.7:1, 1.2:1 และ 2.3:1 (%w/w) วัดการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่น 400-2498 นาโนเมตร พบว่าตำแหน่งความยาวคลื่น 2266, 2276, 2322, 2354, 2376, 2420, 2448 และ 2484 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับน้ำตาลฟรุกโตส ส่วนตำแหน่งความยาวคลื่น 2276, 2324 และ 2454 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับน้ำตาลกลูโคส เทคนิคทางสถิติที่ใช้ในการสร้างสมการจำแนกมี 3 วิธี ได้แก่ วิธี Partial least squares regression (PLSR), k -Nearest neighbors (k -NN) และ Soft independent modeling of class analogy (SIMCA) พบว่าวิธี PLSR ให้ผลการตรวจสอบการปลอมปนของน้ำผึ้งได้ถูกต้องและแม่นยำมากที่สุด

Woodcock *et al.* (2007) ศึกษาการจำแนกถิ่นกำเนิดทางภูมิศาสตร์ของน้ำผึ้ง โดยใช้ตัวอย่างน้ำผึ้ง 2 แบบ คือ น้ำผึ้งที่ผ่านการกรองและไม่ผ่านการกรอง ทำการวิเคราะห์ผลด้วยวิธี PLSR เปรียบเทียบกับวิธี SIMCA พบว่าตำแหน่งความยาวคลื่นที่มีความสำคัญในการใช้จำแนกถิ่นกำเนิดของน้ำผึ้ง คือ 1420-1434, 1900 และ 1960 นาโนเมตร การสร้างสมการจำแนกถิ่นกำเนิดของน้ำผึ้งที่ไม่ผ่านการกรองด้วยวิธี SIMCA และ PLSR ให้ผลการจำแนกถูกต้องสูงถึง 94% และ 100% ตามลำดับ สำหรับน้ำผึ้งที่ผ่านการกรอง พบว่าสามารถจำแนกถิ่นกำเนิดของน้ำผึ้งได้ดีเช่นเดียวกัน โดยวิธี SIMCA และ PLSR ให้ผลการจำแนกถูกต้องสูงมากกว่า 91% และ 96% ตามลำดับ

นอกจากนี้ยังมีการนำเทคนิค NIRS มาประยุกต์ใช้ในตัวอย่างต่างๆ โดยใช้ในการตรวจสอบคุณภาพตั้งแต่วัตถุดิบจนถึงผลิตภัณฑ์ ในการตรวจสอบคุณภาพสามารถตรวจสอบได้หลายค่า เช่น ปริมาณน้ำตาล ปริมาณกรด ค่าสี ความเผ็ด และค่าคุณภาพทางประสาทสัมผัส เป็นต้น

3.3 การวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาล

Roggo *et al.* (2004) ศึกษาการวิเคราะห์คุณภาพของอ้อย ในเรื่องปริมาณซูโครส ค่า Brix ค่า Marc ปริมาณกลูโคส ไนโตรเจน โซเดียม โพแทสเซียม น้ำตาลในโมลาส และความบริสุทธิ์ของน้ำอ้อย สร้างสมการทำนายโดยใช้วิธี Modified PLSR พบว่าการสร้างสมการทำนายค่า Brix ค่า Marc ปริมาณน้ำตาลในโมลาส และความบริสุทธิ์ของน้ำอ้อย ให้สมการทำนายที่มีความแม่นยำสูง ส่วนสมการทำนายค่าคุณภาพอื่นๆ มีความแม่นยำน้อย แต่สามารถใช้ในการคัดเลือกได้

Xie *et al.* (2009) ศึกษาการวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลกลูโคส ฟรุคโตส และซูโครส ในน้ำเบย์เบอร์รี่ (Bayberry) ใช้ตัวอย่างจำนวน 120 ตัวอย่าง ทำการสแกนในช่วงความยาวคลื่น 800-2400 นาโนเมตร การสร้างสมการทำนายใช้วิธี PLSR โดยใช้วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมหลายวิธี พบว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้น สามารถทำนายได้อย่างถูกต้องแม่นยำ ยกเว้นปริมาณกลูโคส และการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี Second derivative ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพดีที่สุด โดยเฉพาะสมการทำนายปริมาณซูโครส มีค่า R^2 เท่ากับ 0.9931

3.4 การวิเคราะห์ปริมาณกรด

Chung and Ku (2003) ศึกษาการควบคุมกระบวนการผลิตกรดอะซิติก โดยทำการวิเคราะห์ปริมาณกรดอะซิติก เมทิลอะซิเตต (Methyl acetate) เมทิลไอโอไดด์ (Methyl iodide) น้ำ

และไอโอดีนไอออน (Iodide ion) ใน 2 ช่วงความยาวคลื่น คือ 1100-1900 นาโนเมตร และ 1100-2100 นาโนเมตร สร้างสมการทำนายด้วยเทคนิค PLSR พบว่าการใช้ช่วงความยาวคลื่น 1100-1900 นาโนเมตร ให้สมการทำนายปริมาณกรดอะซิติก เมทิลไอโอได และไอโอไดไอออนที่มีประสิทธิภาพสูงกว่าการใช้ความยาวคลื่น 1100-2100 นาโนเมตร ส่วนสมการทำนายปริมาณ เมทิลอะซิเตต และน้ำ การใช้ความยาวคลื่น 1100-2100 นาโนเมตร ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากกว่า

Shao and He (2009) ศึกษาการวัดปริมาณของแข็งที่ละลายได้ และค่าความเป็นกรด-ด่าง (pH) ของโยเกิร์ต จำนวน 160 ตัวอย่าง สร้างสมการทำนายด้วยวิธี PLSR และวิธี Least squares support vector machine (LS-SVM) พบว่า วิธี LS-SVM ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากกว่าวิธี PLSR โดยสมการทำนายปริมาณของแข็งที่สามารถละลายได้และค่า pH มีค่า RMSEP เท่ากับ 0.2621°Brix และ 0.0327 ตามลำดับ

3.5 การวิเคราะห์ค่าสี

Savenije *et al.* (2006) ศึกษาการวิเคราะห์คุณภาพทางกายภาพของเนื้อหมู ในช่วงความยาวคลื่นที่แตกต่างกัน 6 ช่วง ได้แก่ 400-800, 400-1100, 800-1100, 800-2500, 1100-2500 และ 400-2500 นาโนเมตร ใช้ตัวอย่างเนื้อหมูส่วนเนื้อแดง 207 ตัวอย่าง พบว่าช่วงความยาวคลื่นที่สามารถสร้างสมการทำนายค่าสี L^* และ b^* ได้ดีที่สุดคือช่วง 400-800 นาโนเมตร และสำหรับสมการทำนายค่าสี a^* คือช่วง 400-1100 นาโนเมตร โดยสมการทำนายค่าสี L^* , a^* และ b^* มีค่า R_{val} เท่ากับ 0.89, 0.72 และ 0.84 ตามลำดับ

Prieto *et al.* (2008) ศึกษาการวิเคราะห์คุณภาพทางกายภาพของเนื้อวัว ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร โดยใช้ตัวอย่างเนื้อวัวที่โตเต็มวัย 53 ตัวอย่าง และเนื้อลูกวัว 67 ตัวอย่าง ทำการวิเคราะห์คุณภาพในเรื่องค่า pH ค่าสี (L^* , a^* และ b^*) ความสามารถในการอุ้มน้ำ และค่า Warner–Braztler shear force พบว่าเทคนิค NIRS สามารถใช้ในการตรวจคุณภาพค่าสีของตัวอย่างเนื้อลูกวัวได้ โดยให้สมการทำนายค่าสี L^* และ b^* ที่มีความแม่นยำ มีค่า R^2 เท่ากับ 0.869 และ 0.901 ตามลำดับ สมการทำนายค่าสี a^* มีประสิทธิภาพต่ำ อาจเนื่องมาจากในเนื้อสัตว์มีฮีโมโกลบิน (โปรตีนที่มีผลต่อค่าสีแดงในเนื้อสัตว์) อยู่หลายแบบ จึงทำให้มีความแตกต่างด้านเฉดสีแดง เป็นสีแดงสว่าง สีม่วง สีนํ้าตาล ตามลำดับ

3.6 การวิเคราะห์ความเค็ล

Lee *et al.* (2005) ศึกษาการวิเคราะห์หึ่งค้ประกอบทางเคมีของผงพริกแดงจำนวน 72 ตัวอย่าง แบ่งเป็นชุด Calibration 51 ตัวอย่าง และชุด Validation 21 ตัวอย่าง สร้างสมการทำนาย ปริมาณความชื้น ค่าสี ปริมาณแคปไซซินอยด์ และปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ด้วยเทคนิค Modified PLSR พบว่าสมการทำนายที่สร้างได้มีค่า R เท่ากับ 0.90, 0.96, 0.65 และ 0.86 ตามลำดับ มีความแม่นยำในการทำนาย ยกเว้นสมการทำนายปริมาณแคปไซซินอยด์ที่มีประสิทธิภาพในการทำนายค่อนข้างต่ำ

3.7 การวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัส

Esteban-Díez *et al.* (2004) ศึกษาการวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัสของกาแฟ เอสเปรสโซ (Espresso) โดยใช้ผู้ทดสอบชิมที่ผ่านการฝึกฝน 11 คน ในการทดสอบตัวอย่างกาแฟ คั่ว 35 ตัวอย่าง ใน 4 คุณลักษณะ ได้แก่ ความรู้สึกเป็นกรด ความรู้สึกภายในปาก ความขม และ ความรู้สึกหลังกลืน การเสิร์ฟตัวอย่างใช้กาแฟคั่ว 10 กรัม ใส่แก้วแล้วเติมน้ร้อน 100 มิลลิลิตร ทำ การทดสอบตัวอย่างละ 3 ซ้การทดลอง การสร้างสมการทำนายใช้วิธี PLSR เปรียบเทียบกับวิธี Iterative predictor weighting partial least square regression (IPW-PLSR) พบว่าวิธี IPW-PLSR ให้ สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพสูงกว่า และมีค่า Root mean square errors of the residuals in cross-validation (RMSECV) อยู่ในช่วง 4.7-7.0%

Karoui *et al.* (2006) ศึกษาความเป็นไปได้ในการวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัส ของชีส ในด้านลักษณะปรากฏและเนื้อสัมผัส (ความเคาเคัด ความร่วน ความยืดหยุ่น ความแน่น เนื้อ) และด้านความรู้สึกในปาก (ความเข้มกลืน ความเข้มกลืนรส ความขม ความเค็ม ความเป็นกรด ความหวาน) รวมแล้ว 10 คุณลักษณะ ใช้ผู้ทดสอบชิมที่ผ่านการฝึกฝน ทำการชิมตัวอย่างชีสจำนวน 20 ตัวอย่าง การสร้างสมการทำนายใช้เทคนิค PLSR โดยก่อนสร้างสมการทำนายมีการใช้เทคนิค Principal component analysis (PCA) ในการจัดกลุ่มข้อมูลทางประสาทสัมผัส และข้อมูลสเปกตรัม เป็นตัวแปรใหม่ พบว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นมีค่า R^2 มากกว่า 0.5 ยกเว้นสมการทำนายความร่วน และกลืนของชีส สมการทำนายที่สร้างขึ้นมีความแม่นยำในการทำนายน้อย อาจเนื่องมาจากจำนวน ตัวอย่างน้อยเกินไป อย่างไรก็ตามเทคนิค NIRS มีความเป็นไปได้ที่จะใช้ในการวิเคราะห์คุณภาพ ทางประสาทสัมผัสของชีสได้

การวิเคราะห์ข้อมูลหลายตัวแปร

การวิเคราะห์ข้อมูลหลายตัวแปร (Multivariate analysis) เป็นเทคนิคทางสถิติที่ใช้ในการหาความสัมพันธ์ของตัวแปรตั้งแต่ 2 ตัวขึ้นไป นอกจากนี้ยังช่วยในการจัดกลุ่มของตัวแปรที่มีความเกี่ยวข้องกันและทำนายค่าตัวแปรตัวใหม่โดยอาศัยหลักความสัมพันธ์ที่มีอยู่เดิม งานวิจัยด้านสเปกโตรสโกปีนิยมใช้การวิเคราะห์ข้อมูลหลายตัวแปรเนื่องจากมีข้อมูลสเปกตรัมจำนวนมาก เมื่อนำข้อมูลมาสร้างสมการทำนายจะได้สมการทำนายที่มีตัวแปรอิสระมากเกินไป ทำให้อาจเกิดความคลาดเคลื่อนได้ เทคนิคทางสถิติที่ใช้สร้างสมการทำนายในงานวิจัยนี้ได้แก่ Partial least squares regression (PLSR), Moving window partial least squares regression (MWPLSR), Searching combination moving window partial least squares regression (SCMWPLSR) และ Back propagation artificial neural network (BP-ANN)

1. Partial least squares regression (PLSR)

PLSR เป็นเทคนิคที่ใช้สร้างสมการถดถอย โดยการจัดกลุ่มตัวแปรอิสระ (ข้อมูลสเปกตรัม) สร้างเป็นตัวแปรหรือแฟกเตอร์ (Factor) ใหม่ นั้น จะมีการนำข้อมูลตัวแปรตามที่ได้จากวิธี Reference methods เข้ามาร่วมในการสร้างแฟกเตอร์ด้วย ทำให้ค่า Factor score ที่สร้างขึ้นใหม่มีความสัมพันธ์กับตัวแปรตาม สามารถสร้างสมการ Calibration อธิบายความสัมพันธ์ระหว่างแฟกเตอร์กับตัวแปรตามได้ถูกต้องมากขึ้น

งานวิจัย NIRS ส่วนมากนิยมใช้เทคนิค PLSR ในการสร้างสมการทำนาย เนื่องจากไม่มีข้อจำกัดในเรื่องจำนวนตัวแปร สามารถใช้ข้อมูลสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่นที่ศึกษาในการสร้างสมการทำนายได้ งานวิจัยที่ใช้เทคนิค PLSR ในการสร้างสมการมีอยู่หลากหลาย ดังเช่น การวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลในน้ำเบียร์ (Xie *et al.*, 2009) การวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัสของชีส (Karoui *et al.*, 2006) การศึกษาคุณภาพทางเคมีของน้ำผึ้ง (Qiu *et al.*, 1999) และการศึกษาการวิเคราะห์คุณภาพของอ้อย (Roggo *et al.*, 2004) เป็นต้น

2. Moving window partial least squares regression (MWPLSR)

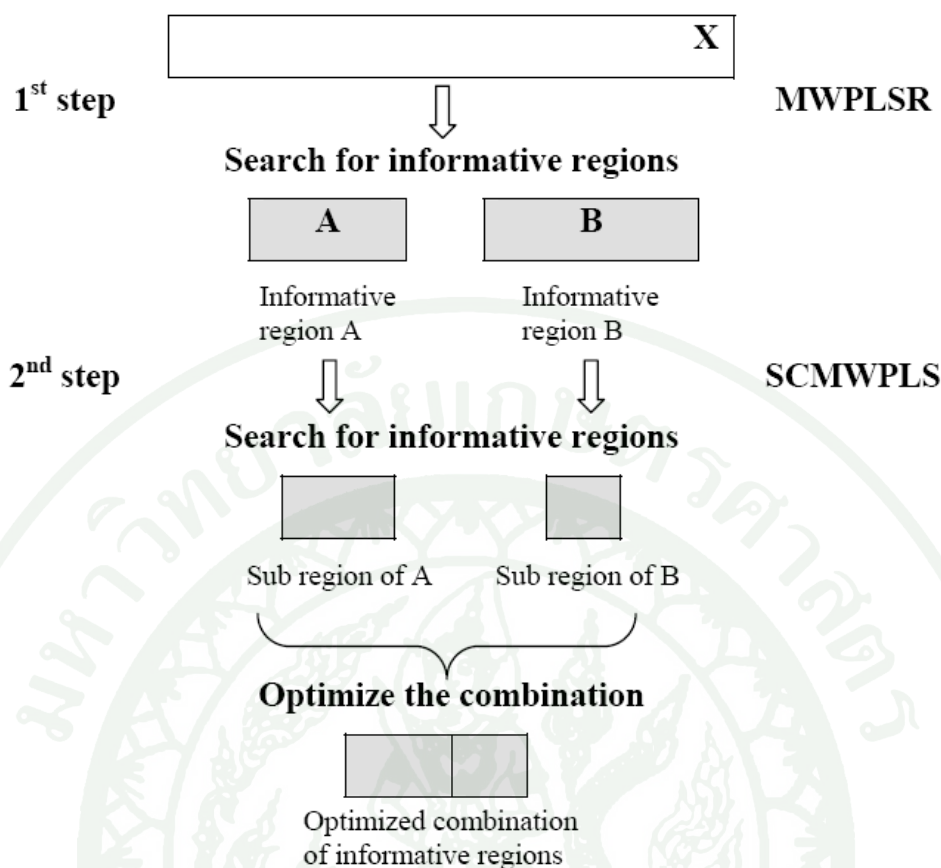
MWPLSR คือวิธีการเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยกำหนดให้มีหน้าต่างเป็นเมตริกซ์ X_i ขนาด m แถว n หลัก เคลื่อนที่ไปตามสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่น โดยนำตำแหน่งข้อมูลที

หน้าต่างเคลื่อนที่ไปถึงมาสร้างสมการด้วยวิธี PLSR ที่ค่าแฟกเตอร์ต่างๆ (ตัวแปรอิสระคือข้อมูลของสเปกตรัมขนาด m แถว n หลัก) และคำนวณค่า Sums of squared residues (SSR) ในแต่ละหน้าต่าง จนครบทุกหน้าต่างแล้วนำไปเขียนกราฟระหว่าง SSR กับความยาวคลื่น พิจารณาเลือกช่วงความยาวคลื่นที่มีค่า SSR ต่ำสุด เนื่องจากช่วงความยาวคลื่นนั้นมีความสัมพันธ์กับค่าตัวแปรตาม (ค่าเคมีหรือกายภาพที่ได้จากการวัดค่าตามวิธีมาตรฐาน) มาก เมื่อนำไปสร้างสมการจะได้สมการที่มีความสามารถในการทำนายดีที่สุด (Du *et al.*, 2004)

วลัยพร (2548) ศึกษาการวิเคราะห์ปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ และปริมาณกรดทั้งหมด ของชมพูพันธุ์ทับทิมจันทร์ ทุลเกล้า และเพชรสามพราน ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร โดยใช้วิธี Multiple linear regression (MLR), PLSR และ MWPLSR ในการสร้างสมการเปรียบเทียบกัน พบว่าการสร้างสมการทำนายที่รวมพันธุ์ของชมพูทั้ง 3 พันธุ์ ช่วยให้การทำนายมีความแม่นยำขึ้นกว่าการใช้สมการพันธุ์อื่น (แยกพันธุ์ชมพู) และวิธี MWPLSR ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากที่สุด

3. Searching combination moving window partial least squares regression (SCMWPLSR)

ในกรณีที่ช่วงความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับตัวแปรตามมีมากกว่าหนึ่งช่วงความยาวคลื่น การรวมช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวจะช่วยเพิ่มประสิทธิภาพของสมการทำนายได้ วิธี SCMWPLSR คือวิธีการรวมช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากวิธี MWPLSR โดยเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมจากข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด จากนั้นจึงทำการรวมช่วงความยาวคลื่น ขั้นตอนการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี SCMWPLSR แสดงดังภาพที่ 7 โดยวิธี SCMWPLSR จะกำหนดหน้าต่างข้อมูลเช่นเดียวกับวิธี MWPLSR แต่หน้าต่างข้อมูลนี้จะสามารถปรับขนาดหน้าต่างได้ เคลื่อนที่ไปตามสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่น โดยนำตำแหน่งข้อมูลที่หน้าต่างเคลื่อนที่ไปถึงมาสร้างสมการด้วยวิธี PLSR ที่ค่าแฟกเตอร์ต่างๆ และคำนวณค่า RMSEC ในแต่ละหน้าต่างจนครบ พิจารณาเลือกช่วงความยาวคลื่นที่มีค่า RMSEC ต่ำสุด เนื่องจากช่วงความยาวคลื่นนั้นมีความสัมพันธ์กับค่าตัวแปรตามมาก (Du *et al.*, 2004)



ภาพที่ 7 ขั้นตอนการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี SCMWPLSR

ที่มา: Ritthiruangdej *et al.* (2006)

Kasemsumran *et al.* (2003) ศึกษาการวิเคราะห์ความเข้มข้นของ Human serum albumin (HAS), แอลฟาไกลบูลิน และกลูโคสในสารละลายซีรัม (Serum solution) พบว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี SCMWPLSR มีประสิทธิภาพในการทำนายดี โดยมีค่า R สูงกว่า และ RMSEP ต่ำกว่า การสร้างสมการด้วยวิธี MWPLSR

Ritthiruangdej *et al.* (2005) ศึกษาการวิเคราะห์คุณภาพน้ำปลาไทย 100 ตัวอย่าง ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ค่าคุณภาพที่ทำการศึกษาได้แก่ ปริมาณไนโตรเจนทั้งหมด ค่า pH ความถ่วงจำเพาะ ค่า Refractive index และค่า Brix การสร้างสมการแบ่งออกเป็น 3 แบบ คือการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR และการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR พบว่าวิธี SCMWPLSR ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากกว่าวิธี PLSR และ MWPLSR โดยมีค่า RMSEP เท่ากับ 0.100%w/v ช่วงความยาวคลื่นที่มีความเกี่ยวข้องกับปริมาณ

ไนโตรเจนทั้งหมด ค่า pH ความถ่วงจำเพาะ ค่า Refractive index และค่า Brix ที่คัดเลือกจากวิธี SCMWPLSR คือช่วง 2264-2428 นาโนเมตร ช่วง 1698-1722 และ 2222-2258 นาโนเมตร ช่วง 1358-1438 นาโนเมตร ช่วง 1774-1846 นาโนเมตร และ 2078-2114 นาโนเมตร และช่วง 1322-1442 นาโนเมตร และ 2000-2076 นาโนเมตร ตามลำดับ

4. Back propagation artificial neural network (BP-ANN)

เทคนิคการสร้างสมการแบบเครือข่ายประสาทเทียม หรือ Artificial neural network (ANN) คือแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างเครือข่ายความสัมพันธ์จากตัวเลข เลียนแบบหลักการทำงานของสมองมนุษย์ เรียนรู้จากประสบการณ์ โดยแบบจำลองจะมีหน่วยประมวลผล ที่เรียกว่า นิวรอน (Neuron) เชื่อมโยงกันเป็นเครือข่าย แต่ละเส้นเชื่อมโยงจะมีค่าน้ำหนัก (Weight) กำกับไว้ สัญญาณจะถูกส่งผ่านระหว่างหน่วยประมวลผล จากนั้นหน่วยส่งออก (Output neuron) จะรวม น้ำหนักของสัญญาณที่ส่งเข้ามาทั้งหมดเป็น Net input แล้วนำไปผ่านฟังก์ชันส่งผ่าน (Transfer function) คำนวณได้ค่าผลลัพธ์ของ Network ออกมา

BP-ANN เป็นแบบจำลองเครือข่ายประสาทเทียมแบบหนึ่งที่มีนิยมใช้มาก เนื่องจากเป็น ตัวประเมินค่าเชิงทฤษฎี (Theoretic universal approximator) ที่สามารถประเมินความสัมพันธ์ที่ ระดับความถูกต้องใดๆ ก็ได้ และมีการเรียนรู้แบบ Supervised learning (มีข้อมูลให้เรียนรู้) หลักการ ของ BPNN คือการส่งข้อมูลแบบย้อนกลับ (Back propagation) โดยข้อมูลความแปรปรวน (Error) ที่ถูกส่งกลับมานำไปใช้ในการปรับค่าน้ำหนัก (Weight) ใหม่ และมีการวนไปเรื่อยๆ จนกระทั่ง ความแปรปรวนเข้าใกล้ศูนย์ หรือครบจำนวนรอบของการฝึกฝนที่กำหนดไว้ การเลือกค่า พารามิเตอร์ต่างๆ เช่น จำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน (Hidden nodes) อัตราการเรียนรู้ (Learning rate) และ ค่าน้ำหนักเริ่มต้น (Initializing weight) ไม่มีทฤษฎีที่จะสามารถบอกได้ว่าจะมี ค่าพารามิเตอร์ต่างๆ เท่าไร ดังนั้นจึงจำเป็นต้องมีการลองผิดลองถูกในการทดลองใช้แต่ละวิธี จนกว่าจะได้แบบจำลองที่ดีที่สุด (รวีพิมพ์, 2551)

4.1 โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียม ประกอบด้วยโครงสร้างหลัก 3 ชั้น ได้แก่

4.1.1 ชั้นข้อมูลนำเข้า (Input layer) เป็นชั้นรับข้อมูล โดยจำนวนหน่วยประสาทจะมี เท่ากับจำนวนข้อมูลนำเข้า (Input data) การคำนวณในชั้นนี้จะเป็นเพียงการแปลงค่าข้อมูลให้มีค่า ระหว่าง 0 ถึง 1

ในการใช้เทคนิค NIRS ร่วมกับ BP-ANN จะมีการใช้เทคนิคทางสถิติ เช่น วิธี Principal component analysis (PCA) หรือวิธี Wavelet transform ในการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมที่จะใช้เป็นตัวแปรนำเข้าก่อน เพื่อป้องกันความคลาดเคลื่อนที่อาจเกิดขึ้นจากการมีตัวแปรมากเกินไปของเครือข่ายประสาทเทียม (Janik *et al.*, 2007)

Lu *et al.* (2007) ศึกษาการวิเคราะห์องค์ประกอบยาริฟามพิซิน (Rifampicin) โดยวิเคราะห์ปริมาณ Rifampicin (RMP) Isoniazide (INH) และ Pyrazinamide (PZA) การสร้างสมการทำนายด้วย BP-ANN ใช้การฝึกฝนแบบ Adopt Levenberg-Marquardt ใช้เทคนิค PCA ในการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัม เป็นตัวแปรใหม่ แล้วใช้ค่า Principal component (PC) score เป็นข้อมูลนำเข้า (Input) โดยศึกษาจำนวนข้อมูลนำเข้า (5-10 PC) จำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน (2-9 นิวรอน) และจำนวนรอบในการฝึกฝน (0, 100, 200, 300 และ 400 รอบ) พบว่าโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมในการทำนายปริมาณ RMP, INH และ PZA มีจำนวนข้อมูลนำเข้าและจำนวนนิวรอนในชั้นซ่อนเท่ากับ 7 และ 3, 8 และ 3, 10 และ 3 ตามลำดับ และมีจำนวนรอบในการฝึกฝนของสมการทำนาย RMP, INH และ PZA เท่ากับ 40, 90 และ 30 รอบ ตามลำดับ

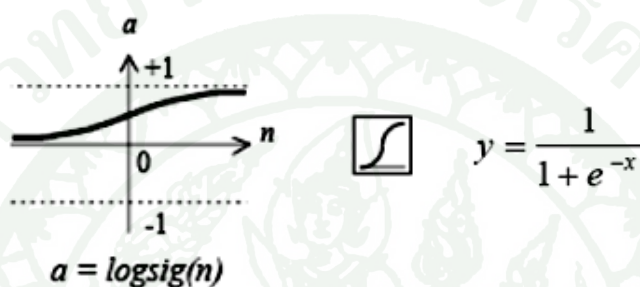
Yang and He (2008) ศึกษาการจำแนกพันธุ์ของเห็ด 195 ตัวอย่าง การสร้างสมการใช้เทคนิค BP-ANN ร่วมกับ PCA โดยใช้ PC score ของ 3PC แรกเป็นข้อมูลนำเข้า โดยสามารถอธิบายความแปรปรวนได้ 94.37% พบว่าสมการทำนายที่สร้างจากวิธี BP-ANN ด้วยโครงสร้างที่เหมาะสม มีความสามารถในการจำแนกพันธุ์เห็ดได้แม่นยำ โดยจำแนกพันธุ์ของเห็ดได้ถูกต้องถึง 91%

4.1.2 ชั้นซ่อน (Hidden layer) เป็นชั้นที่ใช้ในการคำนวณหรือประมวลผล โดยทั่วไปจำนวนชั้นและจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน ไม่มีข้อจำกัดแน่นอน จึงต้องทำการทดลองเปรียบเทียบกันระหว่างเครือข่ายประสาทเทียมที่มีจำนวนชั้นซ่อนต่างๆ กัน และจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อนนั้นๆ ว่ามีจำนวนเท่าไรจะทำให้การคำนวณได้ผลดีกว่ากัน

4.1.3 ชั้นข้อมูลนำออก (Output layer) จะมีชั้นเดียวและมีจำนวนหน่วยประสาทเท่ากับจำนวนตัวแปรออก (Output data) ที่ต้องการ

4.2 ฟังก์ชันส่งผ่าน (Transfer function) จะนำผลรวมของค่าน้ำหนักและค่าความคลาดเคลื่อนของตัวแปรเข้าสู่ฟังก์ชันส่งผ่าน โดยหน่วยประสาทแต่ละหน่วยจะมีฟังก์ชันส่งผ่านที่แตกต่างกันเพื่อคำนวณค่าตัวแปรออก ฟังก์ชันส่งผ่านที่ใช้ในแบบจำลอง BP-ANN มีอยู่ 3 ชนิด ได้แก่

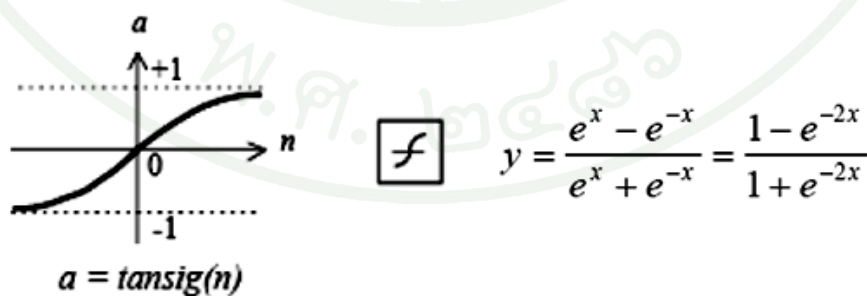
4.2.1 ล็อกซิกมอยด์ (Logistic sigmoid, Log sigmoid) เป็นฟังก์ชันส่งผ่านที่ให้ผลลัพธ์มีค่าอยู่ในช่วง 0 ถึง 1 ดังแสดงในภาพที่ 8



ภาพที่ 8 ฟังก์ชันส่งผ่านแบบล็อกซิกมอยด์

ที่มา: ดัดแปลงจาก Demuth and Beale (2002)

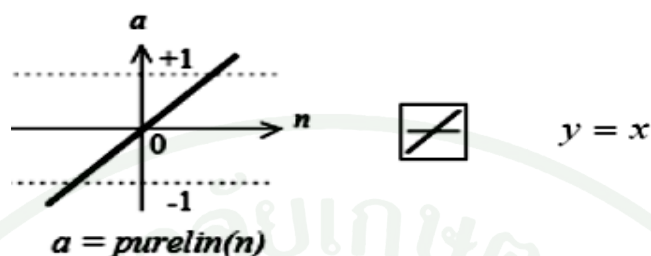
4.2.2 แทนเจนต์ซิกมอยด์ (Hyperbolic tangent sigmoid, Tangent sigmoid) เป็นฟังก์ชันส่งผ่านที่ให้ผลลัพธ์มีค่าอยู่ในช่วง -1 ถึง 1 ดังแสดงในภาพที่ 9



ภาพที่ 9 ฟังก์ชันส่งผ่านแบบแทนเจนต์ซิกมอยด์

ที่มา: ดัดแปลงจาก Demuth and Beale (2002)

4.2.3 ฟังก์ชันสมการเส้นตรง (Linear) เป็นฟังก์ชันส่งผ่านที่ให้ผลลัพธ์มีค่าเป็นอะไรก็ได้ (เป็นข้อมูลต่อเนื่อง) ดังแสดงในภาพที่ 10



ภาพที่ 10 ฟังก์ชันส่งผ่านแบบเส้นตรง

ที่มา: ดัดแปลงจาก Demuth and Beale (2002)

4.3 การประยุกต์ใช้ BP-ANN ในการตรวจคุณภาพ

Balabin et al. (2007) เปรียบเทียบประสิทธิภาพของสมการทำนายเชิงเส้นตรง (Linear model) และสมการทำนายไม่เชิงเส้น (Non linear model) ในการวิเคราะห์คุณสมบัติของแก๊สโซลีน ใช้วิธีการสร้างสมการ 6 วิธี ได้แก่ MLR, Principal component regression (PCR), PLSR, Polynomial partial least squares regression (Poly-PLSR), Spline partial least squares regression (Spline-PLSR) และ ANN พบว่าสมการทำนายไม่เชิงเส้นมีประสิทธิภาพมากกว่าสมการทำนายเชิงเส้นตรง และวิธี ANN ให้สมการทำนายคุณภาพของแก๊สโซลีนที่มีความแม่นยำมากที่สุด เนื่องจากข้อมูลสเปกตรัมมีความซับซ้อน ANN เป็นแบบจำลองแบบ Black box และเป็นวิธีการสร้างสมการแบบไม่เชิงเส้นจึงมีประสิทธิภาพมากกว่า

Liu et al. (2010) ศึกษาการวัดปริมาณของแข็งที่สามารถละลายได้ในส้ม 38 ตัวอย่าง ในช่วงความยาวคลื่น 350-1800 นาโนเมตร สร้างสมการด้วยวิธี PLSR และ BP-ANN โดยมีการใช้เทคนิค PCA ในการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมและศึกษาโครงสร้างที่เหมาะสม พบว่าวิธี BP-ANN ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากกว่าวิธี PLSR โดยมีค่า R, RMSEP และ Bias เท่ากับ 0.90, 0.68 °Brix และ 0.16 °Brix ตามลำดับ

อุปกรณ์และวิธีการ

อุปกรณ์

1. วัตถุดิบ

ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ทั้งหมดเป็นผลิตภัณฑ์ที่ซื้อจากซูเปอร์มาร์เก็ต บริเวณเขตมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ วิทยาเขตบางเขน และได้รับจากบริษัทผู้ผลิตน้ำจิ้มไก่ในประเทศไทย โดยตัวอย่างน้ำจิ้มไก่จะถูกแบ่งตัวอย่างออกเป็น 4 ชุด แยกตามวัตถุประสงค์ที่จะทำการศึกษาดังนี้

1.1 ตัวอย่างชุดที่ 1 ประกอบด้วยน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง สำหรับการศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสม (ใช้ในข้อที่ 1)

1.2 ตัวอย่างชุดที่ 2 ประกอบด้วยน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง สำหรับการศึกษาการสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ (ใช้ในข้อที่ 2)

1.3 ตัวอย่างชุดที่ 3 ประกอบด้วยน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง สำหรับการศึกษาการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ โดยใช้คุณภาพด้านเคมี (ใช้ในข้อที่ 3.1)

1.4 ตัวอย่างชุดที่ 4 ประกอบด้วยน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง สำหรับการศึกษาการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ โดยใช้คุณภาพด้านประสาทสัมผัส (ใช้ในข้อที่ 3.2)

ทำการเก็บรักษาตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ทั้งหมดในตู้เย็นอุณหภูมิ 4 องศาเซลเซียสเพื่อรอการตรวจวิเคราะห์ตัวอย่าง

2. อุปกรณ์ในการวิเคราะห์คุณภาพ

2.1 อุปกรณ์ที่ใช้วิเคราะห์คุณภาพทางเคมี

2.1.1 เครื่อง pH meter (EVTECH Instrument, Cyber Scan pH510)

2.1.2 ชุดวิเคราะห์องค์ประกอบเคมีโดยประมาณ (Proximate analysis) ได้แก่ ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ น้ำตาลทั้งหมด และกรดทั้งหมด ตามวิธีการของ AOAC (2006)

2.1.3 ชุดวิเคราะห์ปริมาณแคปไซซินด้วยวิธี High performance liquid chromatography (HPLC) ตามวิธีการของ AOAC (2006)

2.1.4 เครื่องชั่งวิเคราะห์อย่างละเอียด 4 ตำแหน่ง (Sartorius, DS 224S)

2.2 อุปกรณ์ที่ใช้วิเคราะห์คุณภาพทางกายภาพ

2.2.1 เครื่อง Refractometer (ATAGO, MASTER-M)

2.2.2 เครื่อง HunterLab (MiniScan, XE Plus)

2.2.3 เครื่องควบคุมอุณหภูมิ (Incubator) (Thomas, T22LAS, Japan)

2.2.4 เครื่อง Near infrared (NIR) spectroscopy (BRAN+LUEBBE, InfraAlyzer 500, Norderstedt, Germany)

2.2.5 หลอดทดลองแบบมีฝาปิด ขนาด 40 มิลลิลิตร

2.2.6 เครื่องปั่น (Philips, Twist HR1700)

2.2.7 อุปกรณ์ใส่ตัวอย่างชนิด British cup ขนาด Path length 0.5 มิลลิเมตร

3. อุปกรณ์ที่ใช้คำนวณและวิเคราะห์ผลทางสถิติ

3.1 โปรแกรมสำเร็จรูปที่ใช้ในการคำนวณผลทางสถิติ SPSS[®] version 12

3.2 โปรแกรมสำเร็จรูปที่ใช้ในการคำนวณผลทางสถิติ Unscrambler[®] version 8.0

3.3 โปรแกรมสำเร็จรูปที่ใช้ในการคำนวณผลทางสถิติ MATLAB[®] version 6.5

วิธีการ

งานวิจัยนี้ศึกษาการประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิค NIRS โดยแบ่งการศึกษาออกเป็น 3 ขั้นตอน ได้แก่ 1) การศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR 2) การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ และ 3) การสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ ซึ่งแต่ละขั้นตอนมีรายละเอียดดังต่อไปนี้

1. การศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสม

การศึกษาศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ ขั้นตอนการศึกษาแสดงดังภาพที่ 11 เริ่มจากการนำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ จำนวน 50 ตัวอย่าง มาผ่านวิธีการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี ได้แก่ การคน การปั่นเป็นเวลา 1 นาที และการกรอง จากนั้นนำน้ำจิ้มไก่ทั้ง 3 แบบ มาวิเคราะห์ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (Total soluble solids, TSS) และวัดค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR ตามวิธีการในข้อ 1.1 และ 1.2 ตามลำดับ นำข้อมูลค่า TSS และข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง มาสร้างสมการทำนายตามวิธีการในข้อ 1.3



ภาพที่ 11 ขั้นตอนการศึกษาวิธีเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR

1.1 การวัดค่า TSS

วัดค่าปริมาณ TSS ในตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ โดยใช้ Refractometer เริ่มจากการเขย่าขวดน้ำจิ้มไก่เพื่อให้ตัวอย่างผสมเข้ากันดี จากนั้นตักตัวอย่างเฉพาะส่วนที่เป็นของเหลวประมาณ 2 มิลลิลิตร (1-2 หยด) หยดลงบนแผ่นปริซึม (Prism) ของ Refractometer เคลี่ยตัวอย่างให้ทั่วไม่ให้มีช่องว่างหรือฟองอากาศ จากนั้นปิดแผ่นพลาสติก (Daylight plate) แล้วยกขึ้นส่องกับแสง อ่านค่า TSS ที่วัดได้ในหน่วยของศาบริกซ์ ($^{\circ}\text{Brix}$) ทำการทดสอบตัวอย่างละ 2 ซ้ำ และหาค่าเฉลี่ยปริมาณ TSS ของแต่ละตัวอย่าง กำหนดเป็นตัวแทนในการสร้างสมการทำนาย ในข้อ 1.3

1.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่มาวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยเทตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ประมาณ 20 มิลลิลิตร ลงในหลอดทดลองที่มีฝาปิดขนาด 40 มิลลิลิตร ควบคุมให้มีอุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส ใน Incubator เป็นเวลา 15 นาที จากนั้นบรรจุตัวอย่างลงอุปกรณ์สำหรับใส่ตัวอย่างชนิด British cup ที่มีความหนาของตัวอย่าง (Path length) 0.5 มิลลิเมตร ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ทำการวัดด้วยหลักการส่องผ่านสะท้อน (Transflectance) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร โดยบันทึกค่าทุก 2 นาโนเมตร จะได้ค่าการดูดกลืนแสง ($\log 1/R$) จำนวน 701 ค่า ทำการทดสอบตัวอย่างละ 2 ซ้ำ แล้วหาค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสงของแต่ละตัวอย่าง กำหนดเป็นตัวแทนอิสระ (701 ค่า) ในการสร้างสมการทำนายในข้อ 1.3

1.3 การสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS

นำข้อมูลค่าเฉลี่ยปริมาณ TSS จากข้อ 1.1 (กำหนดเป็นตัวแทน) มาหาความสัมพันธ์กับข้อมูลค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสงจำนวน 701 ค่า จากข้อ 1.2 (กำหนดเป็นตัวแทนอิสระ) โดยวิธี Partial least squares regression (PLSR) ด้วยโปรแกรม Unscrambler[®] และทำการตรวจสอบความแม่นยำของสมการด้วยวิธี Cross validation พิจารณาความสามารถของสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Correlation coefficient, R) และค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนกำลังสองจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Root mean square error prediction in cross-validation, RMSECV) เพื่อคัดเลือกวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR โดยวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสม ควรให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} มากเข้าใกล้ 1 และค่า RMSECV ต่ำ

2. การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่

การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่จำนวน 180 ตัวอย่าง มาผ่านวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสมที่ได้จากข้อที่ 1 ทำการวิเคราะห์คุณภาพทางเคมีและกายภาพ และวัดค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR ตามวิธีการในข้อ 2.1 และ 2.2 ตามลำดับ จากนั้นนำข้อมูลค่าคุณภาพเคมีและกายภาพ (ตัวแปรตาม) และข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ) มาสร้างสมการทำนายตามวิธีการในข้อ 2.3 โดยมีรายละเอียดดังนี้

2.1 การศึกษาคุณสมบัติทางเคมีและทางกายภาพของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่

นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่มาไว้ที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 30 นาทีหรือจนกระทั่งมีอุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส ทำการเขย่าขวดให้ตัวอย่างผสมเข้ากันดีทั่วทั้งขวดก่อนทำการวัดค่าคุณภาพทางเคมีและทางกายภาพ ได้แก่ ปริมาณ TSS ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ปริมาณกรดทั้งหมด (ในรูปกรดอะซิติก) ค่าความเป็นกรดต่าง (pH) ค่าสี L^* a^* b^* C^* และ h โดยทำการวัดค่าตัวอย่างละ 2 ซ้ำ และหาค่าเฉลี่ยของค่าเคมีและกายภาพในแต่ละตัวอย่าง กำหนดเป็นตัวแปรตามในการสร้างสมการทำนาย ข้อ 2.3

2.1.1 คุณภาพทางเคมี ได้แก่

ก. ค่าความเป็นกรดต่าง (pH) โดย pH meter (EVTECH Instrument, Cyber Scan pH510) วัดค่า pH ที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส วิธีการวิเคราะห์ดังแสดงในภาคผนวก ก1

ข. ค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ และน้ำตาลทั้งหมด โดยวิธี Lane and Eynon ตามวิธีการของ AOAC (2006) วิธีการวิเคราะห์ดังแสดงในภาคผนวก ก2

ค. ค่าปริมาณกรดทั้งหมด (Total acidity) ตามวิธีการของ AOAC (2006) คำนวณในรูปของกรดอะซิติก วิธีการวิเคราะห์ดังแสดงในภาคผนวก ก3

2.1.2 คุณภาพทางกายภาพ ได้แก่

ก. ค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (TSS) โดย Refractometer (ATAGO, MASTER-M) วิธีการวิเคราะห์ดังแสดงในภาคผนวก ข1

ข. ค่าสีระบบ CIE (L^* a^* b^* C^* และ h) โดย HunterLab (MiniScan, XE Plus) มุมมอง (Observer angle) 10 องศา แสงมาตรฐาน (Illuminant) ชนิด D65 วิธีการวิเคราะห์ดังแสดงในภาคผนวก ข2

2.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่มาวัดค่าการดูดกลืนแสง วิธีการเช่นเดียวกับข้อ 1.2 บันทึกค่าการดูดกลืนแสงที่ได้ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร โดยบันทึกค่าทุก 2 นาโนเมตร จะได้ค่าการดูดกลืนแสง ($\log 1/R$) จำนวน 701 ค่า ทำการทดสอบตัวอย่างละ 2 ซ้ำ แล้วหาค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสง กำหนดเป็นค่าเปอร์เซ็นต์ (701 ค่า) ในการสร้างสมการทำนายในข้อ 2.3

2.3 การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพ

การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณ TSS น้ำตาลรีดิวซ์ น้ำตาลทั้งหมด กรดทั้งหมด ค่า pH และค่าสี L^* a^* b^* C^* และ h จะทำการแบ่งตัวอย่างออกเป็น 2 กลุ่ม ได้แก่ กลุ่มสร้างสมการ (Calibration) จำนวน 126 ตัวอย่างและกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Validation) จำนวน 54 ตัวอย่าง วิธีการแบ่งกลุ่มตัวอย่างทำโดยเรียงค่าเคมีจากน้อยไปมาก แล้วจึงทำการสุ่มเลือกตัวอย่าง โดยชุด Calibration จะต้องมีตัวอย่างที่มีค่าเคมีต่ำที่สุดและสูงที่สุดอยู่ด้วยเพื่อให้ครอบคลุมค่าที่นำมาทำนาย การสร้างสมการทำนายประกอบด้วยขั้นตอนหลัก 2 ขั้นตอน ได้แก่ 1) การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมโดยใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด (Full spectra) ด้วยวิธี PLSR และ 2) การพัฒนาสมการทำนายให้ดีที่สุดโดยการคัดเลือกความยาวคลื่น (Wavelength selection) ด้วยวิธี Moving window partial least squares regression (MWPLSR) และ Searching combination moving window partial least squares regression (SCMWPLSR) เปรียบเทียบกับการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR

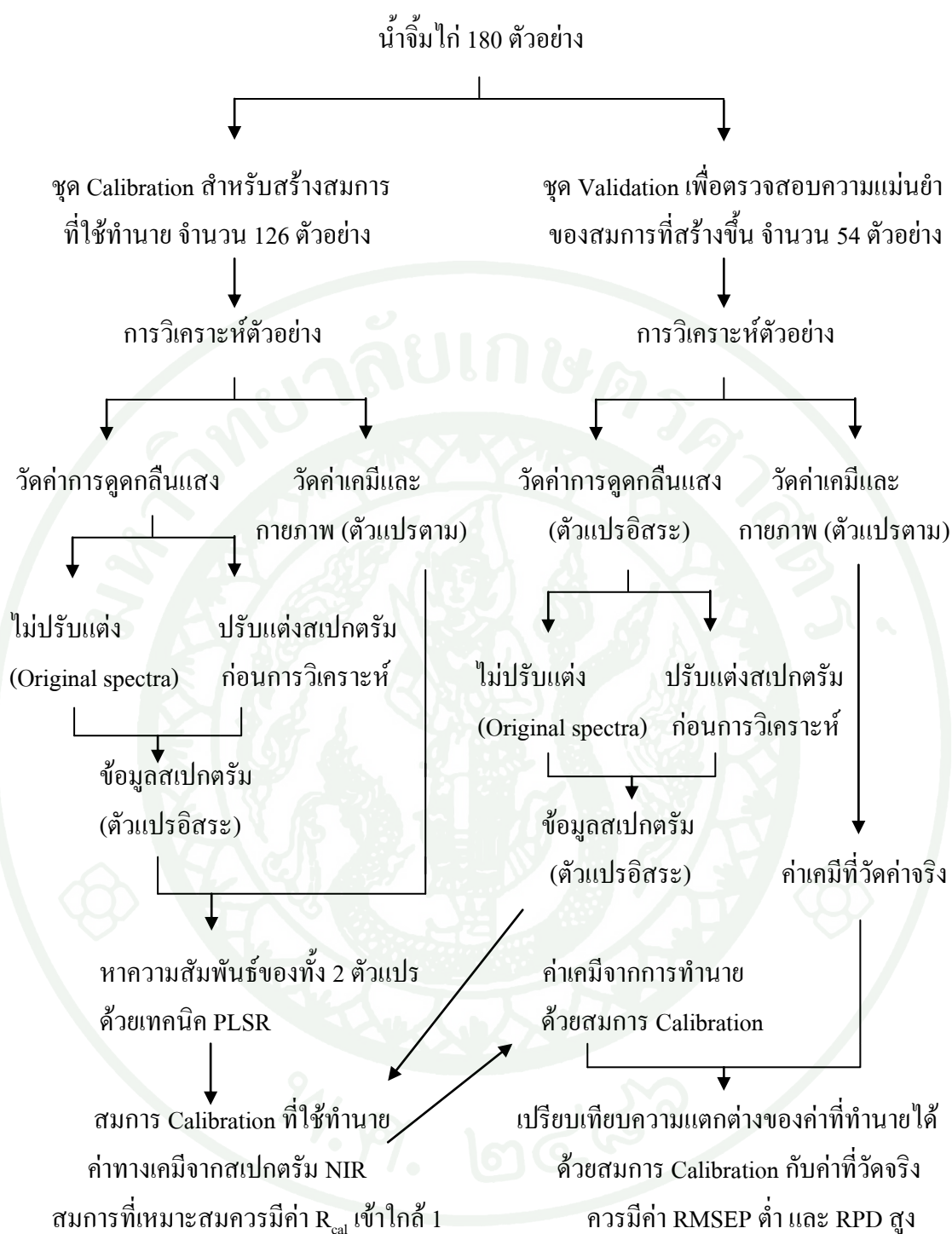
2.3.1 การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมโดยการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี

PLSR

นำข้อมูลค่าเฉลี่ยของค่าเคมีและกายภาพจากข้อ 2.1 (ตัวแปรตาม) และค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสงจากข้อ 2.2 (ตัวแปรอิสระ) มาหาความสัมพันธ์โดยใช้วิธีทางสถิติ PLSR ด้วยโปรแกรม Unscrambler® ขั้นตอนการสร้างสมการทำนายแสดงดังภาพที่ 12 โดยค่าเคมีและกายภาพแต่ละค่า (ตัวแปรตาม) จะมีสมการทำนายทั้งหมด 9 สมการ เป็นสมการที่สร้างขึ้นโดยใช้สเปกตรัมที่ไม่ปรับแต่ง (สเปกตรัมเริ่มต้น) 1 สมการ และสมการที่สร้างขึ้นโดยใช้สเปกตรัมที่มีการปรับแต่ง 8 สมการ โดยวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ 8 วิธี ได้แก่

- ก. วิธี Savitzky-Golay smoothing (10 data point gap, second order)
- ข. วิธี Multiplicative scatter correction (MSC)
- ค. วิธี MSC และ First derivative
- ง. วิธี MSC และ Second derivative
- จ. วิธี First derivative
- ฉ. วิธี First derivative และ MSC
- ช. วิธี Second derivative
- ซ. วิธี Second derivative และ MSC

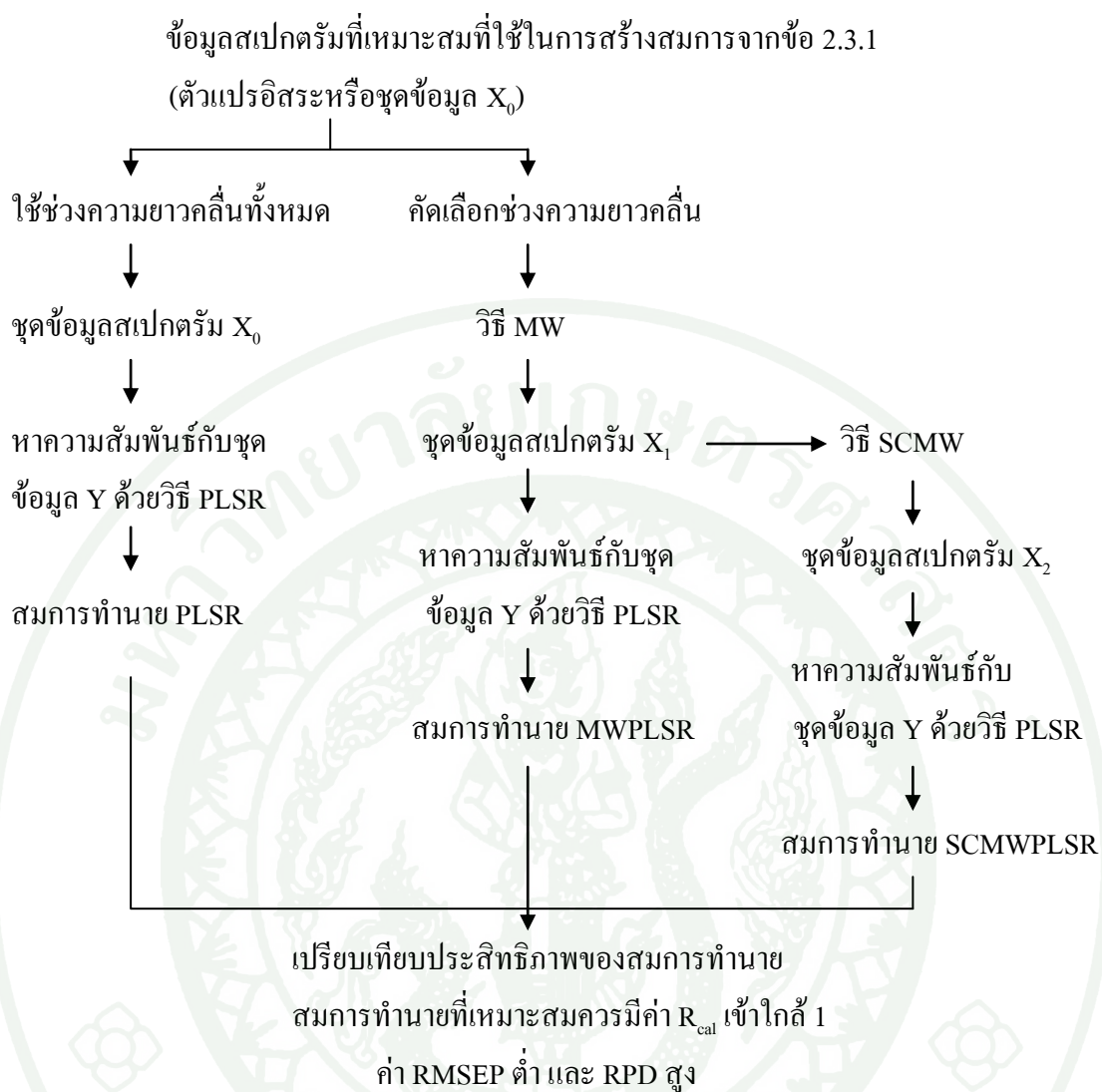
ทำการเปรียบเทียบความสามารถในการทำนายของสมการที่สร้างขึ้นทั้ง 9 สมการโดยพิจารณาจาก ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (R) ค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนกำลังสองจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Root mean square error prediction in prediction, RMSEP) และค่า Ratio of standard error of prediction to standard deviation (RPD) สมการทำนายที่มีความแม่นยำ ควรมีค่า R_{cal} เข้าใกล้ 1 ค่า RMSEP ต่ำ และค่า RPD เข้าใกล้ 3 หรือมากกว่า (Williams, 2007) เพื่อคัดเลือกสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพที่เหมาะสมเพื่อจะใช้ในการพัฒนาสมการทำนายให้ดีที่สุดที่สุดในข้อที่ 2.3.2



ภาพที่ 12 ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพโดยการหาความสัมพันธ์ทางสถิติระหว่างการวัดค่าด้วย NIRS กับการวิเคราะห์ค่าเคมีและกายภาพ และการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่ได้

2.3.2 การพัฒนาสมการทำนายให้ดีที่สุดโดยการคัดเลือกความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เปรียบเทียบกับการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR

จากข้อ 2.3.1 จะได้ข้อมูลสเปกตรัมที่เหมาะสมที่ใช้ในการสร้างสมการทำนาย นำข้อมูลสเปกตรัมมาคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น โดยวิธี Moving window (MW) และ Searching combination moving window (SCMW) ด้วยโปรแกรม MATLAB[®] (Jiang *et al.*, 2002) ใช้ขนาดหน้าต่างเท่ากับ 30 จุด ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการคัดเลือกด้วยวิธี MW และ SCMW กำหนดเป็นชุดข้อมูล X_1 และ X_2 ตามลำดับ จากนั้นนำข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการคัดเลือก (ตัวแปรอิสระ) มาหาความสัมพันธ์กับค่าคุณภาพเคมีและกายภาพจากข้อ 2.1 (ตัวแปรตามหรือชุดข้อมูล Y) โดยวิธี PLSR ด้วยโปรแกรม Unscrambler[®] สมการทำนายที่ได้จากชุดข้อมูล X_1 และ X_2 จะเรียกว่าสมการ MWPLSR และ SCMWPLSR ตามลำดับ ขั้นตอนการพัฒนาสมการทำนายให้ดีที่สุดแสดงดังภาพที่ 13 ทำการเปรียบเทียบความสามารถในการทำนายของสมการที่สร้างด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR กับสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR จากข้อ 2.3.1 ประสิทธิภาพของสมการพิจารณาจาก ค่า R_{cal} , RMSEP และ RPD สมการทำนายที่มีความแม่นยำ ควรมีค่า R_{cal} เข้าใกล้ 1 ค่า RMSEP ต่ำ และ RPD เข้าใกล้ 3 หรือมากกว่า



ภาพที่ 13 ขั้นตอนการสร้างสมการทำนายที่ดีที่สุดในการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่
โดยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เปรียบเทียบกับวิธี PLSR

หมายเหตุ ข้อมูล Y คือค่าเฉลี่ยเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ เช่นเดียวกับข้อมูลในข้อ 2.1

3. การสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่

ความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ สามารถทำการตรวจสอบได้ 2 ด้าน คือ ด้านเคมี (ปริมาณแคปไซซินและค่า Scoville heat units (SHU)) และด้านประสาทสัมผัส ดังนั้นการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ จึงแบ่งการศึกษาออกเป็น 2 ส่วน ได้แก่ 1) การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU และ 2) การสร้างสมการทำนายค่าความเผ็ดทางประสาทสัมผัส

3.1 การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่

นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ จำนวน 100 ตัวอย่าง มาผ่านวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสมที่ได้จากข้อที่ 1 ทำการวิเคราะห์ปริมาณแคปไซซินและคำนวณค่า SHU และวัดค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR ตามวิธีการในข้อ 3.1.1 และ 3.1.2 ตามลำดับ จากนั้นนำข้อมูลค่าปริมาณแคปไซซินและ SHU (ตัวแปรตาม) และข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ) มาสร้างสมการทำนายตามวิธีการในข้อ 3.1.3

3.1.1 การวัดค่าคุณภาพทางเคมี

วัดค่าปริมาณแคปไซซิน โดย HPLC และคำนวณค่า SHU ตามวิธีการของ AOAC (2006) โดยกำหนดเป็นตัวแปรตามในการสร้างสมการทำนายในข้อ 3.1.3 วิธีการวิเคราะห์ปริมาณแคปไซซินและการคำนวณค่า SHU แสดงในภาคผนวก ก4

3.1.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่อ้วัดค่าการดูดกลืนแสง วิธีการเช่นเดียวกับข้อ 1.2 บันทึกค่าการดูดกลืนแสงที่ได้ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร โดยบันทึกค่าทุก 2 นาโนเมตร จะได้ค่าการดูดกลืนแสง ($\log 1/R$) จำนวน 701 ค่า ทำการทดสอบตัวอย่างละ 2 ซ้ำ แล้วหาค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสง กำหนดเป็นตัวแปรอิสระ (701 ค่า) ในการสร้างสมการทำนายในข้อ 3.1.3

3.1.3 การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU

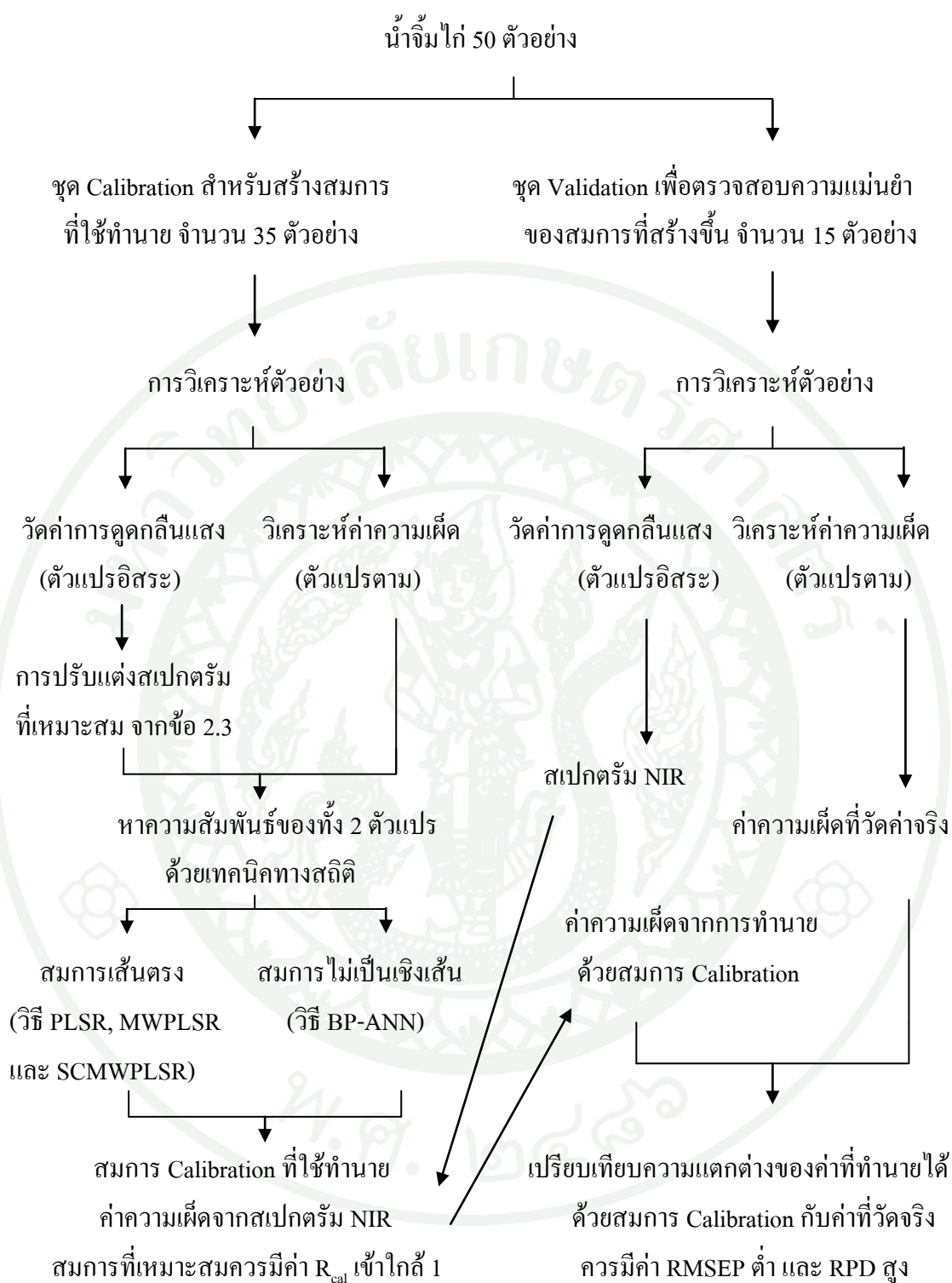
การสร้างสมการทำนายค่าปริมาณแคปไซซินและค่า SHU จะทำการแบ่งตัวอย่างออกเป็น 2 กลุ่มได้แก่ กลุ่ม Calibration จำนวน 70 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 30 ตัวอย่าง จากนั้นนำข้อมูลค่าเคมี (ตัวแปรตาม) มาหาความสัมพันธ์กับค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรต้น) ด้วยวิธี PLSR, MWPLSR และ SCMWPLSR โดยการสร้างสมการทำนายทำเช่นเดียวกับวิธีการในข้อ 2.3 ที่กล่าวมาข้างต้น

3.2 การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่

นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่จำนวน 50 ตัวอย่างโดยเป็นตัวอย่างที่มีค่าความเผ็ดครอบคลุมความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ที่มีอยู่ในท้องตลาด มาผ่านวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสมที่ได้จากข้อที่ 1 ทำการวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ด และวัดค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR ตามวิธีการในข้อ 3.2.1 และ 3.2.2 ตามลำดับ จากนั้นนำข้อมูลค่าความเผ็ด (ตัวแปรตาม) และข้อมูลค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ) มาสร้างสมการทำนายตามวิธีการในข้อ 3.2.3 ขั้นตอนการศึกษาแสดงดังภาพที่ 14

3.2.1 การวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่

ผู้ทดสอบฝึกฝนจำนวน 10 คน จากภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ คณะอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ฝึกฝนผู้ทดสอบ และประเมินคุณภาพทางประสาทสัมผัสวิธี Descriptive analysis (รายละเอียดวิธีการวิเคราะห์แสดงในภาคผนวก ก) โดยประเมินค่าความเผ็ดใน 4 คุณลักษณะ ได้แก่ ความเผ็ดโดยรวม ความเผ็ดลิ้น ความเผ็ดเพดานช่องปาก และความเผ็ดคอ การเตรียมตัวอย่างเริ่มจากการเขย่าขวดให้ตัวอย่างผสมเข้ากันดีทั่วทั้งขวด แล้วจึงเทตัวอย่างประมาณ 20 มิลลิลิตร ลงใส่ถ้วยพลาสติก พร้อมทั้งใส่รหัสตัวอย่างด้วยเลขสุ่ม 3 หลัก เสนอตัวอย่างที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส ประเมินคุณลักษณะด้านความเผ็ดโดยระบุระดับความเข้มข้นของตัวอย่าง 0-15 (น้อยไปมาก) ทำการทดสอบ 2 ชั่วโมงในแต่ละตัวอย่าง และใช้ค่าเฉลี่ยในแต่ละคุณลักษณะเป็นตัวแปรตามในการสร้างสมการทำนายในข้อ 3.2.3



ภาพที่ 14 ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ในการทำนายค่าความเค็ม โดยการหาความสัมพันธ์ทางสถิติระหว่างการวัดค่าด้วย NIRS กับการวิเคราะห์ค่าความเค็ม และการตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่ได้

3.2.2 การวัดค่าการดูดกลืนแสงของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR

นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่มาวัดค่าการดูดกลืนแสง วิธีการเช่นเดียวกับข้อ 1.2 บันทึกค่าการดูดกลืนแสงที่ได้ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร โดยบันทึกค่าทุก 2 นาโนเมตร จะได้ค่าการดูดกลืนแสง ($\log 1/R$) จำนวน 701 ค่า ทำการทดสอบตัวอย่างละ 2 ซ้ำ แล้วหาค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสง กำหนดเป็นตัวแปรอิสระ (701 ค่า) ในการสร้างสมการทำนายในข้อ 3.2.3

3.2.3 การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ด

การสร้างสมการทำนายค่าความเผ็ด 4 คุณลักษณะ ได้แก่ ความเผ็ดโดยรวม ความเผ็ดลิ้น ความเผ็ดเพดานและช่องปาก และความเผ็ดคอ จะทำการแบ่งตัวอย่างออกเป็น 2 กลุ่ม ได้แก่ กลุ่ม Calibration จำนวน 35 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 15 ตัวอย่าง โดยนำข้อมูลเฉลี่ยของค่าความเผ็ด (ตัวแปรตาม) และข้อมูลเฉลี่ยจากการวัดค่าการดูดกลืนแสง (ตัวแปรอิสระ) มาหาความสัมพันธ์โดยใช้วิธีการสร้างสมการ 2 แบบ ได้แก่ การสร้างสมการแบบเชิงเส้นตรง (วิธี PLSR, MWPLSR และ SCMWPLSR) และการสร้างสมการแบบไม่เป็นเชิงเส้น (วิธี Back propagation artificial neural network, BP-ANN)

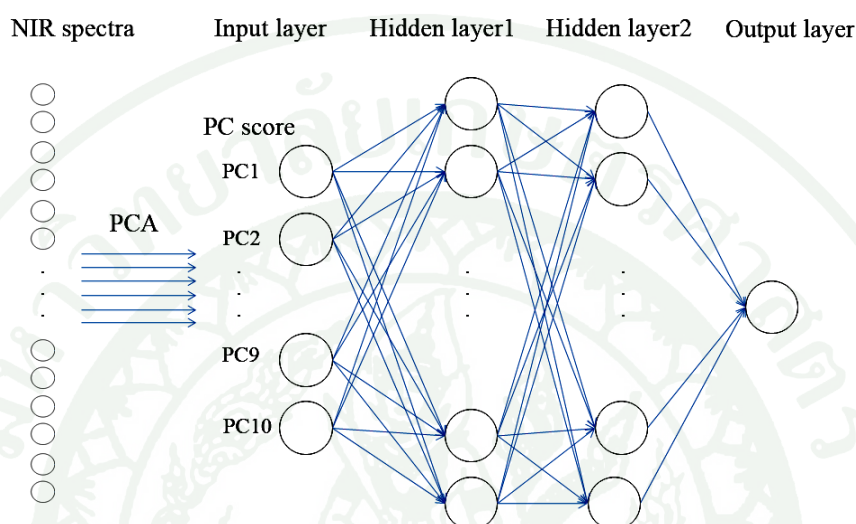
ก. การสร้างสมการทำนายแบบเชิงเส้นตรง (Linear model)

การสร้างสมการทำนายแบบเชิงเส้นตรงเพื่อทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัส เริ่มจากการนำข้อมูลค่าความเผ็ดจากข้อ 3.2.1 (ตัวแปรตาม) มาหาความสัมพันธ์กับค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสงจากข้อ 3.2.2 (ตัวแปรต้น) ด้วยวิธี PLSR, MWPLSR และ SCMWPLSR โดยการสร้างสมการทำนายทำเช่นเดียวกับวิธีการในข้อ 2.3 ที่กล่าวมาข้างต้น เลือกวิธีการสร้างสมการที่เหมาะสมที่สุด เพื่อนำไปเปรียบเทียบกับวิธีการสร้างสมการทำนายแบบไม่เชิงเส้น

ข. การสร้างสมการทำนายแบบไม่เชิงเส้น (Non-linear model)

การสร้างสมการทำนายแบบไม่เชิงเส้น ใช้วิธี BP-ANN เป็นการสร้างสมการทำนายโดยใช้เครือข่ายประสาทเทียมแบบการส่งข้อมูลความคลาดเคลื่อนย้อนกลับ เริ่มจากการใช้เทคนิค Principal component analysis (PCA) ด้วยโปรแกรม Unscrambler® ในการจัดกลุ่มตัวแปรสเปกตรัม 701 ข้อมูล จากข้อ 3.2.2 ที่มีความสัมพันธ์กันไว้ในกลุ่มของตัวแปร

องค์ประกอบเดียวกัน (Principal component, PC) เพื่อลดความคลาดเคลื่อนจากการมีตัวแปรในโครงสร้างมากเกินไป จากนั้นใช้ข้อมูล PC score เป็นข้อมูลนำเข้า (Input) สร้างแบบจำลองเครือข่ายประสาทเทียมแบบทำนายทีละ 1 ข้อมูลนำออก (Output) ดังแสดงในภาพที่ 15 ด้วยโปรแกรม MATLAB®



ภาพที่ 15 โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมแบบทำนายทีละ 1 ข้อมูลนำออก

การสร้างสมการทำนายด้วยวิธี BP-ANN จะใช้ข้อมูลนำเข้าคือ ค่า PC score ของข้อมูลสเปกตรัมที่ถูกจัดเป็นตัวแปรใหม่ในแต่ละ PC ส่วนข้อมูลนำออก ได้แก่ ค่าความเคี้ยวรวม ค่าความเคี้ยวเส้น ค่าความเคี้ยวเพดานช่องปาก และค่าความเคี้ยวคอ โดยมีข้อกำหนดต่างๆ ได้แก่ 1) ฟังก์ชันส่งผ่านก่อนชั้นซ่อนและระหว่างชั้นซ่อนเป็น Log-sigmoid transfer function และฟังก์ชันส่งผ่านหลังชั้นซ่อนเป็น Linear transfer function 2) ใช้วิธีการฝึกฝนแบบ Batch Gradient Descent (Traingd) 3) การหยุดการฝึกฝน ใช้เกณฑ์คือ เมื่อถึงจำนวนรอบสูงสุดที่กำหนดไว้ในการฝึกฝน หรือเมื่อค่า Performance ลดลงถึงเป้าหมายที่กำหนดไว้ คือ 0 หรือเมื่อไม่สามารถปรับปรุงค่า Performance ให้ดีขึ้นได้ กำหนดไว้ คือ 5 รอบ (รพีพร, 2551) ทำการศึกษาการสร้างสมการทำนายด้วยวิธี BP-ANN ใน 2 เรื่อง ดังต่อไปนี้

- 1) ศึกษาจำนวนข้อมูลนำเข้า ได้แก่ ค่า PC score ของ 4PC, 6PC, 8PC และ 10PC
- 2) ศึกษาโครงสร้างที่เหมาะสม โดยศึกษาจำนวนชั้นซ่อน (Hidden layer) ได้แก่ จำนวน 1 และ 2 ชั้น และจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน (Hidden neuron) 5 ระดับ คือ 5,

10, 15, 20 และ 25 นิวรอน จะมีจำนวนสิ่งทดลองหรือโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่
ทำการศึกษาทั้งหมด 10 สิ่งทดลอง แสดงรายละเอียดดังตารางที่ 3

ตารางที่ 3 สิ่งทดลองหรือโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียม สำหรับการศึกษาโครงสร้างที่
เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียม ในการสร้างสมการทำนายความเค้นของ
น้ำจิ้มไก่

สิ่งทดลอง	จำนวนชั้นซ่อน (ชั้น)	จำนวนหน่วยประสาท (นิวรอน)
1	1	5
2	1	10
3	1	15
4	1	20
5	1	25
6	2	5
7	2	10
8	2	15
9	2	20
10	2	25

การสร้างสมการทำนายแบบไม่เป็นเชิงเส้นเพื่อทำนายความเค้นทางประสาท
สัมผัส เริ่มจากการนำข้อมูลค่าเฉลี่ยความเค้นจากข้อ 3.2.1 (ตัวแปรตาม) และค่าเฉลี่ยการดูดกลืน
แสงจากข้อ 3.2.2 (ตัวแปรอิสระ) มาสร้างสมการโดยวิธี BP-ANN ด้วยโปรแกรม Matlab[®] จากนั้น
ทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของสมการทำนายที่สร้างขึ้นทั้ง 2 แบบ ได้แก่สมการทำนายแบบ
เชิงเส้นตรงด้วยวิธีที่เหมาะสมที่สุด (จากข้อ 3.2.3ก) กับสมการทำนายแบบไม่เป็นเชิงเส้นโดยวิธี
BP-ANN ที่ใช้จำนวนข้อมูลนำเข้าและโครงสร้างที่เหมาะสมที่สุด (จากข้อ 3.2.3ข) เพื่อให้ได้
สมการที่ดีที่สุดในการทำนายความเค้นของน้ำจิ้มไก่ ความสามารถในการทำนายของสมการจะ
พิจารณาจาก ค่า R_{cal} , RMSEP และ RPD โดยสมการทำนายที่มีความแม่นยำ ควรมีค่า R_{cal} เข้าใกล้ 1
ค่า RMSEP ต่ำ และ RPD เข้าใกล้ 3 หรือมากกว่า

สถานที่ทำการทดลอง

1. ห้องปฏิบัติการทางเคมี ทางกายภาพ และทางประสาทสัมผัส ภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ คณะอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ บางเขน กรุงเทพฯ
2. หน่วยปฏิบัติการเทคโนโลยีการตรวจสอบสินค้าโดยวิธีไม่ทำลาย สถาบันคั้นคว่ำและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตรมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ บางเขน กรุงเทพฯ



ผลและวิจารณ์

1. การเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR

การเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสมสำหรับการวิเคราะห์คุณภาพด้วยเทคนิค NIR พิจารณาจากความสามารถของสมการทำนาย ในการทำนายปริมาณของแข็งที่ละลายได้ทั้งหมด (Total soluble solids, TSS) เริ่มจากการนำผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง มาผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี ได้แก่ การคนตัวอย่าง การปั่น และการกรองตัวอย่าง รูปตัวอย่างน้ำจิ้มไก่และค่าปริมาณ TSS ที่วิเคราะห์ได้ แสดงดังภาพที่ 12 และตารางที่ 4 ตามลำดับ



ภาพที่ 12 น้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างทั้ง 3 วิธี ก) การคน ข) การปั่น และ ค) การกรอง

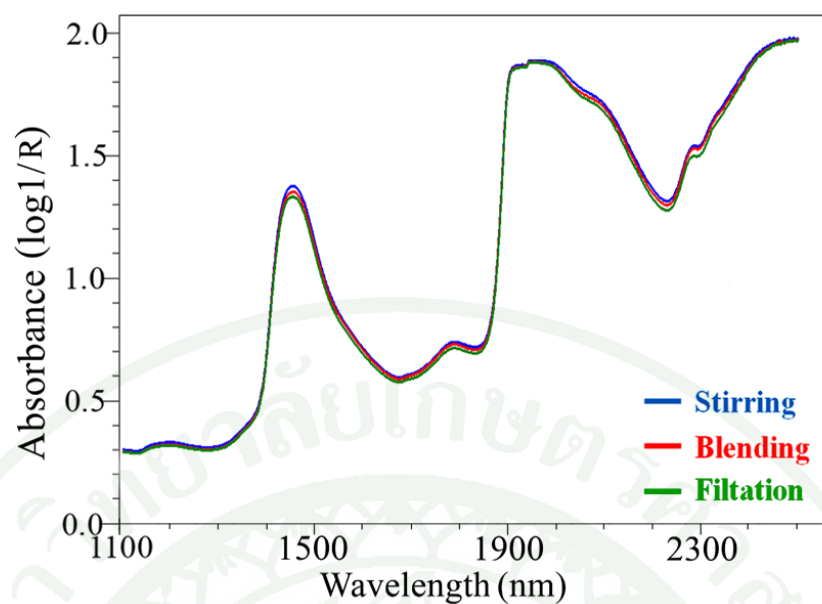
ตารางที่ 4 ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี ก) การคน ข) การปั่น และ ค) การกรอง

วิธีเตรียมตัวอย่าง	TSS (°Brix)		
	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล
การคน	50.42	5.64	44.10 - 59.80
การปั่น	51.00	6.03	44.80 – 61.00
การกรอง	49.36	5.23	44.10 – 59.80

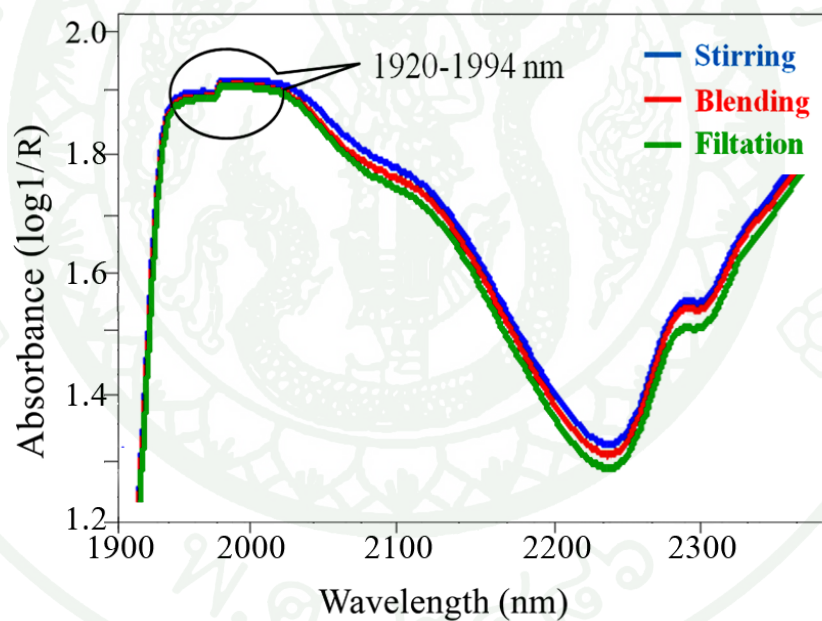
จากตารางที่ 4 เมื่อพิจารณาเปรียบเทียบค่าปริมาณ TSS ของตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่มีการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี พบว่าค่าปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ทั้ง 3 แบบมีค่าใกล้เคียงกัน โดยน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านวิธีการคน การปั่น และการกรอง มีช่วงข้อมูลของปริมาณ TSS เท่ากับ 44.10-59.80, 44.80-61.00 และ 44.10-59.80°Brix ตามลำดับ

การวัดค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR โดยการบรรจุตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างลงใน British cup ที่มีขนาด Path length 0.5 มิลลิเมตร ก่อนนำไปวัดค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร ข้อมูลจากการวัดค่าการดูดกลืนแสงจะเรียกว่าข้อมูลสเปกตรัม โดยลักษณะสเปกตรัมและค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ทั้ง 3 แบบ แสดงดังภาพที่ 17 จากผลการทดลองพบว่า เส้นสเปกตรัมเฉลี่ยของน้ำจิ้มไก่ทั้ง 3 แบบ มีลักษณะใกล้เคียงกัน โดยการเตรียมตัวอย่างด้วยวิธีการคน มีการดูดกลืนแสงหรือค่า $\log(1/R)$ มากที่สุด รองลงมาคือวิธีการปั่น และวิธีการกรอง ตามลำดับ ซึ่งสอดคล้องกับการทดลองของ Norris and Williams (1984) ได้ทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงในตัวอย่างข้าวสาลีด้วยเครื่อง NIR พบว่า อนุภาคที่มีขนาดใหญ่จะทำให้เกิดการกระเจิงแสงน้อยกว่าอนุภาคขนาดเล็ก แสงจึงส่องผ่านลงไปในตัวอย่างไม่มาก ทำให้การดูดกลืนแสงเพิ่มมากขึ้น เช่นเดียวกับผลการทดลองในภาพที่ 17 คือ น้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่างด้วยวิธีการคน จะมีอนุภาคของพริกและกระเทียมขนาดใหญ่กว่า จึงทำให้มีค่าการดูดกลืนแสงหรือค่า $\log(1/R)$ มากกว่าวิธีการปั่นและการกรองที่มีอนุภาคของพริกและกระเทียมขนาดเล็ก หรือไม่มีอนุภาคเลย

การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมเพื่อสร้างสมการทำนาย จะทำการตัดข้อมูลสเปกตรัมช่วงความยาวคลื่น 1920-1994 นาโนเมตรออก เนื่องจากค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นนี้มีการเลื่อนตัวของสเปกตรัมหรือยอดของสเปกตรัมมีลักษณะหวัแตก ดังแสดงในภาพที่ 17(ข) ที่กล่าวมา ดังนั้นเพื่อลดความคลาดเคลื่อนที่อาจเกิดขึ้นจากการวัดค่าการดูดกลืนแสง หรือการซ้อนทับกันของสเปกตรัม การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพของน้ำจิ้มไก่จึงจะใช้ข้อมูลสเปกตรัมเฉพาะช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร (ข้อมูลสเปกตรัม 663 ค่า) ดังแสดงในภาพที่ 18

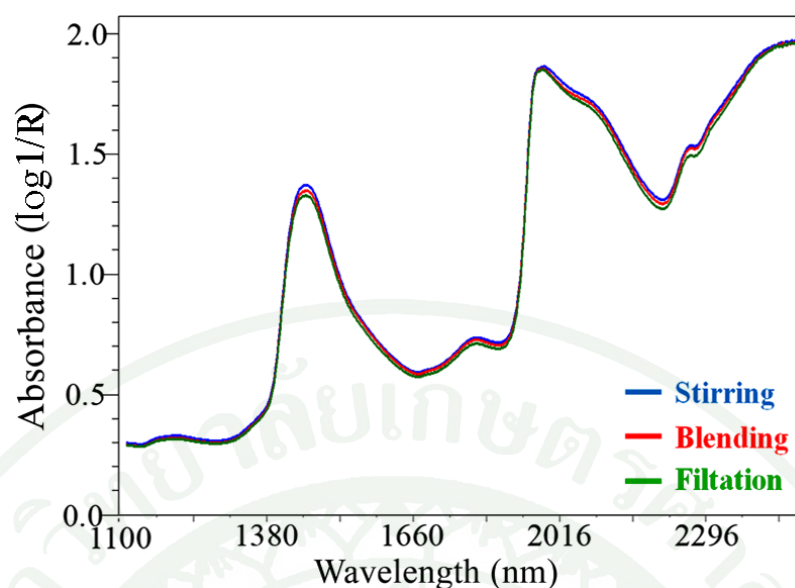


ก) ช่วงความยาวคลื่นทั้งหมด



ข) ภาพขยายช่วงความยาวคลื่น 1900-2400 นาโนเมตร

ภาพที่ 17 สเปกตรัมเฉลี่ยของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี (— การคน — การปั่น และ — การกรอง) โดยแสดง ก) ช่วงความยาวคลื่นทั้งหมด และ ข) ภาพขยายช่วงความยาวคลื่น 1900-2400 นาโนเมตร



ภาพที่ 18 สเปกตรัมเฉลี่ยของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี (— การคน — การปั่น และ — การกรอง) ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร

สมการทำนายปริมาณ TSS สร้างโดยนำข้อมูลสเปกตรัมของน้ำจิ้มไก่ (ตัวแปรอิสระ) มาหาความสัมพันธ์กับปริมาณ TSS (ตัวแปรตาม) ด้วยวิธี Partial least squares regression (PLSR) โดยใช้ตัวอย่างกลุ่มสร้างสมการ (Calibration) จำนวน 50 ตัวอย่าง และตรวจสอบความแม่นยำของสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี Cross-validation ทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของสมการทำนายที่สร้างขึ้นจากวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ทั้ง 3 วิธี โดยความแม่นยำของสมการทำนายจะพิจารณาจากค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ (Correlation coefficient, R) และค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนกำลังสองจากการทำนายด้วยตัวอย่างกลุ่มตรวจสอบความถูกต้อง (Root mean square error prediction in cross-validation, RMSECV) ผลการทดลองดังแสดงในตารางที่ 5

ตารางที่ 5 การเปรียบเทียบค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR ของน้ำจิ้มไก่ที่ผ่านการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี (การคน การปั่น และการกรอง) เพื่อทำนายปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

วิธีเตรียมตัวอย่าง	แฟกเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{cv}	RMSECV
การคน	3	0.992	0.73	0.989	0.81
การปั่น	3	0.990	0.83	0.987	0.94
การกรอง	3	0.900	2.27	0.882	2.47

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ วิธีเตรียมตัวอย่างที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด

แฟกเตอร์ คือ จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R_{cal} คือ Correlation coefficient of calibration

RMSEC คือ Root mean square error prediction of calibration

R_{cv} คือ Correlation coefficient of cross-validation

RMSECV คือ Root mean square error prediction of cross-validation

เมื่อพิจารณาข้อมูลค่าสถิติของสมการที่สร้างขึ้นในตารางที่ 5 พบว่า สมการ PLSR ที่สร้างขึ้นจากการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ด้วยวิธีการคน มีความเหมาะสมและแม่นยำในการทำนายปริมาณ TSS มากที่สุด โดยมีค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.992 และ 0.73°Brix ตามลำดับ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{cv} และ RMSECV เท่ากับ 0.989 และ 0.81°Brix ตามลำดับ ซึ่งวิธีการคนนี้ให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} สูงสุด และค่า RMSECV ต่ำสุดเมื่อเทียบกับการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่วิธีอื่น เนื่องจากวิธีการเตรียมตัวอย่างโดยการปั่นหรือการกรองจะทำให้ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่อมีฟองอากาศแทรกอยู่ในเนื้อตัวอย่างจำนวนมาก จึงทำให้ยากต่อการบรรจุตัวอย่างลงในอุปกรณ์ใส่ตัวอย่าง (Sample cell) สำหรับวัดการดูดกลืนแสง ซึ่งถ้ามีฟองอากาศเล็ดลอดเข้าไปจะทำให้แสงที่ผ่านตัวอย่างเกิดการแพร่กระจายที่แตกต่างกัน ทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในสเปกตรัมได้ (สิวลักษณ์ และอนุพันธ์, 2552) ดังนั้นจึงเลือกวิธีการคนเป็นวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสง เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายในขั้นต่อไป (ข้อที่ 2 และ 3)

2. การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่

การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่จำนวน 180 ตัวอย่าง มีขั้นตอนการศึกษาทั้งหมด 3 ขั้นตอน เริ่มจากการวัดค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ (ข้อ 2.1) กำหนดเป็นตัวแปรตาม และวัดค่าการดูดกลืนแสง (ข้อ 2.2) กำหนดเป็นตัวแปรอิสระ จากนั้นนำข้อมูลค่าเคมีและกายภาพ และข้อมูลสเปกตรัมมาใช้สร้างสมการทำนาย (ข้อ 2.3) โดยการสร้างสมการแบ่งออกเป็น 2 แบบ คือการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR (ข้อ 2.3.1) และการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เปรียบเทียบกับวิธีการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR (ข้อ 2.3.2) เพื่อให้ได้สมการทำนายที่ดีที่สุดสำหรับการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่

2.1 ค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่

ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่างถูกนำมาแบ่งเป็นกลุ่ม Calibration และ Validation ในอัตราส่วน 70% ต่อ 30% แล้ววิเคราะห์ตัวอย่างด้วยวิธีมาตรฐาน โดยศึกษาองค์ประกอบทางเคมีและกายภาพในเรื่องปริมาณ TSS ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ปริมาณกรดทั้งหมด (ในรูปกรดอะซิติก) ค่า pH ค่าสี L^* a^* b^* C^* และ h ผลค่าสถิติเบื้องต้นดังแสดงในตารางที่ 6 พบว่าตัวอย่างน้ำจิ้มไก่มีความแตกต่างกันทั้งในด้านเคมีและกายภาพ โดยพิจารณาได้จากค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานและช่วงข้อมูลของแต่ละค่าคุณภาพ ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ในกลุ่ม Calibration มีค่าเคมีและกายภาพของครอบคลุมค่าเคมีและกายภาพของกลุ่มตัวอย่างที่จะนำมาตรวจสอบความสามารถของสมการ (กลุ่ม Validation) โดยตัวอย่างทั้งสองกลุ่มมีการกระจายตัวของค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพใกล้เคียงกัน

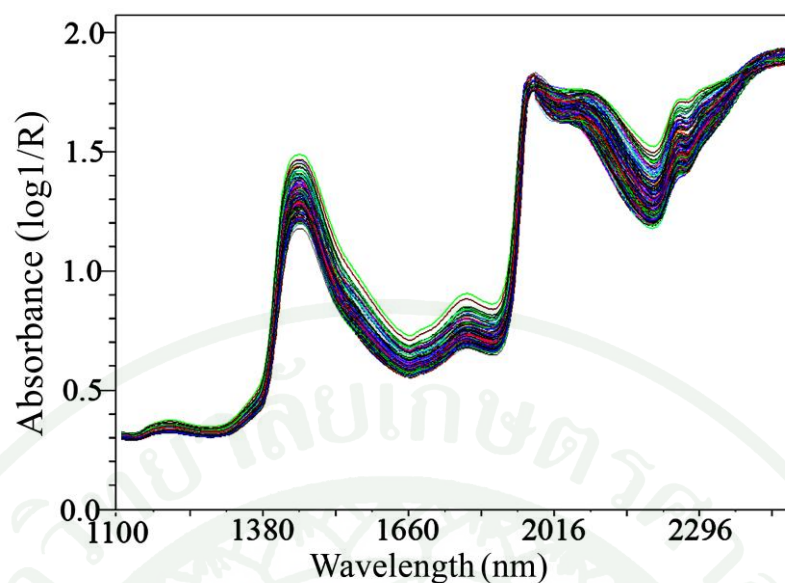
2.2 ค่าการดูดกลืนแสง

การวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ด้วยเครื่อง NIR เตรียมตัวอย่างโดยวิธีการคน 10-15 ครั้งเพื่อให้ตัวอย่างผสมเข้ากันดีก่อนนำไปวัดการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เส้นสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่น (แสดงในภาพผนวกที่ 4) มีการเลื่อนตัวของสเปกตรัมหรือยอดของสเปกตรัมมีลักษณะหัวแตก เช่นเดียวกับข้อที่ 1 เพื่อลดปัญหาดังกล่าว ในการวิเคราะห์ข้อมูลจะทำการตัดความยาวคลื่น 1920-1994 นาโนเมตรออก เส้นสเปกตรัมของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ในช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500

นาโนเมตร ซึ่งในที่นี้จะเรียกว่าเส้นสเปกตรัมเริ่มต้น (Original spectra) แสดงดังภาพที่ 19 เมื่อพิจารณาลักษณะสเปกตรัมจะพบว่าการดูดกลืนแสงที่เด่นชัดของน้ำ ที่ความยาวคลื่น 1450 และ 1916 นาโนเมตร ซึ่งเป็นตำแหน่งที่มองเห็นยอดสเปกตรัมได้เด่นชัดในตัวอย่างที่มีน้ำเป็นองค์ประกอบ (Osborne *et al.*, 1993) อิทธิพลจากสเปกตรัมของน้ำทำให้บังคับยอดสเปกตรัมขององค์ประกอบอื่น อีกทั้งตัวอย่างน้ำจิ้มไก่มีลักษณะเนื้อสัมผัสที่ไม่เป็นเนื้อเดียวกันจึงอาจมีความแปรปรวนที่เกิดจากการกระเจิงแสง ดังนั้นก่อนการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่จึงมีการใช้วิธีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์เพื่อลดความแปรปรวนที่อาจเกิดขึ้น

ตารางที่ 6 ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของปริมาณ TSS ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ปริมาณกรดทั้งหมด ค่า pH ค่าสี L* a* b* C* และ h ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

ค่าคุณภาพ	กลุ่ม Calibration (126 ตัวอย่าง)			กลุ่ม Validation (54 ตัวอย่าง)		
	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล
TSS (°Brix)	49.97	6.60	34.25 - 68.40	49.23	5.57	35.50 - 58.80
น้ำตาลรีดิวซ์ (%w/w)	26.52	13.35	4.67 - 53.55	26.01	12.93	5.47 - 50.04
น้ำตาลทั้งหมด (%w/w)	41.90	6.13	27.26 - 54.33	42.16	5.81	29.46 - 53.57
กรดทั้งหมด (%w/w)	0.75	0.25	0.14 - 1.22	0.75	0.23	0.16 - 1.09
pH	3.35	0.25	2.72 - 4.03	3.34	0.22	2.79 - 3.88
ค่าสี L*	24.83	4.86	9.26 - 38.92	24.72	4.27	17.94 - 35.98
ค่าสี a*	28.71	2.87	18.94 - 37.03	28.35	2.73	19.84 - 34.59
ค่าสี b*	32.82	6.96	10.60 - 58.68	33.56	6.15	15.73 - 48.03
ค่าสี C*	43.87	5.65	29.03 - 63.24	43.35	5.28	29.03 - 57.46
ค่าสี h (°)	48.94	4.37	38.02 - 60.31	48.22	3.62	41.39 - 58.07

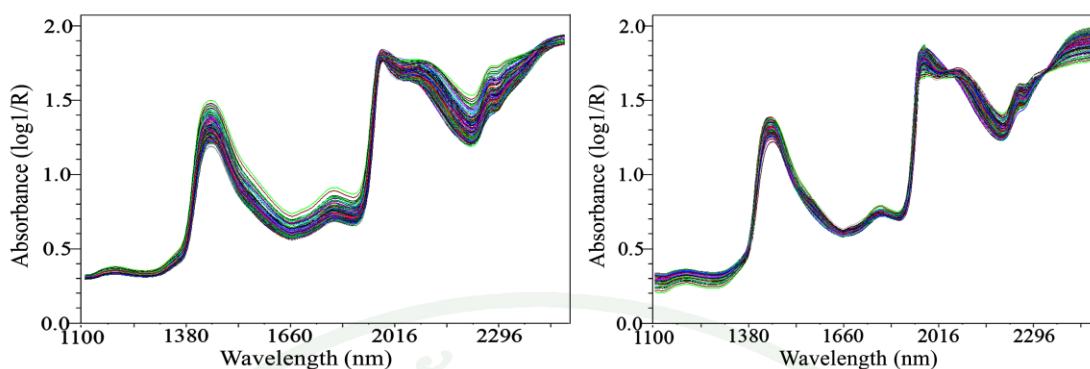


ภาพที่ 19 สเปกตรัมเริ่มต้นของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ในช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร

2.3 การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมโดยการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR

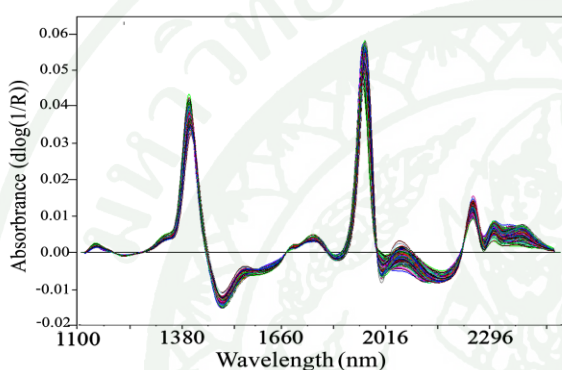
จากข้อมูลสเปกตรัมของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่างที่ได้จากการทดลองในข้อ 2.2 นำมาผ่านวิธีการปรับแต่งสเปกตรัม (Pretreatment) 8 วิธี ได้แก่ 1) วิธี Savitzky-Golay smoothing 2) วิธี Multiplicative scatter correction (MSC) 3) วิธี MSC และ First derivative 4) วิธี MSC และ Second derivative 5) วิธี First derivative 6) วิธี First derivative และ MSC 7) วิธี Second derivative และ 8) วิธี Second derivative และ MSC ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งทั้ง 8 วิธี แสดงดังภาพที่ 20

เมื่อพิจารณาลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีต่างๆ พบว่าสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี Savitzky-Golay smoothing (ภาพที่ 20(ก)) เส้นสเปกตรัมจะเรียบสม่ำเสมอกว่า สเปกตรัมเริ่มต้น (ภาพที่ 19) แต่มีลักษณะไม่แตกต่างจากเดิม ในภาพที่ 20(ข) เป็นสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC สามารถลดปัญหาการกระเจิงแสง (อนุพันธ์, 2552) สเปกตรัมจะมีลักษณะเหมือนถูกหมุนให้มาใกล้กับสเปกตรัมเฉลี่ย โดยสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วย 2 วิธีนี้ยังคงมีฐานกว้างเนื่องจากอิทธิพลของสเปกตรัมนำดังที่กล่าวมาข้างต้น

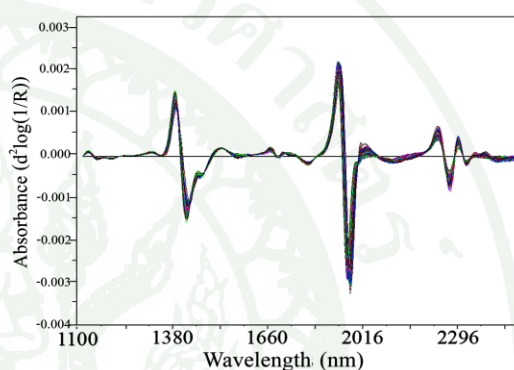


ก) Savitzky-Golay smoothing
(10 data points gap, second order)

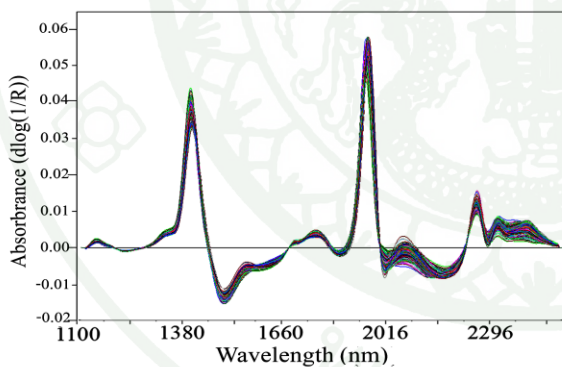
ข) MSC



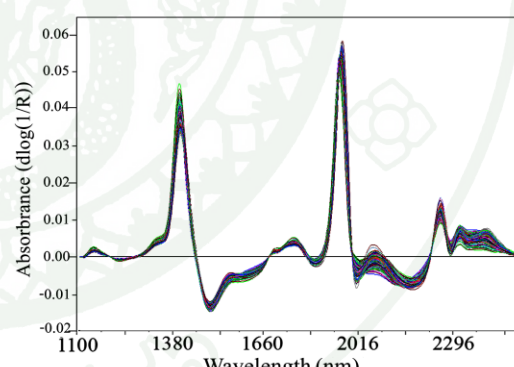
ค) MSC และ First derivative



จ) MSC และ Second derivative

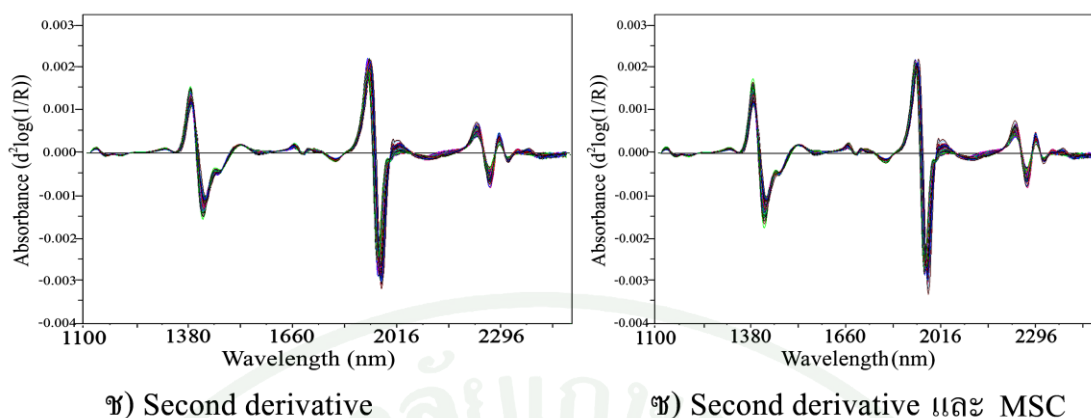


ฉ) First derivative



ซ) First derivative และ MSC

ภาพที่ 20 ลักษณะสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีแตกต่างกันด้วยโปรแกรม Unscrambler® ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร ก) วิธี Savitzky-Golay smoothing ข) วิธี MSC ค) วิธี MSC และ First derivative ง) วิธี MSC และ Second derivative จ) วิธี First derivative ฉ) วิธี First derivative และ MSC ช) วิธี Second derivative และ ซ) วิธี Second derivative และ MSC



ภาพที่ 20 (ต่อ)

ในภาพที่ 20(ค) 20(จ) และ 20(ฉ) เป็นสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ตามด้วย First derivative วิธี First derivative และวิธี First derivative ตามด้วย MSC ตามลำดับ ลักษณะสเปกตรัมที่ได้จะมีการแยกจุดยอดของสเปกตรัมให้เด่นชัดมากขึ้น เนื่องมาจากการปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี First derivative หรือการใช้วิธี First derivative เข้าร่วม เป็นวิธีการปรับแต่งโดยการหาความชันของสเปกตรัมเริ่มต้น สามารถลดปัญหาการซ้อนทับกันของจุดยอดในสเปกตรัมเดิม (Norris and Williams, 1984)

สำหรับภาพที่ 20(ง) 20(ข) และ 20(ซ) เป็นสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC ตามด้วย Second derivative วิธี Second derivative และวิธี Second derivative ตามด้วย MSC ตามลำดับ โดยวิธี Second derivative หรือการใช้วิธี Second derivative เข้าร่วม สามารถลดปัญหาการรบกวนของสัญญาณต่อค่าการดูดกลืนแสง และการซ้อนทับกันของจุดยอดในสเปกตรัมเดิม (Norris and Williams, 1984) ลักษณะของสเปกตรัมจะมีการแยกจุดยอดให้เด่นชัดมากขึ้น แต่มีลักษณะหวักลบอยู่ในทิศตรงข้ามและตรงกับตำแหน่งจุดยอดเริ่มต้น

นำข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด 9 ชุดข้อมูล (ข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้น 1 ชุดข้อมูลและข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธีต่างๆ 8 ชุดข้อมูล) มาหาความสัมพันธ์กับค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ ในที่นี้คือ ปริมาณ TSS ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ปริมาณกรดทั้งหมด ค่า pH ค่าสี L^* a^* b^* C^* และ h โดยใช้วิธีทางสถิติ PLSR ทำการแบ่งตัวอย่างเป็นกลุ่ม Calibration จำนวน 126 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 54 ตัวอย่าง โดยค่าเคมีและกายภาพ

แต่ละค่าจะมีสมการทำนายทั้งหมด 9 สมการ ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างได้แสดงในตารางที่ 7-16

ตารางที่ 7 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณ TSS ของน้ำจืดใก้ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	3	0.987	1.07	0.973	1.28	4.33
Savizky-Golay smoothing	3	0.987	1.06	0.974	1.24	4.45
MSC	3	0.989	0.96	0.985	0.95	5.78
MSC และ First derivative	3	0.987	1.05	0.982	1.05	5.26
MSC และ Second derivative	3	0.982	1.25	0.975	1.23	4.50
First derivative	3	0.987	1.05	0.983	1.09	5.37
First derivative และ MSC	3	0.987	1.05	0.982	1.06	5.22
Second derivative	3	0.982	1.25	0.975	1.24	4.48
Second derivative และ MSC	3	0.985	1.12	0.979	1.12	4.93

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ วิธีการปรับแต่งสเปกตรัมที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด

แฟคเตอร์ คือ จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R_{cal} คือ Correlation coefficient of calibration

RMSEC คือ Root mean square error prediction of calibration

R_{val} คือ Correlation coefficient of validation

RMSEP คือ Root mean square error prediction of validation

RPD คือ Ratio of standard error of prediction to standard deviation

None คือ ไม่มีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัม (ใช้ข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้น)

MSC คือ Multiplicative scatter correction

ตารางที่ 8 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	6	0.960	3.74	0.941	4.35	2.94
Savizky-Golay smoothing	6	0.959	3.75	0.941	4.35	2.95
MSC	6	0.962	3.65	0.948	4.09	3.15
MSC และ First derivative	6	0.961	3.66	0.948	4.09	3.14
MSC และ Second derivative	6	0.964	3.56	0.940	4.38	2.92
First derivative	7	0.964	3.53	0.944	4.22	3.04
First derivative และ MSC	7	0.965	3.50	0.944	4.26	3.02
Second derivative	7	0.965	3.48	0.945	4.22	3.03
Second derivative และ MSC	6	0.965	3.50	0.943	4.28	3.00

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 9 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณน้ำตาลทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	6	0.951	1.89	0.945	1.91	3.01
Savizky-Golay smoothing	6	0.948	1.94	0.944	1.94	2.96
MSC	6	0.952	1.88	0.951	1.79	3.21
MSC และ First derivative	6	0.953	1.84	0.951	1.82	3.16
MSC และ Second derivative	6	0.963	1.65	0.948	1.91	3.02
First derivative	6	0.953	1.85	0.948	1.86	3.09
First derivative และ MSC	6	0.954	1.83	0.952	1.83	3.15
Second derivative	6	0.958	1.75	0.946	1.90	3.02
Second derivative และ MSC	6	0.965	1.60	0.949	1.92	2.99

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 10 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าปริมาณกรด
ทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	10	0.937	0.09	0.912	0.09	2.44
Savizky-Golay smoothing	10	0.925	0.09	0.914	0.09	2.46
MSC	9	0.936	0.09	0.917	0.09	2.51
MSC และ First derivative	9	0.941	0.08	0.915	0.09	2.45
MSC และ Second derivative	9	0.954	0.07	0.883	0.11	2.13
First derivative	8	0.920	0.10	0.900	0.10	2.29
First derivative และ MSC	9	0.933	0.09	0.897	0.10	2.23
Second derivative	9	0.940	0.08	0.868	0.11	2.01
Second derivative และ MSC	9	0.949	0.08	0.865	0.12	1.98

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 11 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่า pH ของน้ำจิ้มไก่
180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	5	0.753	0.16	0.740	0.15	1.47
Savizky-Golay smoothing	5	0.750	0.16	0.738	0.15	1.46
MSC	5	0.709	0.18	0.662	0.16	1.31
MSC และ First derivative	4	0.707	0.18	0.687	0.16	1.36
MSC และ Second derivative	5	0.750	0.16	0.632	0.17	1.24
First derivative	5	0.721	0.17	0.654	0.16	1.30
First derivative และ MSC	4	0.706	0.18	0.684	0.16	1.36
Second derivative	5	0.736	0.17	0.659	0.17	1.10
Second derivative และ MSC	5	0.752	0.16	0.623	0.18	1.22

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 12 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี L^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	8	0.609	3.84	0.602	3.44	1.24
Savizky-Golay smoothing	9	0.594	3.90	0.589	3.50	1.23
MSC	6	0.518	4.14	0.442	3.88	1.09
MSC และ First derivative	7	0.505	4.18	0.458	3.79	1.12
MSC และ Second derivative	9	0.760	3.15	0.353	4.45	0.96
First derivative	9	0.551	4.04	0.456	3.85	1.11
First derivative และ MSC	7	0.513	4.16	0.491	3.69	1.15
Second derivative	6	0.532	4.10	0.381	3.99	1.07
Second derivative และ MSC	6	0.588	3.92	0.322	4.18	1.02

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 13 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี a^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	9	0.579	2.33	0.335	2.88	0.94
Savizky-Golay smoothing	9	0.476	2.51	0.412	2.54	1.07
MSC	9	0.610	2.26	0.315	2.71	1.00
MSC และ First derivative	6	0.411	2.60	0.330	2.59	1.05
MSC และ Second derivative	6	0.482	2.50	0.270	2.67	1.01
First derivative	6	0.370	2.65	0.247	2.67	1.02
First derivative และ MSC	5	0.378	2.64	0.341	2.58	1.05
Second derivative	8	0.618	2.24	0.314	2.86	0.95
Second derivative และ MSC	8	0.618	2.24	0.292	2.89	0.92

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 14 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี b^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	5	0.564	5.73	0.394	6.23	1.03
Savizky-Golay smoothing	6	0.566	5.72	0.389	6.28	1.03
MSC	10	0.756	4.54	0.211	7.36	0.86
MSC และ First derivative	8	0.520	5.93	0.169	6.61	0.95
MSC และ Second derivative	8	0.693	5.00	0.217	7.16	0.88
First derivative	8	0.491	6.04	0.126	6.66	0.93
First derivative และ MSC	9	0.574	5.68	0.235	6.77	0.92
Second derivative	8	0.687	5.04	0.241	6.96	0.90
Second derivative และ MSC	8	0.696	4.98	0.232	7.06	0.89

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 15 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี C^* ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	8	0.642	4.31	0.357	5.35	0.98
Savizky-Golay smoothing	8	0.625	4.39	0.379	5.18	1.01
MSC	10	0.801	3.37	0.433	5.05	1.04
MSC และ First derivative	8	0.615	4.44	0.381	4.96	1.06
MSC และ Second derivative	8	0.747	3.74	0.370	5.25	1.00
First derivative	9	0.620	4.41	0.385	4.96	1.06
First derivative และ MSC	8	0.617	4.43	0.385	4.96	1.06
Second derivative	10	0.799	3.39	0.428	4.99	1.05
Second derivative และ MSC	9	0.801	3.37	0.431	5.01	1.04

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

ตารางที่ 16 ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายค่าสี h ของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	แฟลคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
None	8	0.483	3.81	0.406	3.35	1.08
Savizky-Golay smoothing	8	0.454	3.88	0.417	3.30	1.09
MSC	9	0.664	3.26	0.438	3.25	1.11
MSC และ First derivative	9	0.507	3.76	0.483	3.15	1.14
MSC และ Second derivative	8	0.663	3.26	0.617	2.88	1.25
First derivative	10	0.523	3.71	0.494	3.14	1.15
First derivative และ MSC	9	0.510	3.75	0.496	3.14	1.15
Second derivative	9	0.682	3.19	0.625	2.85	1.26
Second derivative และ MSC	8	0.659	3.28	0.623	2.85	1.26

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

จากตารางที่ 7-16 ข้อมูลทางสถิติที่แสดงในตาราง สามารถสรุปได้ว่าการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมวิธีใดให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด โดยพิจารณาจากค่า R_{cal} และ RPD ที่มีค่าสูงสุด และ ค่า RMSEP ที่มีค่าต่ำสุด เช่น การสร้างสมการทำนายด้วยวิธี PLSR เพื่อทำนายปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ (ตารางที่ 7) พบว่า การปรับแต่งสเปกตรัมด้วยวิธี MSC ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด คือมีค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.989 และ 0.96°Brix ตามลำดับ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่ามีค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.985, 0.95°Brix และ 5.78 ตามลำดับ ซึ่งสมการที่ใช้การปรับแต่งด้วยวิธี MSC นี้ ให้ค่า R_{cal} และ RPD สูงสุด และค่า RMSEP ต่ำสุด เมื่อเทียบกับการปรับแต่งวิธีอื่น ดังนั้นจึงเลือกวิธี MSC เป็นวิธีที่เหมาะสมสำหรับการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัม เพื่อสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ เป็นต้น สำหรับการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพอื่นๆ ทำการพิจารณาวิธีการปรับแต่งสเปกตรัมที่เหมาะสมในลักษณะเดียวกัน โดยสรุปได้ดังตารางที่ 17

ตารางที่ 17 สรุปวิธีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมที่เหมาะสมในการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและ
กายภาพของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

วิธีการปรับแต่งสเปกตรัม	สมการทำนาย									
	TSS	น้ำตาล รีดิวซ์	น้ำตาล ทั้งหมด	กรด ทั้งหมด	pH	ค่าสี L*	ค่าสี a*	ค่าสี b*	ค่าสี C*	ค่าสี h
None					✓	✓		✓		
Savitzky-Golay smoothing										
MSC	✓	✓	✓	✓						
MSC และ First derivative							✓			
MSC และ Second derivative										
First derivative										
First derivative และ MSC									✓	
Second derivative										
Second derivative และ MSC										✓

หมายเหตุ ✓ หมายถึง วิธีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมที่ถูกเลือกใช้ในการสร้างสมการทำนาย

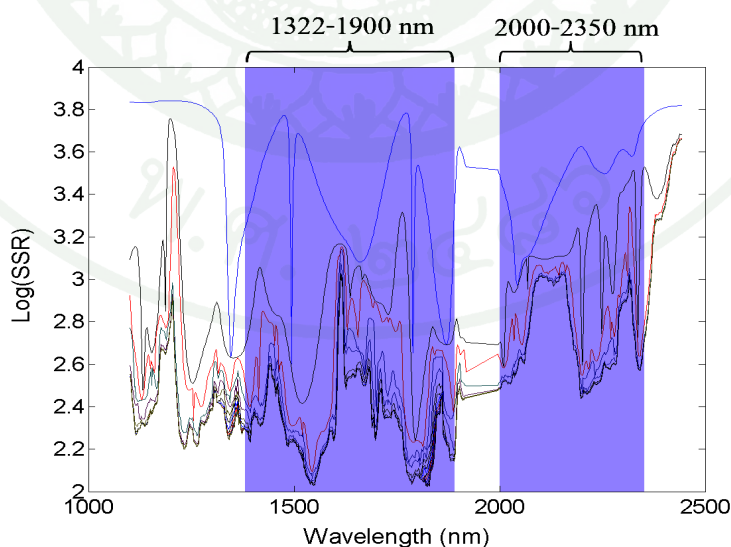
การสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ในแต่ละค่า มีวิธีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมที่เหมาะสมแตกต่างกัน เช่น การสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด และปริมาณกรดทั้งหมด ใช้วิธี MSC ในการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัม ส่วนการสร้างสมการทำนายค่า pH ค่าสี L* และ b* ไม่จำเป็นต้องใช้วิธีการใดในการปรับแต่งข้อมูล (ใช้ข้อมูลสเปกตรัมเริ่มต้น) เป็นต้น ข้อมูลจากตารางที่ 17 พบว่าวิธีการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมที่เหมาะสม ส่วนใหญ่ คือวิธี MSC หรือการใช้วิธี MSC ร่วมกับวิธีอื่น ซึ่งสามารถลดปัญหาการกระเจิงแสง เนื่องจากตัวอย่างน้ำจิ้มไก่อมีลักษณะเนื้อสัมผัสที่ไม่เป็นเนื้อเดียวกัน ดังนั้นในขั้นตอนการพัฒนาสมการทำนายให้ดีที่สุดโดยการคัดเลือกความยาวคลื่นด้วยวิธี Moving window partial least squares regression (MWPLSR) และ Searching combination moving window partial least squares regression (SCMWPLSR) จะเลือกใช้วิธี MSC ในการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมให้เหมาะสมสำหรับการสร้างสมการทำนายคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ในขั้นต่อไป รวมถึงใช้ในการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมในการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่อด้วย

2.4 การพัฒนาสมการทำนายให้ดีที่สุดโดยการคัดเลือกความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เปรียบเทียบกับการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR

การสร้างสมการทำนายด้วยวิธี PLSR เป็นการใช้ข้อมูลสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่น ซึ่งอาจมีข้อมูลที่ไม่เกี่ยวข้องหรือไม่มีความสัมพันธ์กับค่าเคมีและกายภาพถูกนำเข้าไปใช้สร้างสมการด้วย วิธีการคัดเลือกความยาวคลื่น 2 วิธี ได้แก่ MWPLSR และ SCMWPLSR จึงถูกนำมาใช้ในการเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม ก่อนนำไปสร้างสมการทำนายเพื่อให้สมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่มีประสิทธิภาพเพิ่มขึ้น

2.4.1 การเลือกช่วงความยาวคลื่น ด้วยวิธี MWPLSR

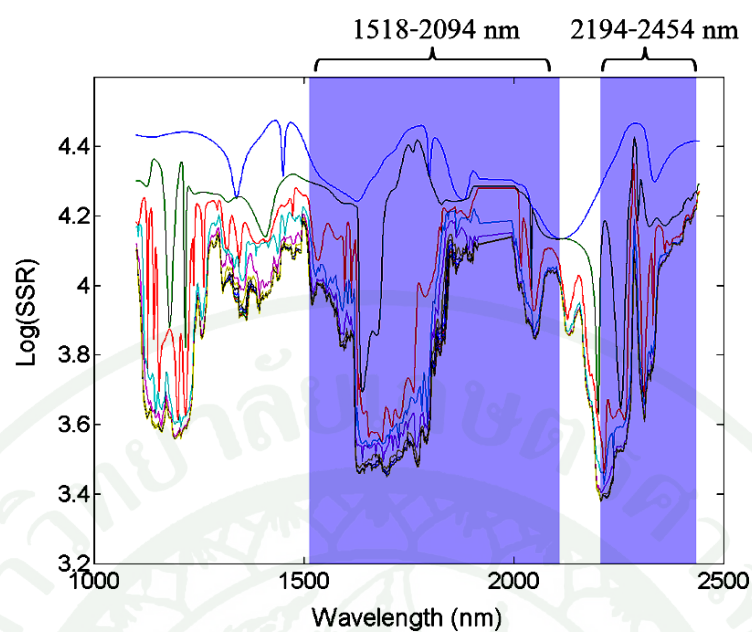
เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC มาคัดเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสม ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร วิธี MWPLSR จะคำนวณค่าความผิดพลาดระหว่างค่าที่วัดจริงและค่าทำนายในรูปของ Log(SSR) (Sums of squares residues) ทำการพิจารณาเลือกช่วงความยาวคลื่นที่มีค่า Log(SSR) ต่ำ มาใช้ในการสร้างสมการทำนาย เนื่องจากเป็นช่วงความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับค่าเคมีและกายภาพมาก สำหรับการสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR แสดงดังภาพที่ 21



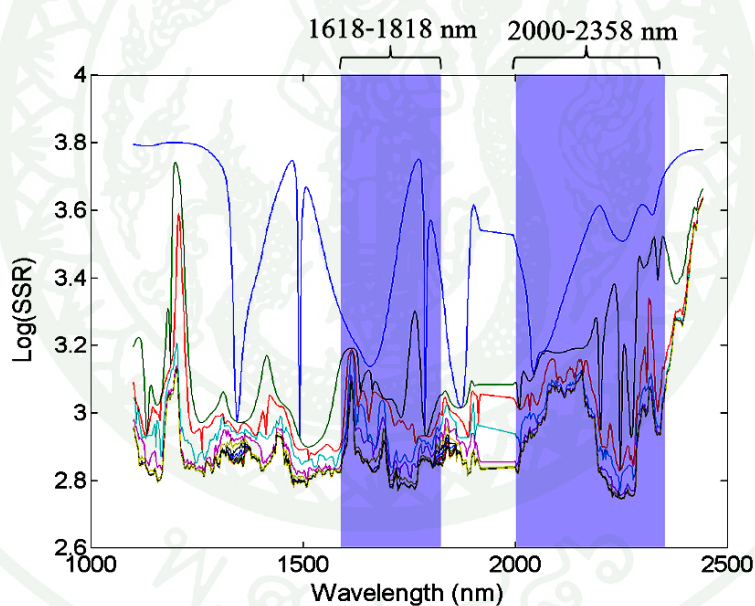
ภาพที่ 21 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่แรเงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่

การสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS จะเลือกช่วงความยาวคลื่นที่ให้ค่า Log(SSR) ต่ำ และนำไปวิเคราะห์สร้างสมการทำนายด้วยวิธี PLSR ซึ่งจากภาพที่ 21 เลือกช่วง 1322-1900 นาโนเมตร และ 2000-2350 นาโนเมตร โดยช่วงความยาวคลื่นแรกประกอบด้วยช่วงความยาวคลื่น 1322-1900 นาโนเมตร มีความเกี่ยวข้องกับหมู่ CH_2 และ CH_3 และช่วงความยาวคลื่นสองประกอบด้วยช่วงความยาวคลื่น 2000-2322 นาโนเมตร มีความเกี่ยวข้องกับหมู่ CHO (Williams and Norris, 1990)

สำหรับค่าเคมีและกายภาพอื่นๆ ได้แก่ ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ปริมาณกรดทั้งหมด ค่า pH ค่าสี L^* a^* b^* C^* และ h ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR แสดงดัง ภาพที่ 22(ก) 22(ข) 22(ค) 22(ง) 22(จ) 22(ฉ) 22(ช) 22(ซ) และ 22(ณ) ตามลำดับ การเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมเพื่อนำไปสร้างสมการทำนาย พิจารณาในลักษณะเดียวกับการสร้างสมการทำนายปริมาณ TSS คือเลือกช่วงความยาวคลื่นที่ให้ค่า Log(SSR) ต่ำ ซึ่งช่วงความยาวคลื่นดังกล่าวมีความเกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะของโมเลกุลต่างๆ แสดงดังตารางที่ 18 จะเห็นว่ากลุ่มพันธะที่เกี่ยวข้องส่วนใหญ่คือพันธะ CH เนื่องจากส่วนประกอบของน้ำจิ้มไก่คือน้ำตาล น้ำส้มสายชู และสารให้สีในพริก คือ แคปแซนทีน (Capsanthin) ซึ่งสารประกอบเหล่านี้ล้วนมีพันธะ CH เป็นองค์ประกอบในโมเลกุล ดังนั้นการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ต้องเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เกี่ยวข้องกับพันธะ CH ในการสร้างสมการ

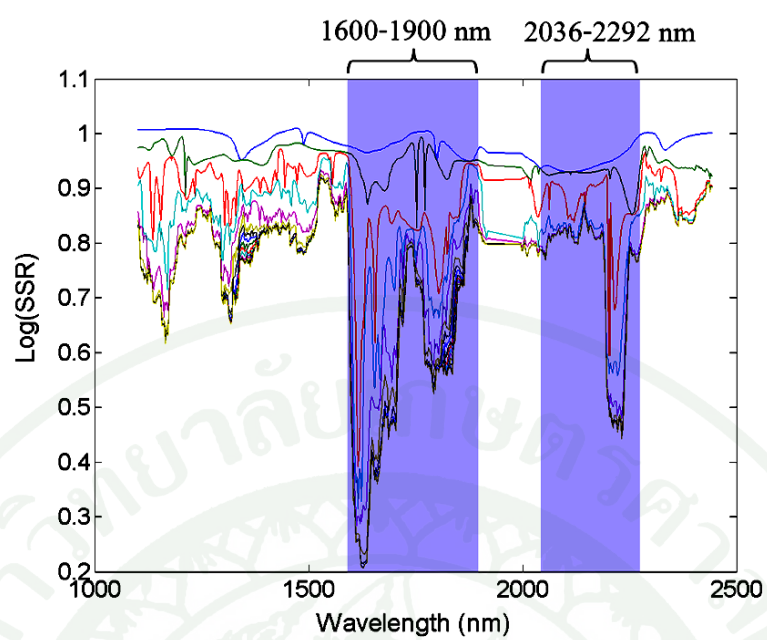


ก) ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์

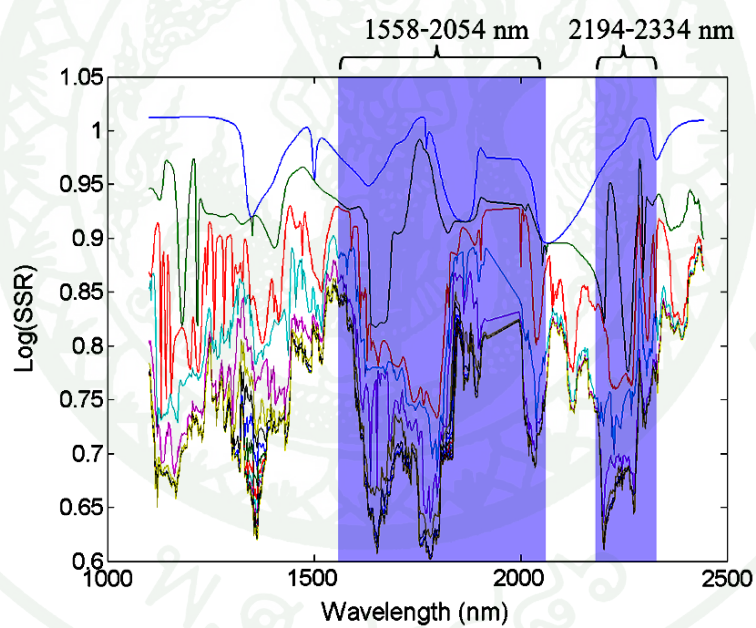


ข) ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด

ภาพที่ 22 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่แรเงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ ก) ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ข) ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด ค) ปริมาณกรดทั้งหมด ง) ค่า pH จ) ค่าสี L^* ฉ) ค่าสี a^* ช) ค่าสี b^* ซ) ค่าสี C^* และ ฅ) ค่าสี h

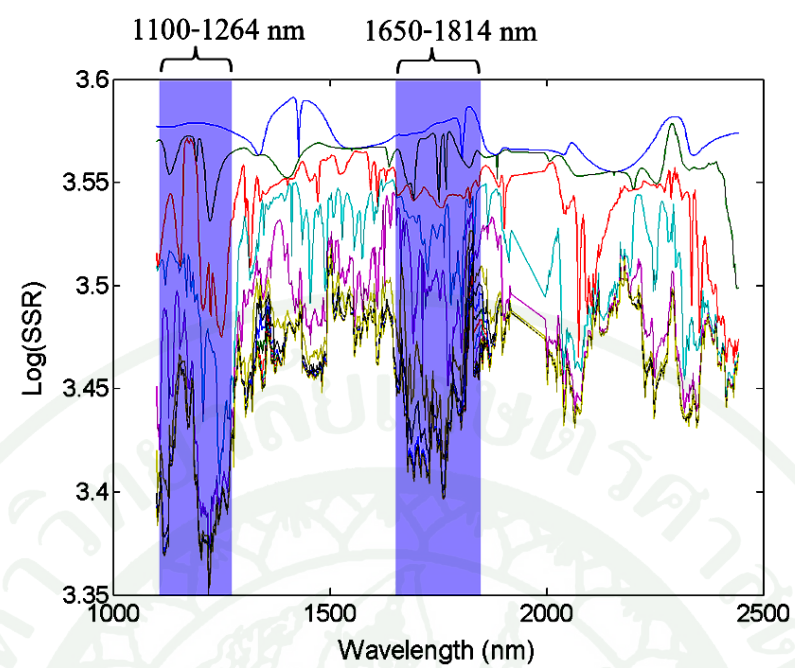
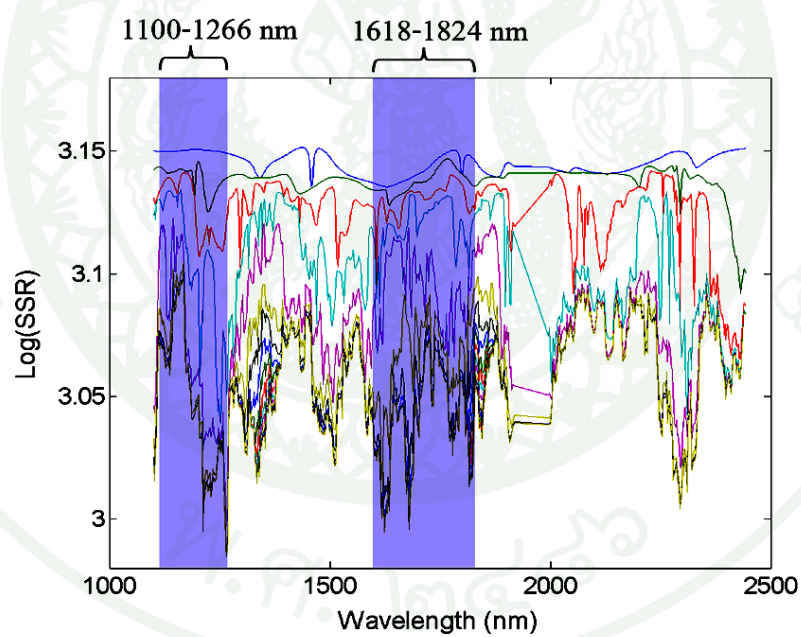


ค) ปริมาณกรดทั้งหมด

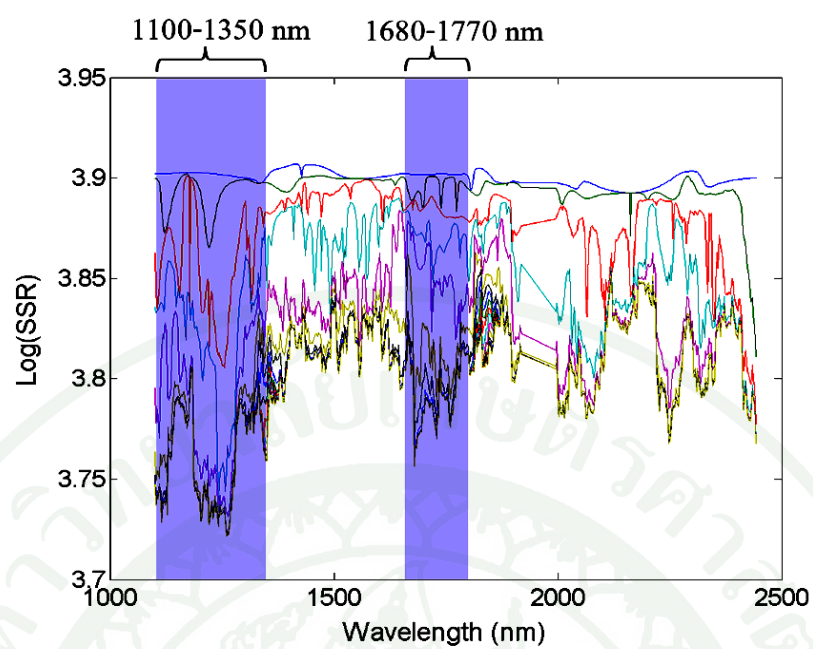


ง) ค่า pH

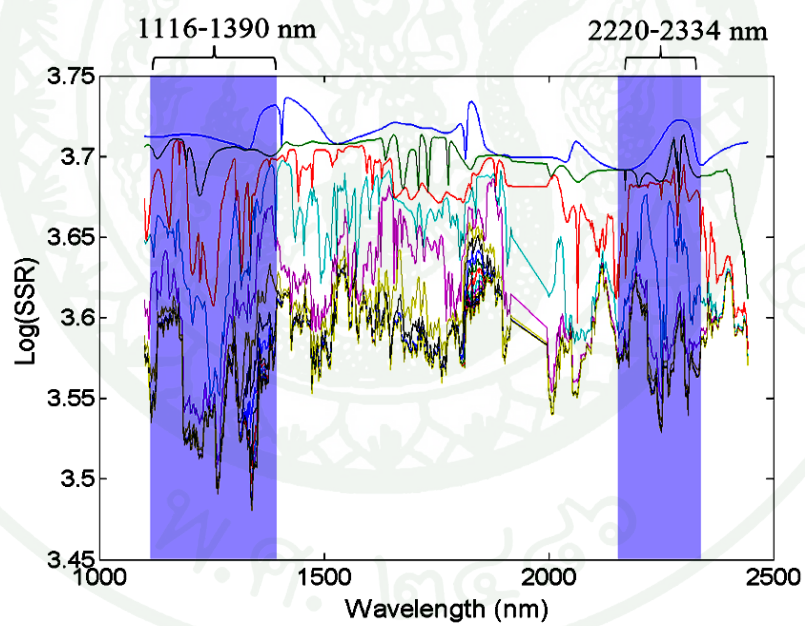
ภาพที่ 22 (ต่อ)

จ) ค่าสี L^* ฉ) ค่าสี a^*

ภาพที่ 22 (ต่อ)

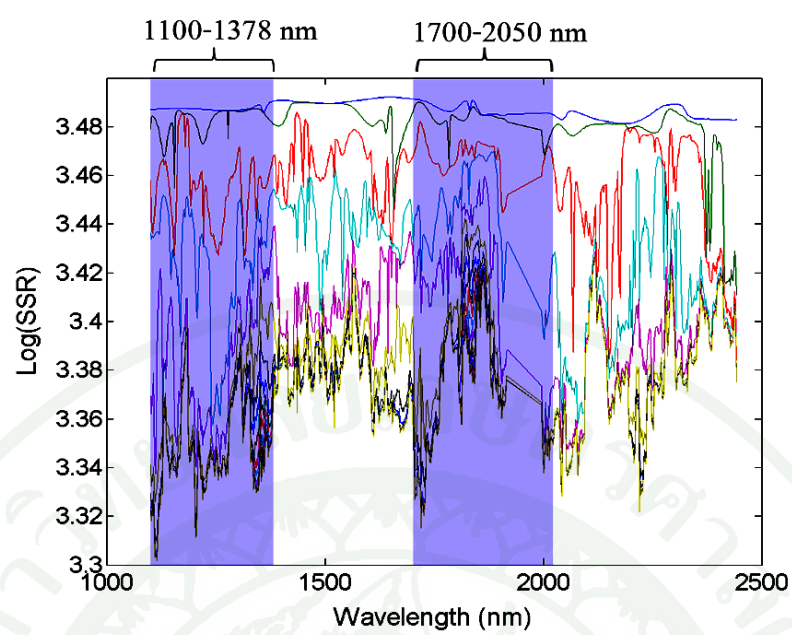


ข) ค่าสี b^*



ค) ค่าสี C^*

ภาพที่ 22 (ต่อ)



ณ) คำสี h

ภาพที่ 22 (ต่อ)

ตารางที่ 18 กลุ่มพันธะและโมเลกุลที่เกี่ยวข้องกับช่วงความยาวคลื่นที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR
สำหรับการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่

ค่าคุณภาพ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	กลุ่มพันธะและโมเลกุลที่เกี่ยวข้อง
TSS	1322-1900	CH ₂ , CH ₃ , -OH
	2000-2350	-CHO, CH ₂
น้ำตาลรีดิวัซ	1518-2094	CH ₂ , CH ₃ , -OH
	2194-2454	Starch, CH ₂ , -CH
น้ำตาลทั้งหมด	1618-1818	CH ₂ , CH ₃
	2000-2358	-CHO, CH ₂
กรดทั้งหมด	1600-1900	-CO ₂ H, CH ₃
	2036-2292	CH ₂ , CH ₃
pH	1558-2054	-CO ₂ H, CH ₃
	2194-2334	CH ₂ , CH ₃
ค่าสี L*	1100-1264	CH ₃ , CH
	1650-1814	Aromatic CH, CH ₃
ค่าสี a*	1100-1266	CH ₃ , CH
	1618-1824	Aromatic CH, CH ₃
ค่าสี b*	1100-1350	CH ₃ , CH
	1680-1770	Aromatic CH, CH ₃
ค่าสี C*	1116-1390	CH ₃ , CH
	2220-2334	CH ₂ , CH ₃
ค่าสี h	1100-1378	CH ₃ , CH
	1700-2050	CH ₂ , CH ₃ , Starch, -CO ₂ R

หมายเหตุ กลุ่มพันธะและโมเลกุลที่เกี่ยวข้องกับช่วงความยาวคลื่น อ้างอิงจาก Osborne *et al.* (1993)

2.4.2 การเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยวิธี SCMWPLSR

SCMWPLSR จะคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมจากช่วงความยาวคลื่นที่ได้จากวิธี MWPLSR (ข้อ 2.4.1) แล้วจึงนำไปวิเคราะห์สร้างสมการทำนาย ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี SCMWPLSR แสดงดังตารางที่ 19

ตารางที่ 19 ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR สำหรับการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่

ค่าคุณภาพ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	
	วิธี MWPLSR	วิธี SCMWPLSR
TSS	1322-1900, 2000-2350	1506-1618, 2234-2316
น้ำตาลรีดิวซ์	1518-2094, 2194-2454	1698-1746, 2194-2278
น้ำตาลทั้งหมด	1618-1818, 2000-2358	1708-1814, 2234-2316
กรดทั้งหมด	1600-1900, 2036-2292	1600-1752, 2160-2280
pH	1558-2054, 2194-2334	1786-1830
ค่าสี L*	1100-1264, 1650-1814	1184-1260
ค่าสี a*	1100-1266, 1618-1824	1100-1164
ค่าสี b*	1100-1350, 1680-1770	1240-1320, 1700-1764
ค่าสี C*	1116-1390, 2220-2334	1220-1324, 2260-2324
ค่าสี h	1100-1378, 1700-2050	1224-1316

2.4.3 การสร้างสมการทำนายโดยใช้การคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น

การสร้างสมการทำนายโดยใช้การคัดเลือกความยาวคลื่นทั้ง 2 วิธี (MWPLSR และ SCMWPLSR) ใช้ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด 4 ชุดข้อมูล ได้แก่ 1) ช่วงความยาวคลื่นที่หนึ่งที่คัดเลือกได้จากวิธี MWPLSR (ในข้อที่ 2.4.1) 2) ช่วงความยาวคลื่นที่สองที่คัดเลือกได้จากวิธี MWPLSR (ในข้อที่ 2.4.1) 3) ช่วงความยาวคลื่นที่นำช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกได้จากวิธี MWPLSR มารวมกันโดยตรง และ 4) ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกได้จากวิธี SCMWPLSR จากนั้นนำข้อมูลสเปกตรัมมาหาความสัมพันธ์กับค่าเคมีและกายภาพ (ที่ได้จากข้อ 2.1) โดยใช้วิธี PLSR ทำการแบ่งเป็นกลุ่ม Calibration จำนวน 126 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 54 ตัวอย่าง ค่าทาง

สถิติของสมการทำนายที่สร้างได้แสดงในตารางที่ 20 โดยค่าคุณภาพแต่ละค่าจะมีสมการทำนายทั้งหมด 5 สมการ คือ 4 สมการที่ได้จากวิธีการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น เปรียบเทียบกับ 1 สมการที่ได้จากการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR (จากข้อ 2.3)



ตารางที่ 20 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นแบบการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด ด้วยวิธี PLSR และแบบการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น ด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เพื่อทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง

ค่าคุณภาพ	วิธีทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	แฟลคเตอร์	R _{cal}	RMSEC	R _{val}	RMSEP	RPD
TSS (°Brix)	PLSR	1100-1918, 1996-2500	3	0.989	0.96	0.985	0.95	5.78
	MWPLSR ¹	1322-1900	3	0.987	1.06	0.980	1.10	5.04
	MWPLSR ²	2000-2350	3	0.963	1.77	0.956	1.64	3.43
	MWPLSR ³	1322-1900, 2000-2350	3	0.989	0.96	0.985	0.95	5.79
	SCMWPLSR	1506-1618, 2234-2316	3	0.992	0.82	0.988	0.85	6.58
น้ำตาลรีดิวซ์ (%w/w)	PLSR	1100-1918, 1996-2500	6	0.962	3.65	0.948	4.09	3.15
	MWPLSR ¹	1518-2094	6	0.953	4.05	0.914	5.20	2.46
	MWPLSR ²	2194-2454	5	0.956	3.89	0.939	4.46	2.90
	MWPLSR ³	1518-2094, 2194-2454	6	0.961	3.70	0.949	4.03	3.18
	SCMWPLSR	1698-1746, 2194-2278	5	0.959	3.76	0.948	4.13	3.13
น้ำตาลทั้งหมด (%w/w)	PLSR	1100-1918, 1996-2500	6	0.952	1.88	0.951	1.79	3.21
	MWPLSR ¹	1618-1818	6	0.951	1.89	0.938	2.10	2.75
	MWPLSR ²	2000-2358	4	0.944	2.01	0.941	1.95	2.95
	MWPLSR ³	1618-1818, 2000-2358	6	0.952	1.87	0.952	1.79	3.21
	SCMWPLSR	1708-1814, 2234-2316	6	0.956	1.79	0.956	1.73	3.32

ตารางที่ 20 (ต่อ)

ค่าคุณภาพ	วิธีทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	แฟลคเตอร์	R _{cal}	RMSEC	R _{val}	RMSEP	RPD
กรดทั้งหมด (%w/w)	PLSR	1100-1918, 1996-2500	9	0.936	0.09	0.917	0.09	2.51
	MWPLSR ¹	1600-1900	9	0.934	0.09	0.895	0.10	2.23
	MWPLSR ²	2036-2292	9	0.929	0.09	0.846	0.12	1.87
	MWPLSR³	1600-1900, 2036-2292	9	0.938	0.08	0.932	0.08	2.72
	SCMWPLSR	1600-1752, 2160-2280	7	0.923	0.09	0.859	0.12	1.95
pH	PLSR	1100-1918, 1996-2500	5	0.709	0.18	0.662	0.16	1.31
	MWPLSR ¹	1558-2054	7	0.692	0.18	0.697	0.16	1.37
	MWPLSR ²	2194-2334	5	0.673	0.18	0.661	0.16	1.32
	MWPLSR³	1558-2054, 2194-2334	4	0.692	0.18	0.689	0.16	1.37
	SCMWPLSR	1786-1830	4	0.765	0.16	0.604	0.19	1.16
ค่าสี L*	PLSR	1100-1918, 1996-2500	6	0.518	4.14	0.442	3.88	1.09
	MWPLSR ¹	1100-1264	6	0.507	4.18	0.326	4.12	1.03
	MWPLSR ²	1650-1814	6	0.387	4.47	0.295	4.14	1.03
	MWPLSR³	1100-1264, 1650-1814	6	0.514	4.16	0.489	3.82	1.14
	SCMWPLSR	1184-1260	5	0.647	3.69	0.376	4.14	1.02

ตารางที่ 20 (ต่อ)

ค่าคุณภาพ	วิธีทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	แฟกเตอร์	R _{cal}	RMSEC	R _{val}	RMSEP	RPD
ค่าสี a*	PLSR	1100-1918, 1996-2500	9	0.610	2.26	0.315	2.71	1.00
	MWPLSR ¹	1100-1266	9	0.729	1.95	0.230	3.20	0.85
	MWPLSR ²	1618-1824	9	0.601	2.28	0.233	2.92	0.69
	MWPLSR³	1100-1266, 1618-1824	9	0.502	2.47	0.486	2.39	1.13
	SCMWPLSR	1100-1164	5	0.520	2.44	0.221	2.80	0.96
ค่าสี b*	PLSR	1100-1918, 1996-2500	10	0.756	4.54	0.221	7.36	0.86
	MWPLSR¹	1100-1350	7	0.566	5.72	0.381	6.10	1.04
	MWPLSR ²	1680-1770	7	0.453	6.18	0.233	6.18	1.00
	MWPLSR ³	1100-1350, 1680-1770	7	0.541	5.83	0.347	6.29	1.01
	SCMWPLSR	1240-1320, 1700-1764	6	0.542	5.83	0.284	6.56	0.96
ค่าสี C*	PLSR	1100-1918, 1996-2500	10	0.801	3.37	0.433	5.05	1.04
	MWPLSR¹	1116-1390	8	0.600	4.50	0.571	4.30	1.22
	MWPLSR ²	2220-2334	7	0.733	3.83	0.257	5.73	0.91
	MWPLSR ³	1116-1390, 2220-2334	8	0.709	3.97	0.462	4.79	1.09
	SCMWPLSR	1220-1324, 2260-2324	7	0.710	3.96	0.344	5.23	1.01

ตารางที่ 20 (ต่อ)

ค่าคุณภาพ	วิธีทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	แฟคเตอร์	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
ค่าสี h (°)	PLSR	1100-1918, 1996-2500	9	0.664	3.26	0.438	3.25	1.11
	MWPLSR ¹	1100-1378	7	0.457	3.87	0.263	3.51	1.02
	MWPLSR ²	1700-2050	8	0.502	3.77	0.439	3.25	1.11
	MWPLSR³	1100-1378,1700-2050	8	0.537	3.68	0.459	3.21	1.12
	SCMWPLSR	1224-1316	5	0.644	3.33	0.215	3.97	0.94

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ วิธีการสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมที่สุด

แฟคเตอร์ คือ จำนวนกลุ่มตัวแปรใหม่ที่ใช้ในการสร้างสมการ

R_{val} คือ Correlation coefficient of validation

RMSEP คือ Root mean square error prediction of validation

RPD คือ Ratio of standard error of prediction to standard deviation

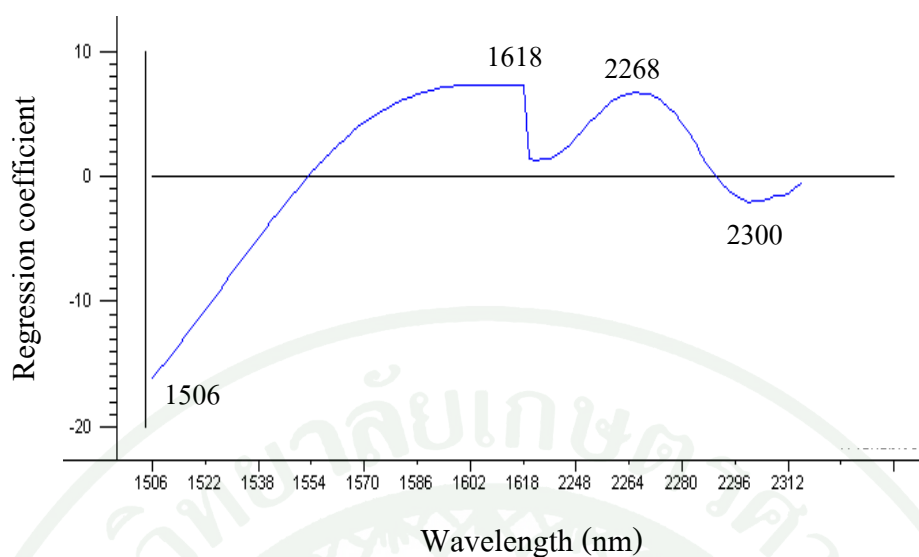
¹ คือ วิธี MWPLSR ที่ใช้คัดเลือกช่วงความยาวคลื่นที่หนึ่ง

² คือ วิธี MWPLSR ที่ใช้คัดเลือกช่วงความยาวคลื่นที่สอง

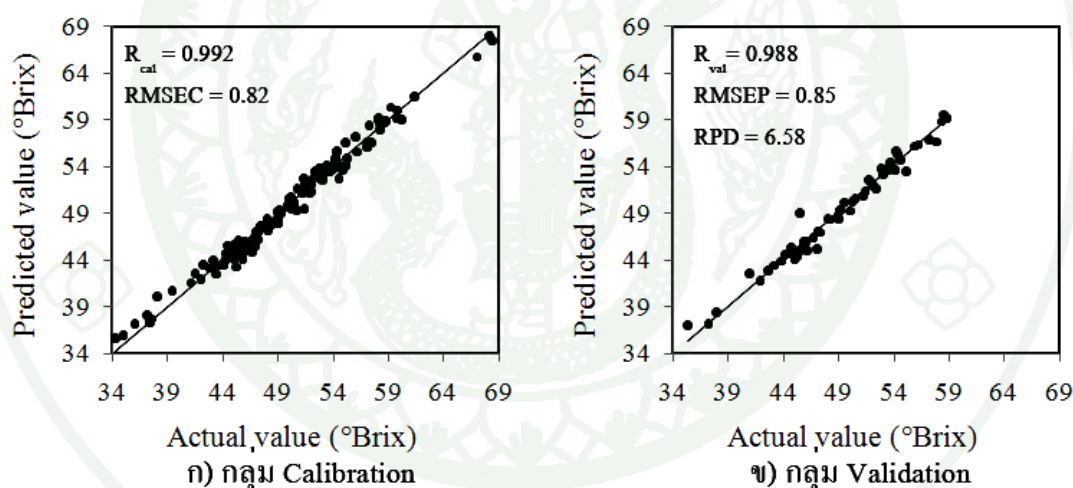
³ คือ วิธี MWPLSR ที่นำช่วงความยาวคลื่นที่หนึ่งและสองมารวมกันโดยตรง

สมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ถูกสร้างขึ้นด้วยวิธีการสร้างสมการหลายวิธีแตกต่างกัน เพื่อให้ได้สมการทำนายที่ดีที่สุด โดยสมการทำนายที่ดีควรมีค่า R และ RPD สูง และ RMSEP ต่ำ ความสามารถในการนำสมการไปประยุกต์ใช้งานพิจารณาได้จากค่า R โดยถ้ามีค่า R อยู่ในช่วง 0.81-0.90 คือสามารถใช้ในการคัดเลือกรูปภาพได้ ถ้าค่า R เท่ากับหรือมากกว่า 0.91 ขึ้นไป ก็สามารถใช้ในการควบคุมคุณภาพ หรืองานวิจัยได้ (William, 2007) ข้อมูลจากตารางที่ 20 สามารถสรุปความสามารถในการสร้างสมการทำนายค่าเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่างได้ดังต่อไปนี้

ก. สมการทำนายปริมาณ TSS พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี SCMWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1506-1618 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณ TSS โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแทนใหม่ได้ 3 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.992 และ 0.82°Brix ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การถดถอย (Regression coefficient) ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1506-1618 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 23 พบว่าที่ความยาวคลื่น ตำแหน่ง 1506, 1618, 2268 และ 2300 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณ TSS เนื่องจากมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ $=CH_2$ และ CH_2 ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Roggo *et al.* (2004) ที่ได้ทำการวัดค่า TSS ในอ้อย รายงานไว้ว่าช่วงความยาวคลื่น 1444-1756 นาโนเมตร และ 2084-2476 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ CH_2 ดังนั้นสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี SCMWPLSR ในช่วงความยาวคลื่นนี้ จะครอบคลุมข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.988, 0.85°Brix และ 6.58 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 24 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้งานควบคุมคุณภาพได้



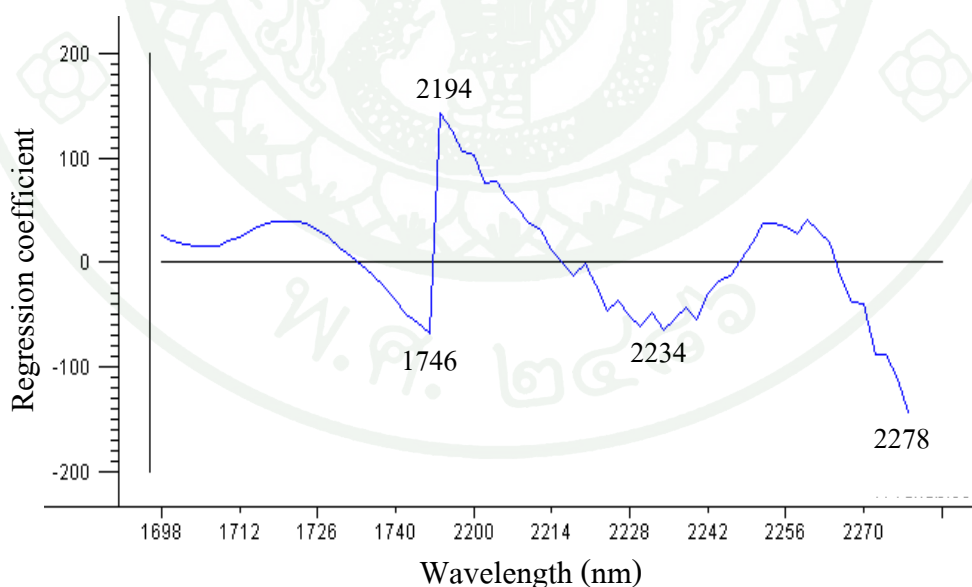
ภาพที่ 23 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1506-1618 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโนเมตร ด้วยวิธี SCMWPLSR



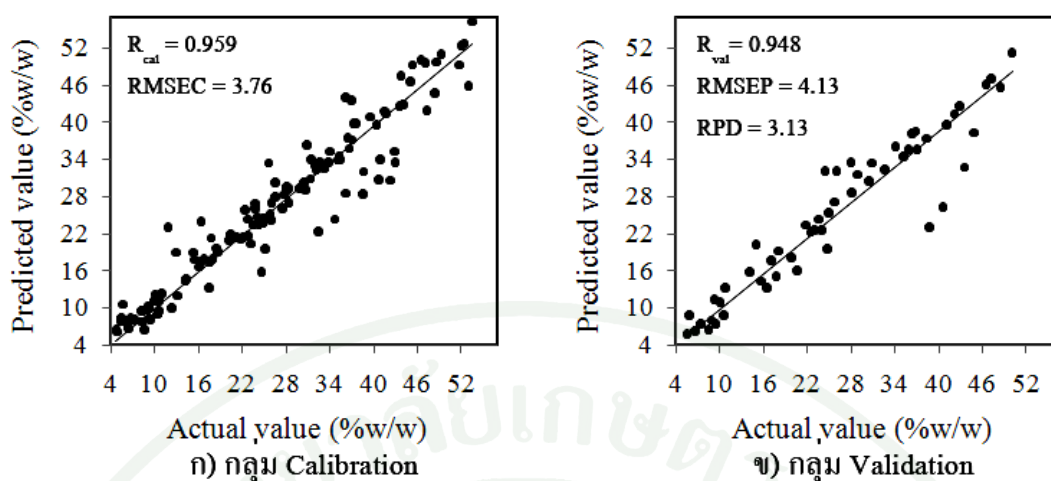
ภาพที่ 24 ค่าปริมาณ TSS ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ SCMWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ข. สมการทำนายปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี SCMWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1698-1746 นาโนเมตร และ 2194-2278 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ แม้ว่าการเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้น (ตารางที่ 20) วิธี MWPLSR จะให้สมการทำนายที่ดีกว่า แต่วิธี SCMWPLSR ใช้จำนวนแฟลคเตอร์ในการสร้างสมการน้อยสุด และมีการกำจัดความยาวคลื่นที่ไม่

เกี่ยวข้องออกไปมากกว่า ซึ่งการสร้างสมการที่ดีควรใช้จำนวนตัวแปรน้อย เพื่อป้องกันไม่ให้เกิดการสะสมความคลาดเคลื่อนที่อาจเกิดขึ้น ดังนั้นจึงเลือกวิธี SCMWPLSR เป็นวิธีการสร้างสมการที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 5 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.959 และ 3.76%w/w ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1698-1746 นาโนเมตร และ 2194-2278 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 25 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1746, 2194, 2234 และ 2278 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ เนื่องจากมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH_2 , CH_3 และ $HC=CH$ ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Rambla *et al.* (1997) ที่ได้ทำการวัดค่าปริมาณกลูโคสและฟรุคโตสในน้ำผลไม้ รายงานไว้ว่าความยาวคลื่นที่ 1583, 2123 และ 2271 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับหมู่พันธะ CH_2 และ CH_3 นอกจากนี้ Kasemsumran *et al.* (2003) ยังรายงานว่าช่วงความคลื่น 2036-2323 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับการวัดค่าปริมาณกลูโคสในสารละลายฟอสเฟตบัฟเฟอร์ ดังนั้นสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี SCMWPLSR ในช่วงความยาวคลื่นนี้ จะครอบคลุมข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ของน้ำจิ้มไก่ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.948, 4.13%w/w และ 3.13 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 26 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ในงานควบคุมคุณภาพได้

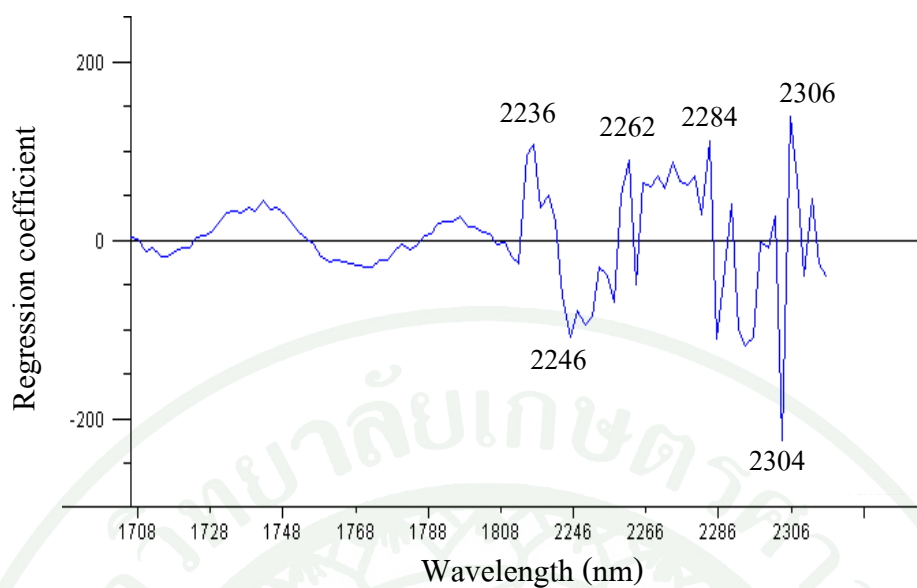


ภาพที่ 25 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1698-1746 นาโนเมตร และ 2194-2278 นาโนเมตร ด้วยวิธี SCMWPLSR

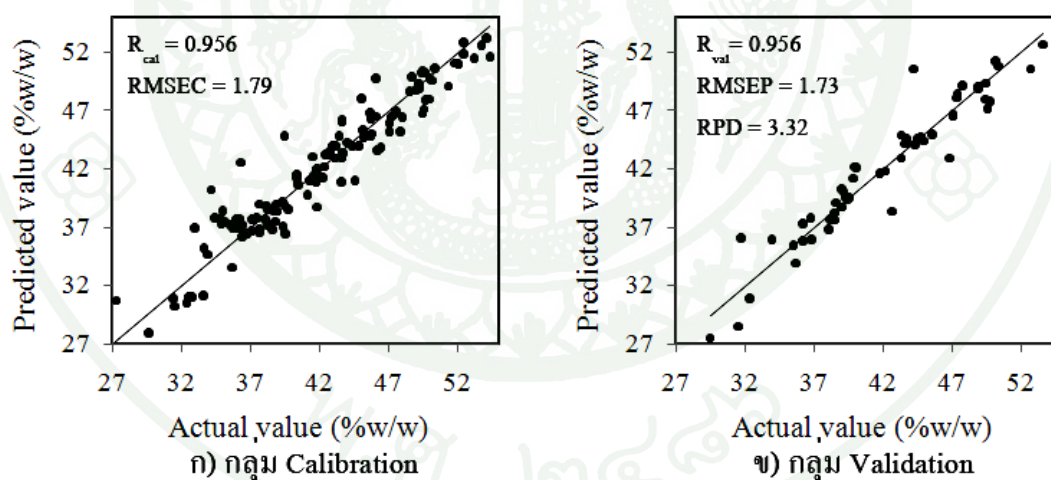


ภาพที่ 26 ค่าปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ SCMWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ค. สมการทำนายปริมาณน้ำตาลทั้งหมด พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี SCMWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1708-1814 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณน้ำตาลทั้งหมด โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 6 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.956 และ 1.79%w/w ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1708-1814 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 27 พบว่าที่ความยาวคลื่น ตำแหน่ง 2236, 2246, 2262, 2284, 2304 และ 2306 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณน้ำตาล เนื่องจากมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH_2 และ CH_3 ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Rambla *et al.* (1997) ที่ได้ทำการวัดค่าปริมาณน้ำตาลทั้งหมดในน้ำผลไม้ รายงานไว้ว่าช่วงความยาวคลื่น 1325-1800 นาโนเมตร และ 2020-2390 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับน้ำตาล ดังนั้นสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี SCMWPLSR ในช่วงความยาวคลื่นนี้ จะครอบคลุมข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับปริมาณน้ำตาลทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสม ให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.956, 1.73%w/w และ 3.32 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 28 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ในงานควบคุมคุณภาพได้

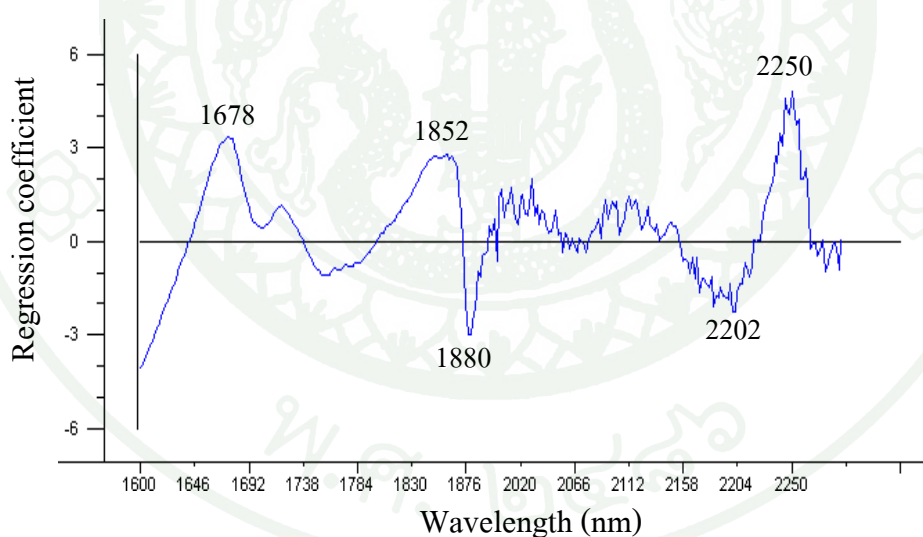


ภาพที่ 27 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณน้ำตาลทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1708-1814 นาโนเมตร และ 2234-2316 นาโนเมตร ด้วยวิธี SCMWPLSR

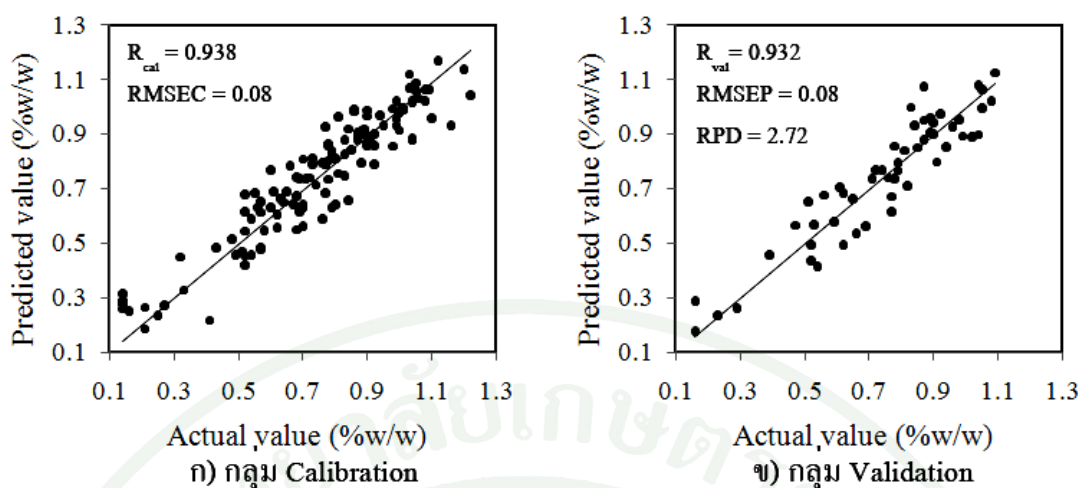


ภาพที่ 28 ค่าปริมาณน้ำตาลทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ SCMWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ง. สมการทำนายปริมาณกรดทั้งหมด พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1600-1900 นาโนเมตร และ 2036-2292 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณกรดทั้งหมด โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแทนใหม่ได้ 9 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.938 และ 0.08%w/w ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1600-1900 นาโนเมตร และ 2036-2292 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 29 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1678, 1852, 1880, 2202 และ 2250 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณกรดทั้งหมด เนื่องจากมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ $-CO_2H$ ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Yano *et al.* (1997) ที่ได้ทำการวัดปริมาณกรดอะซิติกในน้ำส้มสายชู รายงานไว้ว่าช่วงความยาวคลื่น 1674-1718 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ $-CO_2H$ ดังนั้นสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR ในช่วงความยาวคลื่นนี้จะครอบคลุมข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับปริมาณกรดทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.932, 0.08%w/w และ 2.72 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 30 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ในงานควบคุมคุณภาพได้

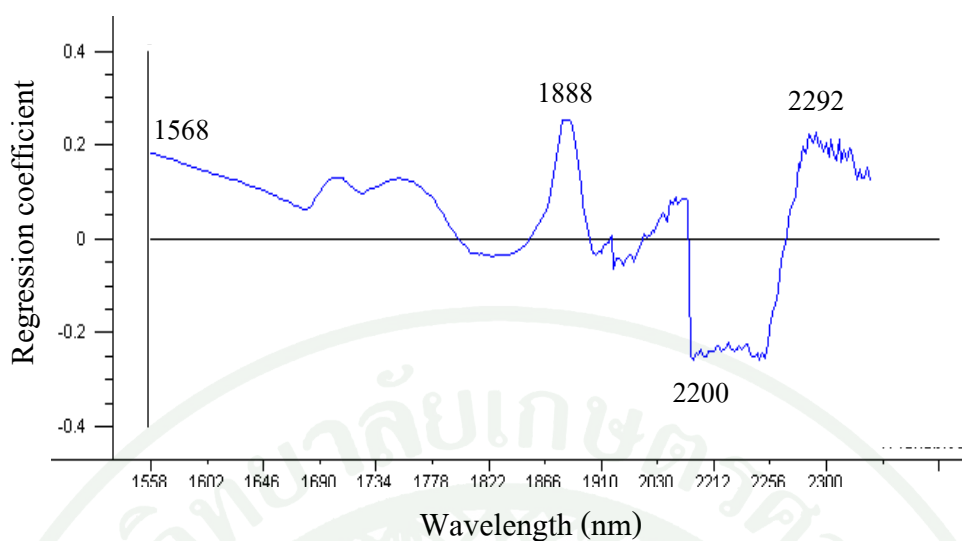


ภาพที่ 29 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณกรดทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1600-1900 นาโนเมตร และ 2036-2292 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR

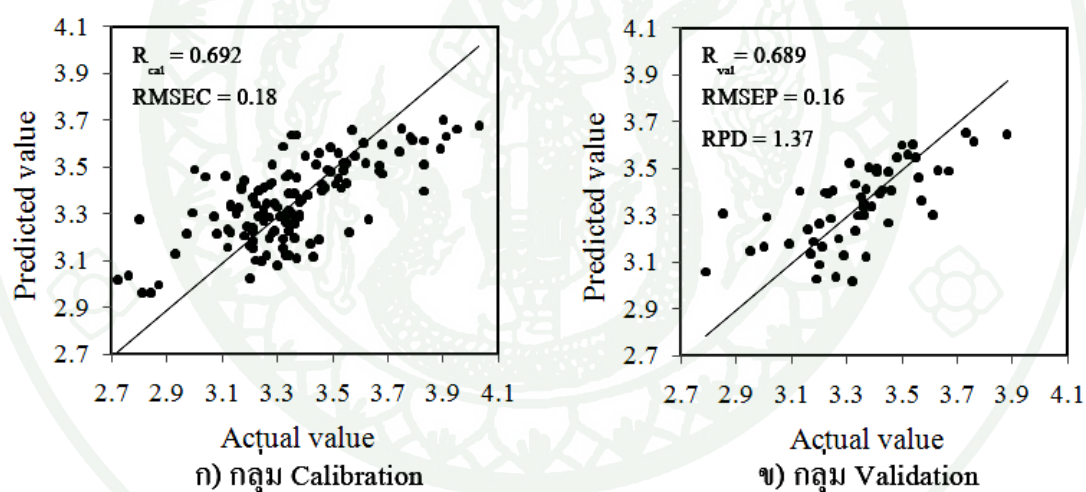


ภาพที่ 30 ค่าปริมาณกรดทั้งหมดของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

จ. สมการทำนายค่า pH พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1558-2054 นาโนเมตร และ 2194-2334 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่า pH โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 4 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.692 และ 0.18 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1558-2054 นาโนเมตร และ 2194-2334 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 31 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1568, 1888, 2200 และ 2292 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่า pH เนื่องจากมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ $-CO_2H$ และ CH_3 ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Ritthiruangdej (2006) ที่ได้ทำการวัดค่า pH ในน้ำปลา รายงานไว้ว่าช่วงความยาวคลื่น 1564-1708 นาโนเมตร และ 2200-2300 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ $-CO_2H$ และ CH_3 เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.689, 0.16 และ 1.37 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 32 พบว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพต่ำในการทำนายค่า pH ของน้ำจิ้มไก่ อาจเนื่องจาก pH เป็นสสารอนุภาคเล็กมากทำให้มีความสัมพันธ์กับค่าการดูดกลืนแสงต่ำ และค่า pH ของน้ำจิ้มไก่ที่นำมาใช้สร้างสมการมีช่วงข้อมูลแคบ (2.7-4.0) อย่างไรก็ตามมีงานวิจัยที่สามารถสร้างสมการทำนายค่า pH ได้แม่นยำ คือ Terhoeven-Urselmans *et al.* (2008) ที่สร้างสมการทำนายค่า pH ในดิน และ Ritthiruangdej (2006) ที่สร้างสมการทำนายค่า pH ในน้ำปลา มีช่วงข้อมูล pH ที่ใช้สร้างสมการเท่ากับ 5.1-7.3 และ 4.1-5.9 ตามลำดับ



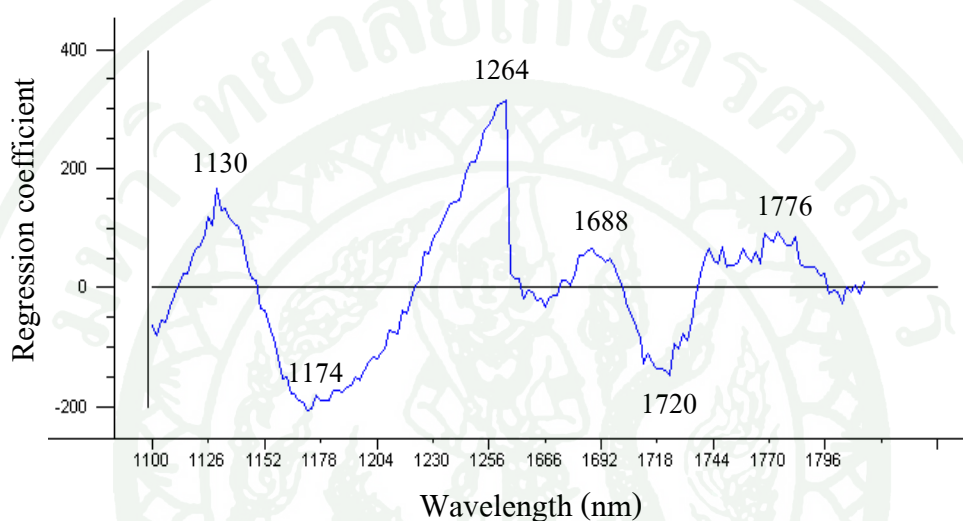
ภาพที่ 31 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่า pH ของน้ำจิ้มไก่ ในช่วงความยาวคลื่น 1558-2054 นาโนเมตร และ 2194-2334 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



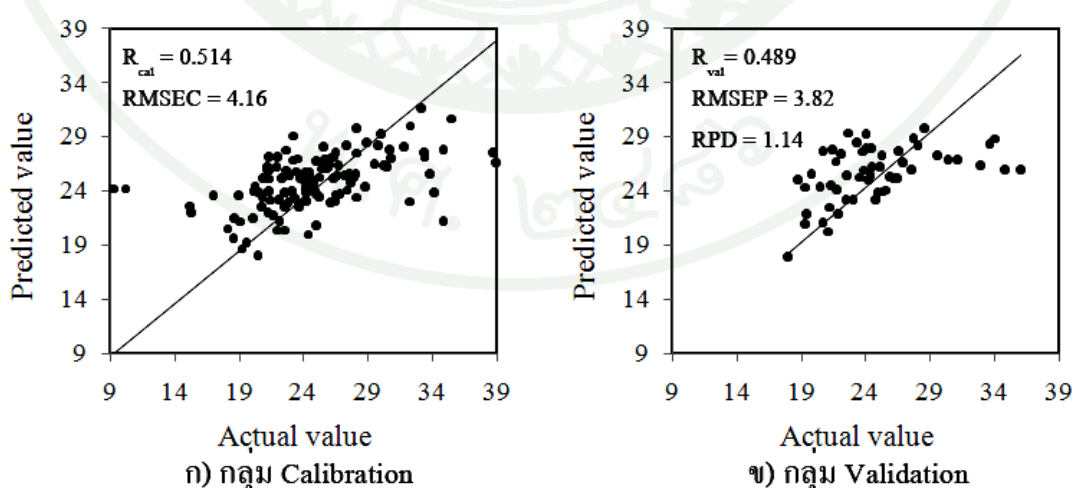
ภาพที่ 32 ค่า pH ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

จ. สมการทำนายค่าสี L^* พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1100-1264 นาโนเมตร และ 1650-1814 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าสี L^* โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 6 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.514 และ 4.16 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-1264 นาโนเมตร และ 1650-1814

นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 33 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1130, 1174, 1264, 1688, 1720 และ 1776 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ HC=CH และ CH₂ ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Prieto *et al.* (2008) ที่ได้ทำการวัดค่าสี L* ในเนื้อวัว รายงานไว้ว่าช่วงความยาวคลื่น 1230-1400 นาโนเมตร และ 1600-1710 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ CH₂ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val}, RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.489, 3.82 และ 1.14 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 34

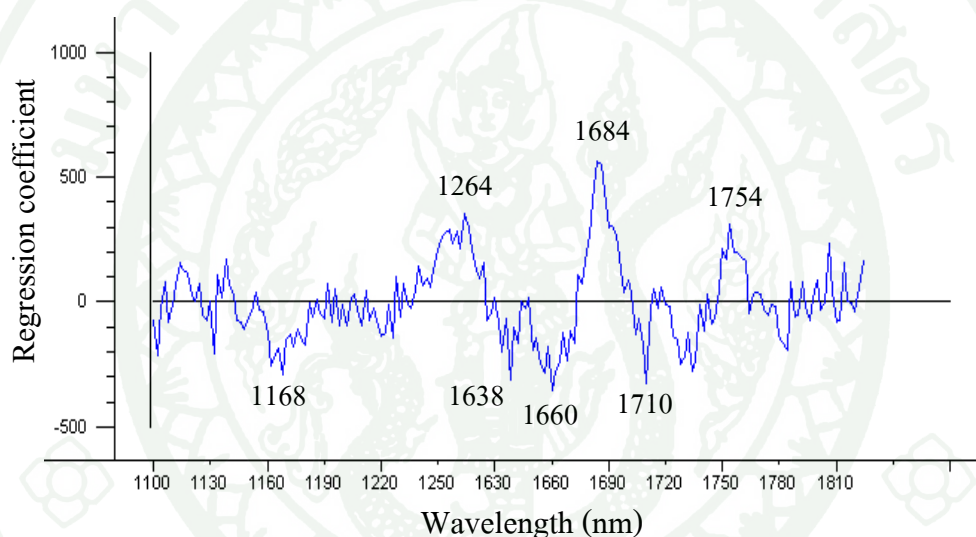


ภาพที่ 33 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี L* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1264 นาโนเมตร และ 1650-1814 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR

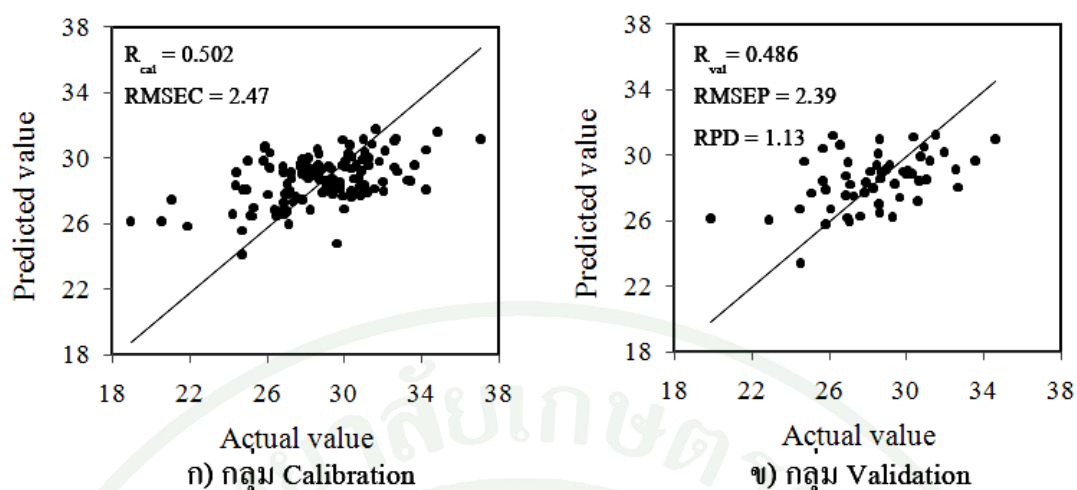


ภาพที่ 34 ค่าสี L* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ข. สมการทำนายค่าสี a^* พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1100-1266 นาโนเมตร และ 1618-1824 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าสี a^* โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 9 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.502 และ 2.47 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-1266 นาโนเมตร และ 1618-1824 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 35 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1168, 1264, 1638, 1660, 1684, 1710 และ 1754 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ CH , CH_2 และ CH_3 เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.486, 2.39 และ 1.13 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 36



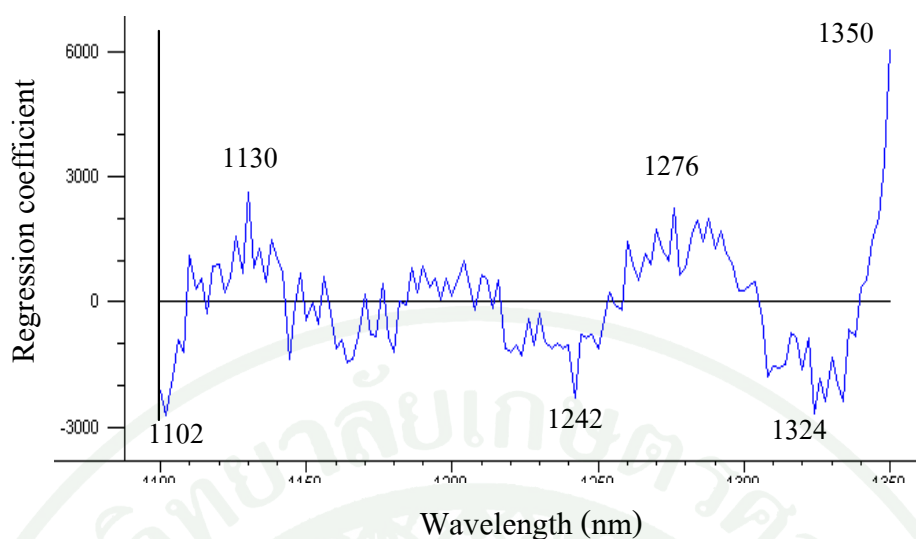
ภาพที่ 35 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี a^* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1266 นาโนเมตร และ 1618-1824 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



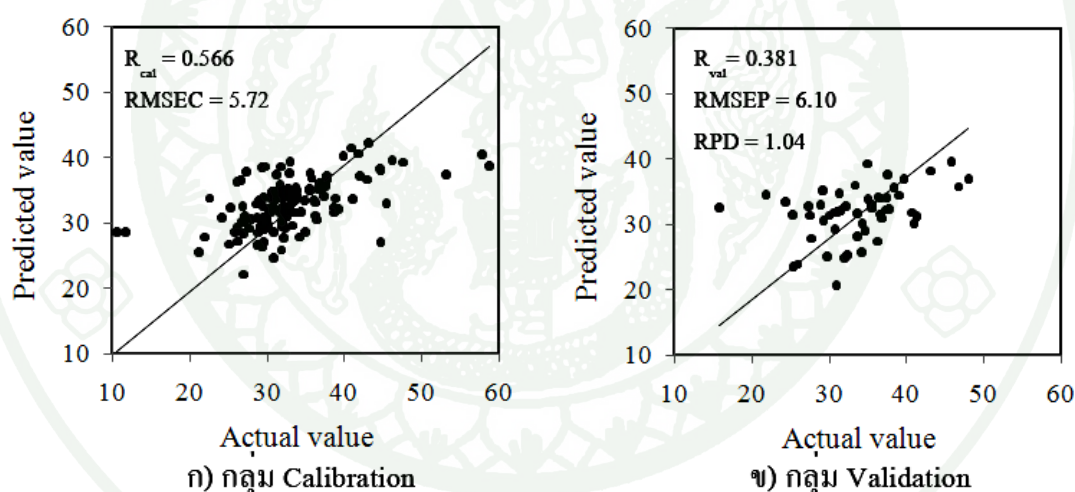
ภาพที่ 36 ค่า a^* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value)

จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ข. สมการทำนายค่า b^* พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1100-1350 นาโนเมตรให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่า b^* โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 7 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.566 และ 5.72 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-1350 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 37 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1102, 1130, 1242, 1276, 1324 และ 1350 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ CH และ CH_3 ซึ่งสอดคล้องกับงานวิจัยของ Prieto *et al.* (2008) ที่ได้ทำการวัดค่า b^* ในเนื้อวัว รายงานไว้ว่าช่วงความยาวคลื่น 1230-1400 นาโนเมตร และ 1600-1710 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ CH เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.381, 6.10 และ 1.04 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 38



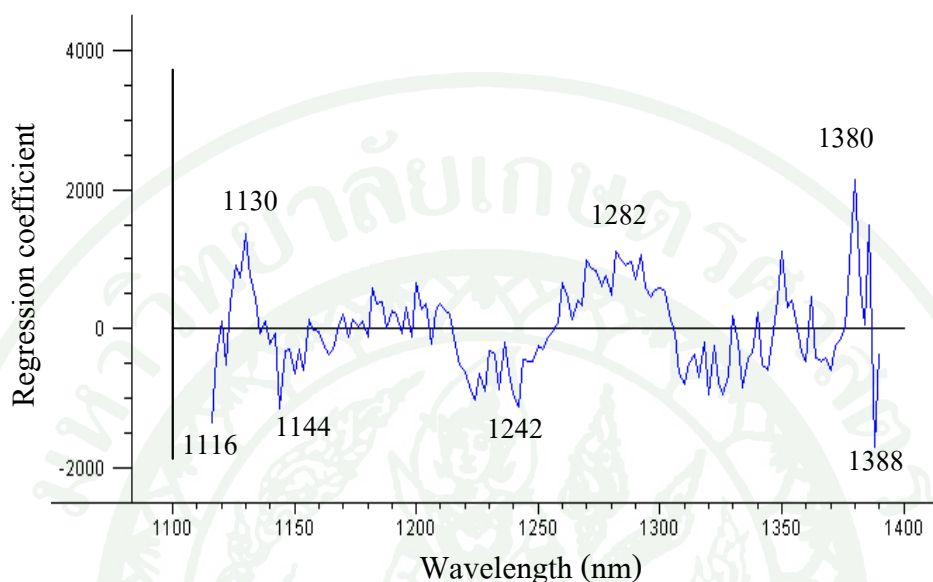
ภาพที่ 37 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี b^* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1350 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



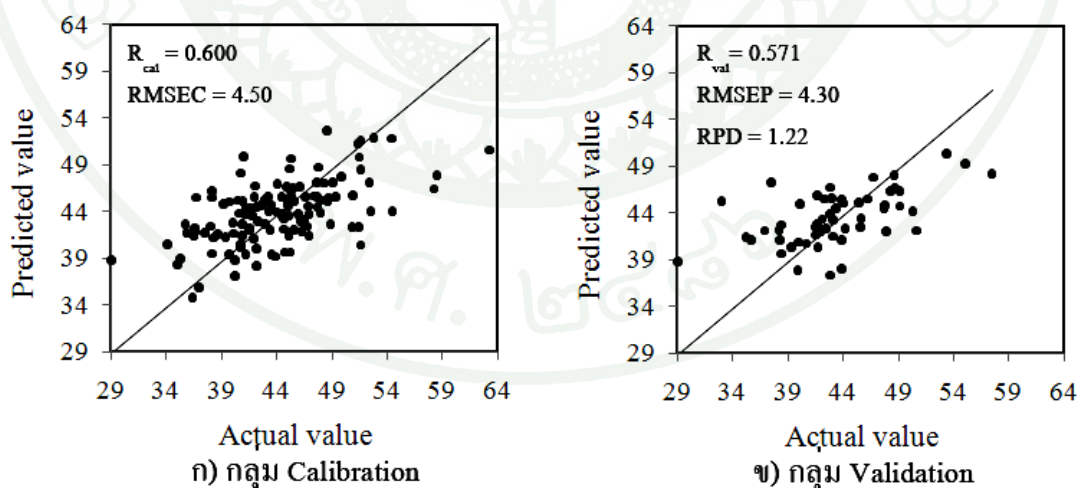
ภาพที่ 38 ค่าสี b^* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ฉ. สมการทำนายค่าสี C^* พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1116-1390 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าสี C^* โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.600 และ 4.50 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1116-1390 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 39 พบว่าที่ความยาวคลื่น

ตำแหน่ง 1116, 1130, 1144, 1242, 1282, 1380 และ 1388 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ CH_2 และ CH_3 เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.571, 4.30 และ 1.22 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 40

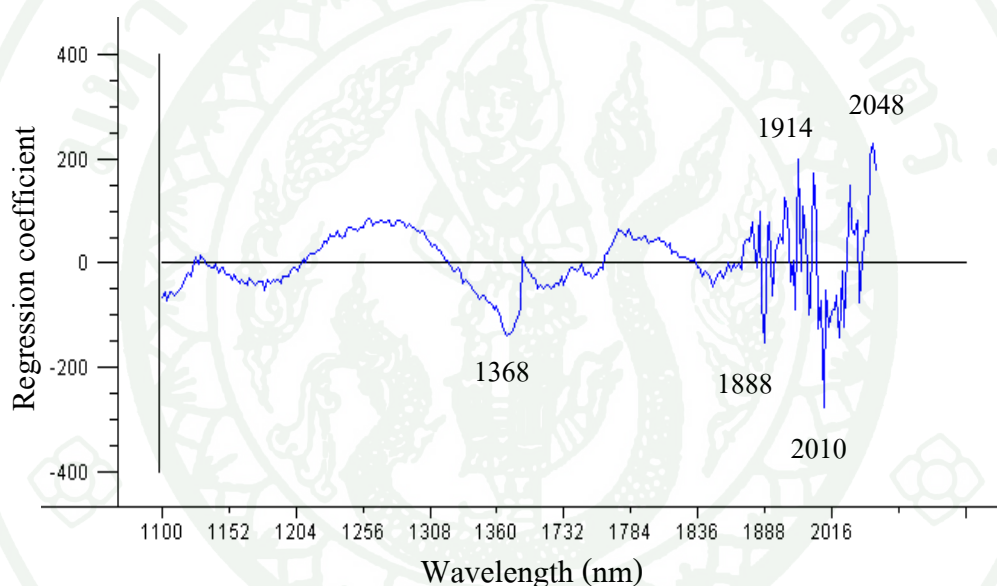


ภาพที่ 39 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี C^* ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1116-1390 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR

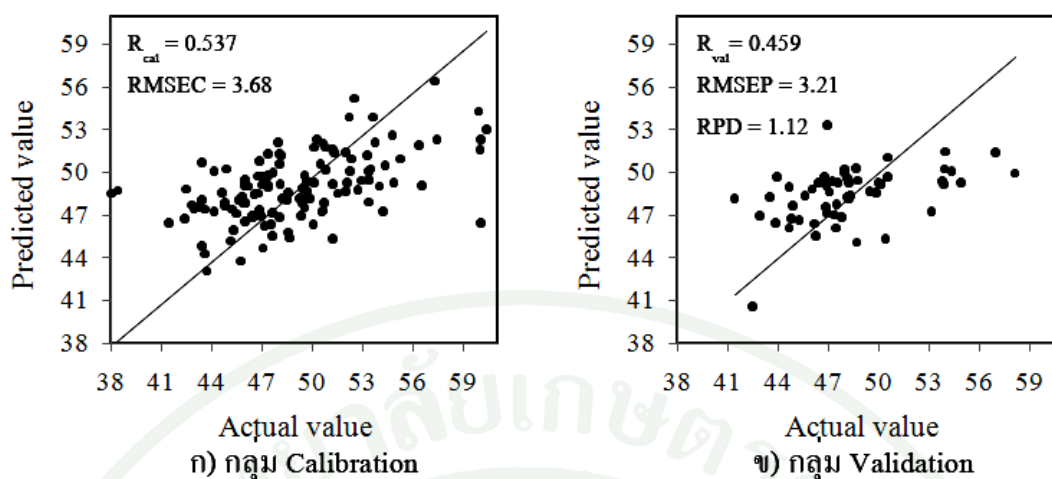


ภาพที่ 40 ค่าสี C^* ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ญ. สมการทำนายค่าสี h พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1100-1378 นาโนเมตร และ 1700-2050 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าสี h โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแทนใหม่ได้ 8 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.537 และ 3.68° ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1100-1378 นาโนเมตร และ 1700-2050 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 41 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1368, 1888, 1914, 2010 และ 2048 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับพันธะ CH_3 , $CONH$ และ $CONH_2$ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.459, 3.21° และ 1.12 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 20 และภาพที่ 42



ภาพที่ 41 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าสี h ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1378 นาโนเมตร และ 1700-2050 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



ภาพที่ 42 ค่าสี h ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

สมการทำนายค่าสี L^* , a^* , b^* , C^* และ h ของน้ำจิ้มไก่ที่สร้างขึ้น มีประสิทธิภาพในการทำนายค่า เนื่องจากช่วงความยาวคลื่น NIR ที่ใช้งานวิจัยนี้ (1100-2500 นาโนเมตร) มีความสัมพันธ์ไม่เพียงพอกับค่าสี เช่นเดียวกับงานวิจัยหลายเรื่อง ดังเช่น Abeni and Bergoglio (2001) ที่วัดค่าสีในเนื้อส่วนอกของไก่กระทุง และ Savenije *et al.* (2006) วัดค่าสีในเนื้อหมู เป็นต้น อย่างไรก็ตามมีงานวิจัยที่สามารถสร้างสมการทำนายค่าสีได้แม่นยำ คือ Lucas *et al.* (2008) สร้างสมการทำนายค่า L^* , a^* และ b^* ในชีส และ Clément (2008) สร้างสมการทำนายค่า L^* , a^* และ b^* ในมะเขือเทศ ที่ใช้แสงที่ตามองเห็น (Visible light) เข้าร่วม โดยทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงในช่วง 400-2500 นาโนเมตร และ 400-1000 นาโนเมตร ตามลำดับ

การเปรียบเทียบประสิทธิภาพของสมการทำนายที่สร้างขึ้นโดยวิธีคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น เทียบกับวิธีใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด จากข้อมูลทางสถิติที่ได้ในตารางที่ 20 พบว่า วิธี MWPLSR ที่นำช่วงความยาวคลื่นที่หนึ่งและสองมารวมกันโดยตรง และวิธี SCMWPLSR ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากกว่าการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR เนื่องจากสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR มีจำนวนตัวแปรอิสระหรือความยาวคลื่นที่เกี่ยวข้องกับค่าเคมีและกายภาพมากกว่า ทำให้สมการที่ได้มีความแม่นยำมากขึ้น

3. การสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่

การสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ แบ่งการศึกษาออกเป็น 2 ส่วน ได้แก่ การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า Scoville heat units (SHU) และการสร้างสมการทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัส

3.1 การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่

การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่จำนวน 100 ตัวอย่าง มีขั้นตอนการศึกษาทั้งหมด 4 ขั้นตอน เริ่มจากการวัดค่าแคปไซซินและคำนวณค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ (ข้อ 3.1.1) กำหนดเป็นตัวแปรตาม และวัดค่าการดูดกลืนแสง (ข้อ 3.1.2) กำหนดเป็นตัวแปรอิสระ โดยการสร้างสมการทำนาย มีทั้งการใช้ข้อมูลสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่นและการใช้สเปกตรัมบางช่วง จึงต้องมีการคัดเลือกสเปกตรัมที่เหมาะสมด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR (ข้อ 3.1.3) จากนั้นจึงนำข้อมูลค่าแคปไซซินและ SHU กับข้อมูลสเปกตรัม มาใช้สร้างสมการทำนาย (ข้อ 3.1.4) การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมแบ่งออกเป็น 3 วิธี คือ PLSR MWPLSR และ SCMWPLSR เปรียบเทียบกันเพื่อให้ได้สมการทำนายที่ดีที่สุด

3.1.1 ค่าแคปไซซินและ SHU

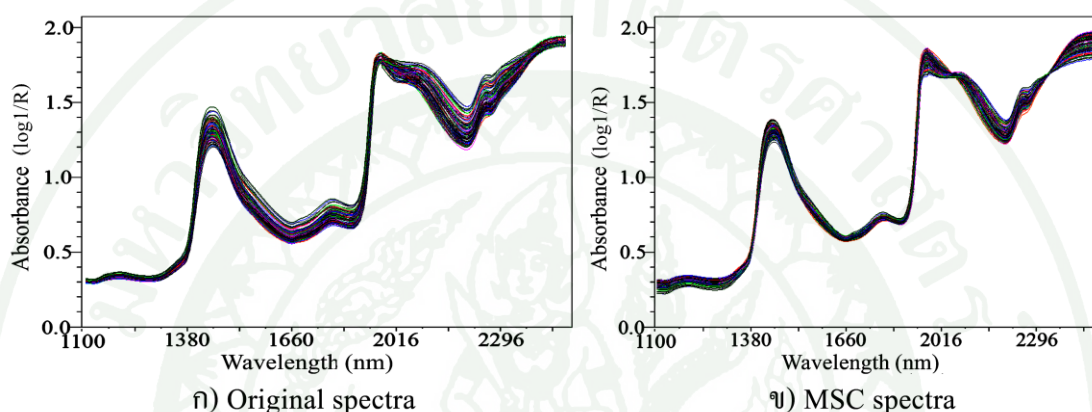
ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่างถูกนำมาแบ่งเป็นกลุ่ม Calibration และ Validation ในอัตราส่วน 70% ต่อ 30% แล้ววิเคราะห์ตัวอย่างด้วยวิธีมาตรฐาน โดยวัดปริมาณแคปไซซินและคำนวณค่า SHU (วิธีคำนวณแสดงดังภาคผนวกที่ ก4) ผลค่าสถิติเบื้องต้นดังแสดงในตารางที่ 21

ตารางที่ 21 ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของปริมาณแคปไซซินและค่า SHU (ได้จากการคำนวณ) ของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง

คุณลักษณะ	กลุ่ม Calibration (70 ตัวอย่าง)			กลุ่ม Validation (30 ตัวอย่าง)		
	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล
แคปไซซิน (mg/kg)	14.08	10.09	3.97-44.92	17.66	9.34	5.37-34.56
SHU	817.27	565.20	194.00-2642.00	933.73	589.11	274.00-2350.00

3.1.2 ค่าการดูดกลืนแสง

ค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง วัดในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 43 สำหรับการสร้างสมการจะทำการตัดช่วงความยาวคลื่น 1920-1994 นาโนเมตรออก เพื่อลดปัญหาจากการเลื่อนตัวของสเปกตรัมหรือยอดของสเปกตรัมมีลักษณะหัวแตก และทำการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ด้วยวิธี MSC



ภาพที่ 43 สเปกตรัมเริ่มต้นและสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งข้อมูลด้วยวิธี MSC ของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง

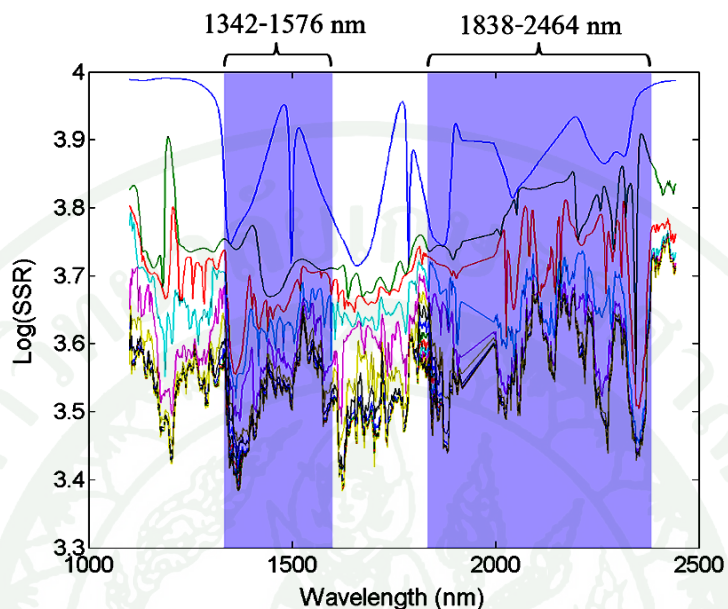
3.1.3 การคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น

การเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมก่อนนำไปสร้างสมการทำนาย เพื่อให้สมการทำนายความเผ็ดทางเคมีของน้ำจิ้มไก่มีประสิทธิภาพเพิ่มขึ้น วิธีการคัดเลือกความยาวคลื่นที่ใช้มี 2 วิธี ได้แก่ MWPLSR และ SCMWPLSR

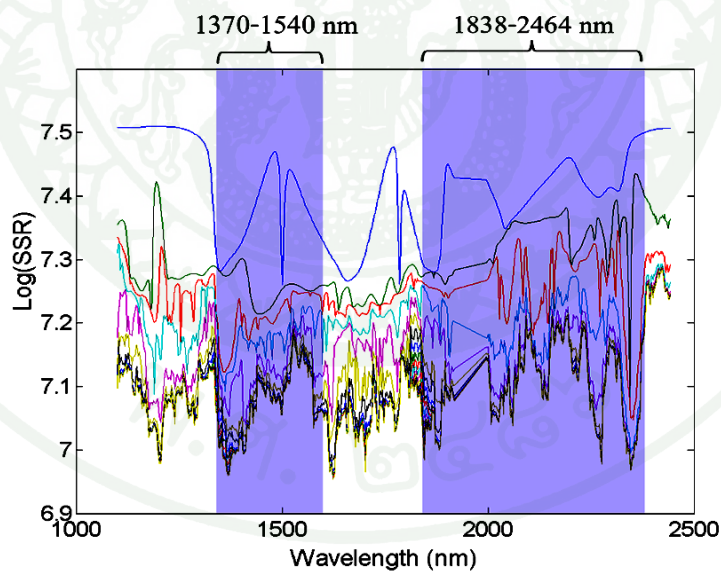
ก. การเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยวิธี MWPLSR

นำข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC มาคัดเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสม ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร โดยวิธี MWPLSR จะคำนวณค่าความผิดพลาดระหว่างค่าจริงและค่าทำนายในรูปของ Log(SSR) ทำการพิจารณาเลือกช่วงสเปกตรัมที่มีความสัมพันธ์กับค่าแคปไซซิน และ SHU โดยเลือกช่วงกราฟที่มีค่า

Log(SSR) ต่ำ เพื่อนำมาสร้างสมการทำนาย สำหรับการสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR แสดงดังภาพที่ 44



ก) ปริมาณแคปไซซิน



ข) ค่า SHU

ภาพที่ 44 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่แรเงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ ก) ปริมาณแคปไซซิน ข) ค่า SHU

การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU จะเลือกช่วงความยาวคลื่นที่ให้ค่า Log(SSR) ต่ำ และนำไปวิเคราะห์สร้างสมการทำนายด้วยวิธี PLSR ซึ่งจากภาพที่ 44 ทั้งสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU จะเลือกช่วงความยาวคลื่นใกล้เคียงกัน โดยเลือกช่วง 1342-1576 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร สำหรับการสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซิน และเลือกช่วง 1370-1540 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร สำหรับการสร้างสมการทำนายค่า SHU ตามลำดับ โดยช่วงความยาวคลื่นแรกมีความเกี่ยวข้องกับหมู่พันธะ CH_2 , CH_3 , CH และ OH และช่วงความยาวคลื่นสองมีความเกี่ยวข้องกับหมู่พันธะ CH_2 , CH_3 (Osborne *et al.*, 1993)

ข. การเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยวิธี SCMWPLSR

นำข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการคัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR (ข้อ 3.1.3ก) มาคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมด้วยวิธี SCMWPLSR แล้วจึงนำข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ไปวิเคราะห์สร้างสมการทำนาย ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี SCMWPLSR แสดงดังตารางที่ 22

ตารางที่ 22 ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR สำหรับการสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่

ค่าคุณภาพ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	
	วิธี MWPLSR	วิธี SCMWPLSR
แคปไซซิน	1342-1576, 1838-2464	1362-1378, 2306-2434
SHU	1370-1540, 1838-2464	1398-1426, 2094-2370

3.1.4 การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสม

การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ ใช้วิธีการสร้างสมการ 3 วิธี ได้แก่ การใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR การคัดเลือกความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และการคัดเลือกความยาวคลื่นด้วยวิธี SCMWPLSR โดยนำข้อมูลค่าปริมาณแคปไซซินและค่า SHU (จากข้อ 3.1.1) มาหาความสัมพันธ์กับข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC (จากข้อ 3.1.2) ทำการแบ่งตัวอย่างโดยการสุ่มเป็นกลุ่ม Calibration จำนวน 70 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 30 ตัวอย่าง ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างได้แสดงใน

ตารางที่ 23 โดยแต่ละค่าจะมีสมการทำนายทั้งหมด 5 สมการ คือ 1 สมการที่ได้จากการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR กับ 4 สมการที่ได้จากวิธีการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น ทำการเปรียบเทียบกันเพื่อให้ได้สมการทำนายที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่



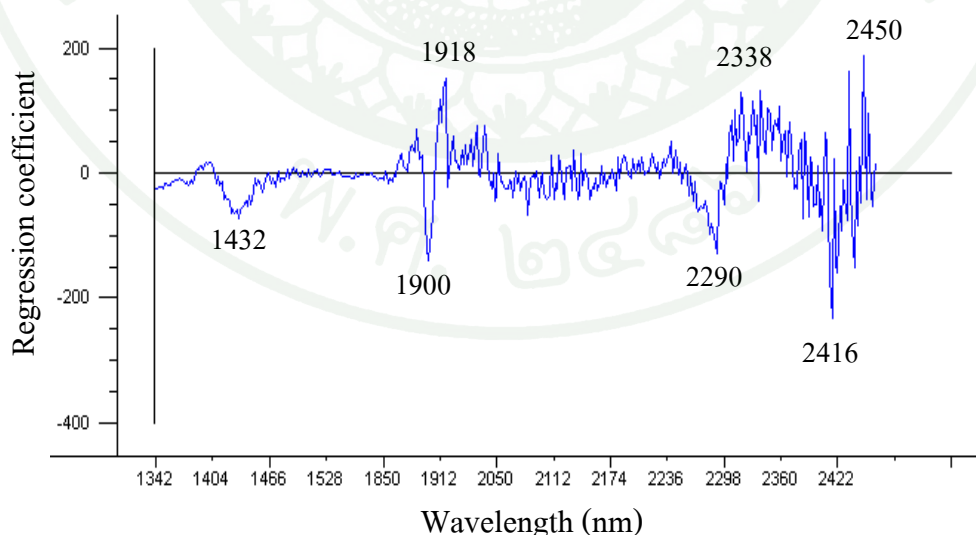
ตารางที่ 23 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นแบบการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด ด้วยวิธี PLSR และแบบการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น ด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เพื่อทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง

ค่าคุณภาพ	วิธีทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	แฟคเตอร์	R _{cal}	RMSEC	R _{val}	RMSEP	RPD
แคปไซซิน (mg/kg)	PLSR	1100-1918, 1996-2500	10	0.973	2.29	0.952	3.21	2.97
	MWPLSR ¹	1342-1576	10	0.941	3.39	0.935	5.85	1.57
	MWPLSR ²	1838-2464	10	0.933	3.60	0.932	3.54	2.60
	MWPLSR³	1342-1576, 1838-2464	10	0.964	2.65	0.960	2.80	3.30
	SCMWPLSR	1362-1378, 2306-2434	5	0.922	3.89	0.814	5.49	1.72
SHU	PLSR	1100-1918, 1996-2500	9	0.951	173.06	0.915	246.08	2.36
	MWPLSR ¹	1370-1540	7	0.800	336.33	0.710	409.64	1.41
	MWPLSR ²	1844-2276	7	0.917	223.99	0.876	281.48	2.07
	MWPLSR³	1370-1540, 1838-2464	8	0.941	190.62	0.929	223.45	2.61
	SCMWPLSR	1398-1426, 2094-2370	6	0.928	209.05	0.915	241.05	2.40

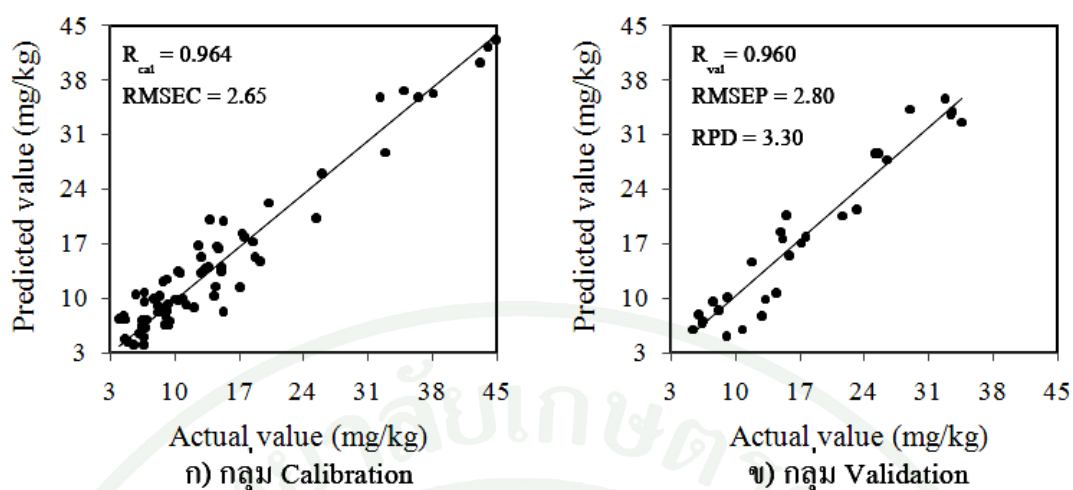
หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ วิธีการสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมที่สุด
สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 20

การเปรียบเทียบประสิทธิภาพของสมการทำนายที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ โดยสมการทำนายที่ดีควรมีค่า R และ RPD สูง และ RMSEP ต่ำ ความสามารถในการนำสมการไปประยุกต์ใช้งานพิจารณาได้จากค่า R โดยถ้ามีค่า R อยู่ในช่วง 0.81-0.90 คือสามารถใช้ในการคัดเลือกคุณภาพได้ ถ้าค่า R เท่ากับหรือมากกว่า 0.91 ขึ้นไป คือสามารถใช้ในการควบคุมคุณภาพ หรืองานวิจัยได้ (William, 2007) จากข้อมูลผลการทดลองในตารางที่ 23 สามารถสรุปความสามารถในการสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่างได้ดังนี้

ก. สมการทำนายปริมาณแคปไซซิน พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1342-1576 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายปริมาณแคปไซซิน โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 10 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.964 และ 2.65 mg/kg ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1342-1576 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 45 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1432, 1900, 1918, 2290, 2338, 2416 และ 2450 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่าปริมาณแคปไซซิน เนื่องจากมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH, CH₃ และ OH เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.960, 2.80 mg/kg และ 3.30 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 23 และภาพที่ 46 โดยสามารถประยุกต์ใช้ในการควบคุมคุณภาพได้

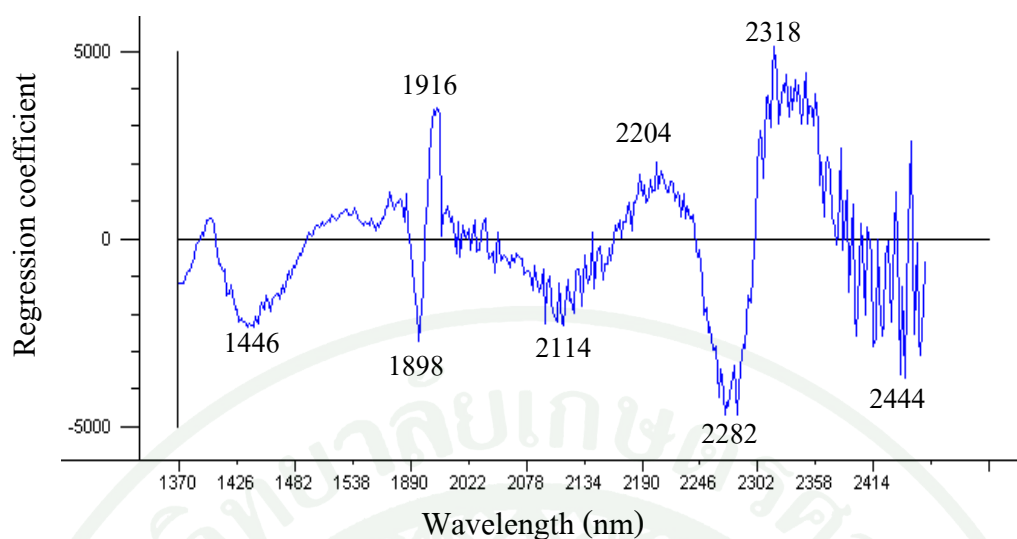


ภาพที่ 45 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าปริมาณแคปไซซินของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1342-1576 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR

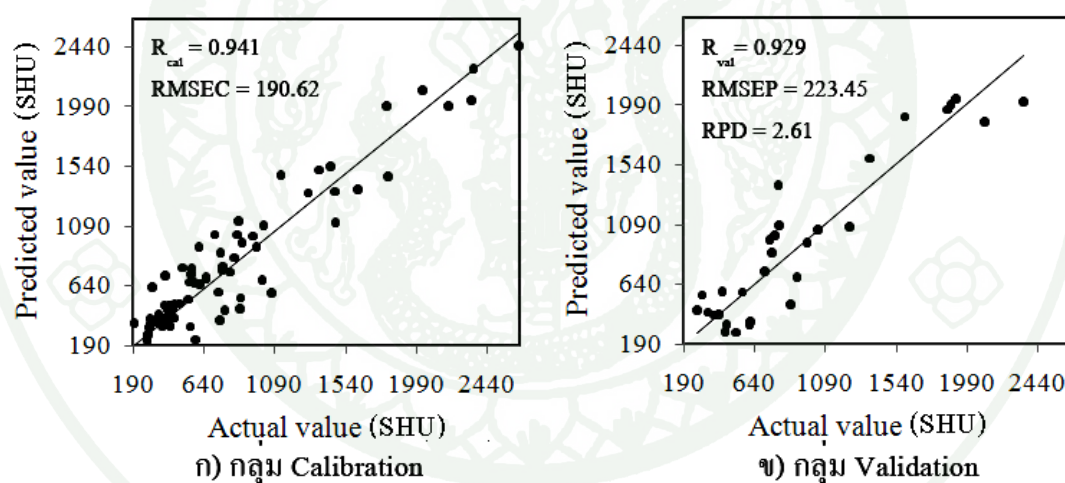


ภาพที่ 46 ค่าปริมาณแคปไซซินของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ข. สมการทำนายค่า SHU พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1370-1540 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่า SHU โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 8 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.941 และ 190.62 SHU ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณา ค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1370-1540 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 47 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1446, 1898, 1916, 2114, 2204, 2282, 2318 และ 2444 นาโนเมตร มีความสัมพันธ์กับค่า SHU เนื่องจากมีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH, CH₃ และ OH เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.929, 223.45 SHU และ 2.61 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 23 และภาพที่ 48 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ในงานควบคุมคุณภาพได้



ภาพที่ 47 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1370-1540 นาโนเมตร และ 1838-2464 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



ภาพที่ 48 ค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

ช่วงความยาวคลื่นของสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ที่สร้างขึ้น สอดคล้องกับงานวิจัยของ Park *et al.* (2008) ได้ทำการวัดปริมาณแคปไซซินยอดในผงพริกแดง พบว่าสมการทำนายปริมาณแคปไซซินยอด ที่สร้างด้วยวิธี PLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 892-1695 นาโนเมตร มีค่า R และ SECV เท่ากับ 0.90 และ 43.05 ตามลำดับ นอกจากนี้งานวิจัยของ Shim (2009) ได้ทำการวัดค่าความเผ็ดในรูปของปริมาณแคปไซซินและโคไฮโดรแคปไซซิน

(Dihydrocapsaicin)) ของผงพริกแดงด้วยเครื่อง NIR การสร้างสมการทำนายใช้ 6 ช่วงความยาวคลื่น ได้แก่ 758-832 นาโนเมตร 998-1102 นาโนเมตร 1314-1384 นาโนเมตร 1572-1730 นาโนเมตร 2072-2382 นาโนเมตร และ 2418-2492 นาโนเมตร พบว่าสมการทำนายความเผ็ดที่สร้างขึ้นมีประสิทธิภาพดีกว่าสมการทำนายที่สร้างขึ้นโดยใช้สเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่น (400-2500 นาโนเมตร) โดยมีค่า R_{val} และ SEP เท่ากับ 0.53 และ 42.79 ตามลำดับ

สมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ของน้ำจิ้มไก่ที่สร้างขึ้นสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการควบคุมคุณภาพได้ แต่ไม่เหมาะในการทำนายตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่มีปริมาณแคปไซซินหรือค่า SHU ที่มีค่าน้อย เนื่องจากค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายสูง อาจเนื่องมาจากตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ทั้งหมดมีปริมาณแคปไซซินต่ำกว่า 50 mg/kg อย่างไรก็ตาม สมการทำนายที่สร้างขึ้นก็ยังใช้ได้ในระดับการคัดเลือกรูปภาพ

3.2 การสร้างสมการทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่

การสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่จำนวน 50 ตัวอย่าง มีขั้นตอนการศึกษาทั้งหมด 4 ขั้นตอน เริ่มจากการวัดค่าความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ (ข้อ 3.2.1) กำหนดเป็นตัวแปรตาม และวัดค่าการดูดกลืนแสง (ข้อ 3.2.2) กำหนดเป็นตัวแปรอิสระ จากนั้นนำค่าความเผ็ดทางประสาทสัมผัส และข้อมูลสเปกตรัม มาใช้สร้างสมการทำนาย 2 แบบ คือการสร้างสมการแบบเส้นตรง ด้วยวิธี PLSR MWPLSR และ SCMWPLSR (ข้อ 3.2.3) และการสร้างสมการแบบไม่เชิงเส้น (Nonlinear) ด้วยวิธี Back propagation artificial neural network (BP-ANN) (ข้อ 3.2.4) เปรียบเทียบกันเพื่อให้ได้สมการทำนายที่ดีที่สุดในการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่

3.2.1 ค่าความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่

ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่างถูกนำมาแบ่งเป็นกลุ่ม Calibration และ Validation ในอัตราส่วน 70% ต่อ 30% แล้ววิเคราะห์ตัวอย่างด้วยวิธี Descriptive analysis ใช้ผู้ทดสอบที่ผ่านการฝึกฝนทั้งหมด 10 คน (รายละเอียดการวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัส แสดงดังภาคผนวก ก) ได้ค่าคุณลักษณะความเผ็ดทั้งหมด 4 คุณลักษณะ ได้แก่ ความเผ็ดโดยรวม (Over heat intensity) ความเผ็ดลิ้น (Tongue burn) ความเผ็ดเพดานและช่องปาก (Oral cavity burn) และความเผ็ดคอ (Throat burn) ผลค่าสถิติเบื้องต้นดังแสดงในตารางที่ 24 โดยตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ในกลุ่ม Calibration มีค่าความเผ็ดครอบคลุมความเผ็ดของกลุ่ม Validation และมีการกระจายตัวของค่าความ

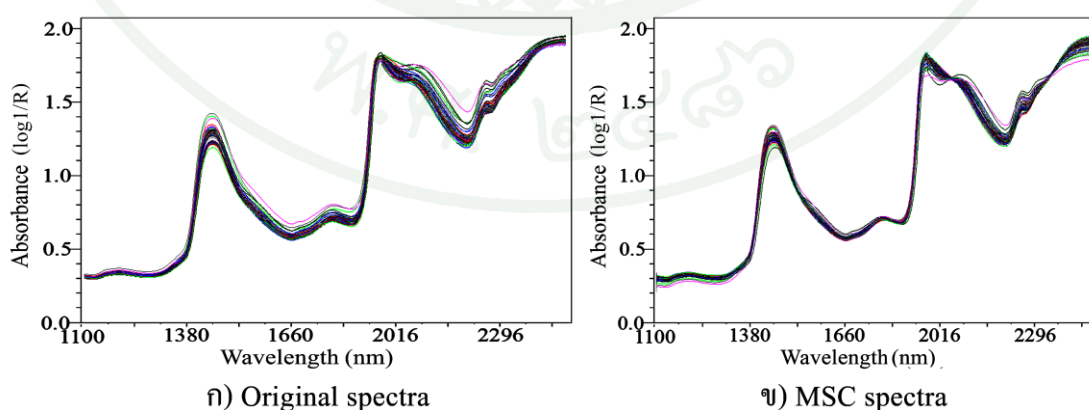
ผิดใกล้เคียงกัน จากข้อมูลในตารางที่ 24 แสดงให้เห็นว่าความผิดทั้ง 4 คุณลักษณะของตัวอย่าง น้ำจิ้มไก่มีค่าต่ำและมีช่วงข้อมูลค่อนข้างแคบ ทั้งนี้เนื่องมาจากปริมาณน้ำตาลในน้ำจิ้มไก่มีค่าสูง ซึ่งน้ำตาลมีความสามารถในการลดระดับความผิด (Nasrawi and Pangborn, 1990)

ตารางที่ 24 ค่าเฉลี่ย ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) และช่วงข้อมูลของความผิดของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

คุณลักษณะ	กลุ่ม Calibration (35 ตัวอย่าง)			กลุ่ม Validation (15 ตัวอย่าง)		
	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล	ค่าเฉลี่ย	SD	ช่วงข้อมูล
ความผิดโดยรวม	1.41	0.68	0.48-3.53	1.35	0.73	0.60-2.84
ความผิดกลิ่น	1.36	0.74	0.47-3.47	1.31	0.54	0.53-2.49
ความผิดเพดานและช่องปาก	1.21	0.71	0.35-3.25	1.17	0.45	0.44-2.03
ความผิดคอ	1.19	0.68	0.29-3.19	1.16	0.57	0.50-2.13

3.2.2 ค่าการดูดกลืนแสง

ค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง วัดในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 49 สำหรับการสร้างสมการจะทำการตัดช่วงความยาวคลื่น 1920-1994 นาโนเมตร ออก เพื่อลดปัญหาจากการเลือนตัวของสเปกตรัมหรือยอดของสเปกตรัมมีลักษณะหัวแตก และทำการปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์ด้วยวิธี MSC



ภาพที่ 49 สเปกตรัมเริ่มต้นและสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งข้อมูลด้วยวิธี MSC ของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

3.2.3 การสร้างสมการทำนายแบบเส้นตรง (Linear model)

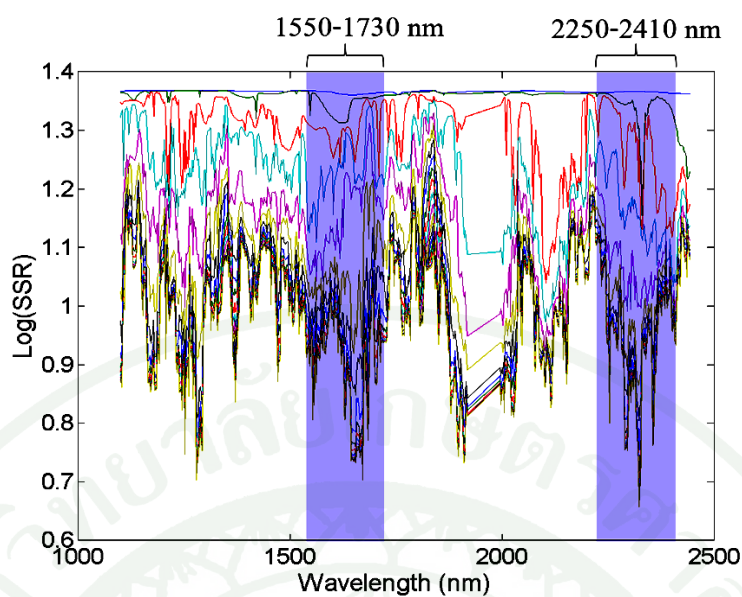
การสร้างสมการทำนายแบบเส้นตรงในการทำนายความเค้นทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ มีทั้งการใช้ข้อมูลสเปกตรัมตลอดช่วงความยาวคลื่นและการใช้สเปกตรัมบางช่วง จึงต้องมีการคัดเลือกสเปกตรัมที่เหมาะสมด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR (ข้อ 3.2.3ก) จากนั้นจึงนำข้อมูลค่าความเค้นกับข้อมูลสเปกตรัม มาใช้สร้างสมการทำนาย (ข้อ 3.2.3ข) โดยการสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมแบ่งออกเป็น 3 วิธี คือ PLSR, MWPLSR และ SCMWPLSR เปรียบเทียบกันเพื่อให้ได้สมการทำนายที่ดีที่สุด

ก. การคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น

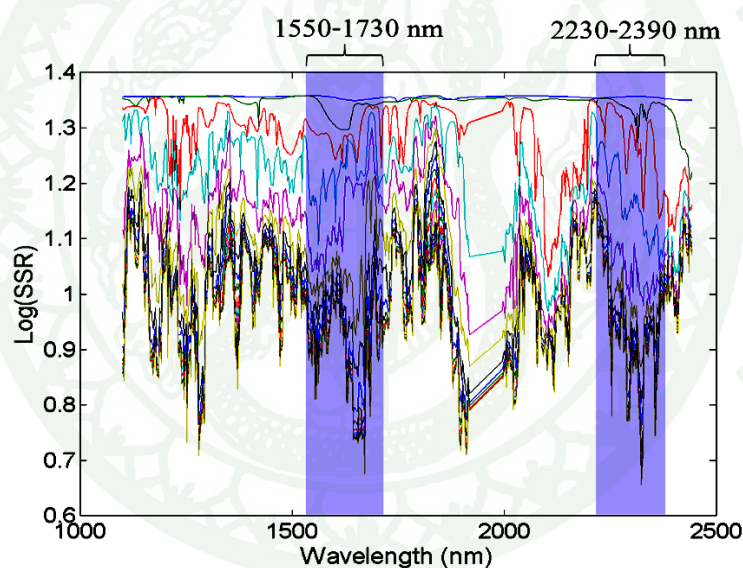
การเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมก่อนนำไปสร้างสมการทำนาย เพื่อให้สมการทำนายความเค้นทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่มีประสิทธิภาพเพิ่มขึ้น วิธีการคัดเลือกความยาวคลื่นที่ใช้มี 2 วิธี ได้แก่ MWPLSR และ SCMWPLSR

1) การเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยวิธี MWPLSR

นำข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC มาคัดเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสม ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-1918 นาโนเมตร และ 1996-2500 นาโนเมตร โดยวิธี MWPLSR จะคำนวณค่าความผิดพลาดระหว่างค่าจริงและค่าทำนายในรูปของ Log(SSR) ทำการพิจารณาเลือกช่วงสเปกตรัมที่มีความสัมพันธ์กับค่าความเค้นของน้ำจิ้มไก่ โดยเลือกช่วงกราฟที่มีค่า Log(SSR) ต่ำ เพื่อนำมาสร้างสมการทำนาย สำหรับการสร้างสมการทำนายความเค้นทั้ง 4 คุณลักษณะ ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR แสดงดังภาพที่ 50 พบว่าสมการทำนายความเค้นทั้ง 4 คุณลักษณะ จะเลือกช่วงความยาวคลื่นใกล้เคียงกันอยู่ในช่วง 1550-1914 นาโนเมตร และ 2230-2420 นาโนเมตร โดยช่วงความยาวคลื่นแรกมีความเกี่ยวข้องกับหมู่ฟังก์ชัน CH_2 , CH_3 และ OH และช่วงความยาวคลื่นสองมีความเกี่ยวข้องกับหมู่ฟังก์ชัน CH_2 (Osborne *et al.*, 1993)

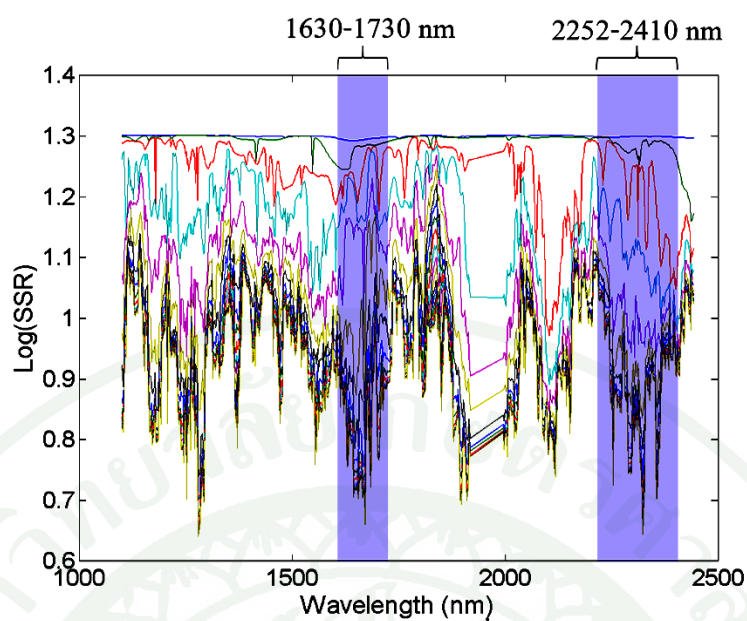


ก) ความเผ็ดโดยรวม

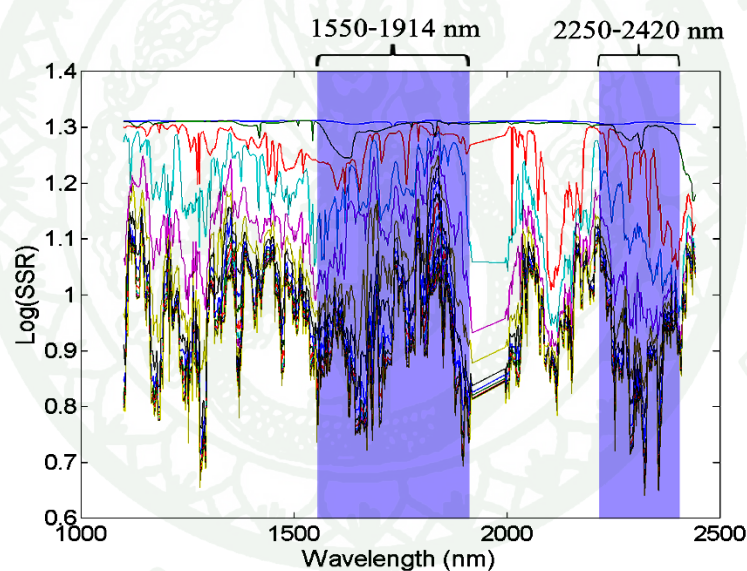


ข) ความเผ็ดลิ้น

ภาพที่ 50 ช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสม (ส่วนที่แรเงา) ที่เลือกได้จากวิธี MWPLSR เพื่อใช้ในการสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ ก) ความเผ็ดโดยรวม ข) ความเผ็ดลิ้น ค) ความเผ็ดเพดานและช่องปาก และ ง) ความเผ็ดคอ



ค) ความผิดปกติและช่องปาก



ง) ความผิดปกติ

ภาพที่ 50 (ต่อ)

2) การเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยวิธี SCMWPLSR

นำข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการคัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR มาคัดเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมด้วยวิธี SCMWPLSR แล้วจึงนำข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ไปวิเคราะห์สร้างสมการทำนาย ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี SCMWPLSR แสดงดังตารางที่ 25

ตารางที่ 25 ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR สำหรับการสร้างสมการทำนายความเค็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่

คุณลักษณะ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	
	วิธี MWPLSR	วิธี SCMWPLSR
ความเค็ดโดยรวม	1550-1730, 2250-2410	2274-2386
ความเค็ดลิ้น	1550-1730, 2230-2390	1618-1658, 2274-2382
ความเค็ดเพดานและช่องปาก	1630-1730, 2252-2410	2272-2316
ความเค็ดคอ	1550-1914, 2250-2420	2294-2406

ข. การสร้างสมการทำนายที่เหมาะสม

การสร้างสมการทำนายความเค็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ โดยการสร้างสมการทำนายแบบเส้นตรง ใช้วิธีการสร้างสมการ 3 วิธี ได้แก่ การใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR การคัดเลือกความยาวคลื่นด้วยวิธี MWPLSR และการคัดเลือกความยาวคลื่นด้วยวิธี SCMWPLSR โดยนำข้อมูลค่าความเค็ด (จากข้อ 3.2.1) มาหาความสัมพันธ์กับข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC (จากข้อ 3.2.2) ทำการแบ่งตัวอย่างโดยการสุ่มเป็นกลุ่ม Calibration จำนวน 35 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 15 ตัวอย่าง ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างได้แสดงในตารางที่ 26 โดยแต่ละค่าจะมีสมการทำนายทั้งหมด 5 สมการ คือ 1 สมการที่ได้จากการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมดด้วยวิธี PLSR กับ 4 สมการที่ได้จากวิธีการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น ทำการเปรียบเทียบกันเพื่อให้ได้สมการทำนายที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายความเค็ดทั้ง 4 คุณลักษณะของน้ำจิ้มไก่

ตารางที่ 26 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นแบบการใช้ความยาวคลื่นทั้งหมด ด้วยวิธี PLSR และแบบการคัดเลือกช่วงความยาวคลื่น ด้วยวิธี MWPLSR และ SCMWPLSR เพื่อทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

คุณลักษณะ	วิธีทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	แฟลคเตอร์	R _{cal}	RMSEC	R _{val}	RMSEP	RPD
ความเผ็ดโดยรวม	PLSR	1100-1918, 1996-2500	6	0.763	0.43	0.460	0.67	1.08
	MWPLSR ¹	1550-1730	6	0.638	0.52	0.602	0.57	1.25
	MWPLSR ²	2250-2410	4	0.624	0.53	0.453	0.64	1.11
	MWPLSR³	1550-1730, 2250-2410	5	0.713	0.47	0.653	0.53	1.32
	SCMWPLSR	2274-2386	4	0.822	0.38	0.514	0.62	1.14
ความเผ็ดลิ้น	PLSR	1100-1918, 1996-2500	8	0.896	0.33	0.562	0.57	0.93
	MWPLSR ¹	1550-1730	5	0.651	0.56	0.465	0.60	0.91
	MWPLSR ²	2230-2390	4	0.637	0.56	0.122	0.67	0.79
	MWPLSR³	1550-1730, 2230-2390	6	0.818	0.42	0.533	0.56	0.97
	SCMWPLSR	1618-1658, 2274-2382	5	0.806	0.43	0.324	0.69	0.78
ความเผ็ดเพดาน และช่องปาก	PLSR	1100-1918, 1996-2500	6	0.758	0.46	0.413	0.65	0.75
	MWPLSR ¹	1630-1730	6	0.708	0.49	0.615	0.38	1.14
	MWPLSR ²	2252-2410	6	0.886	0.32	0.285	0.54	0.92
	MWPLSR³	1630-1730, 2252-2410	5	0.786	0.43	0.611	0.39	1.20
	SCMWPLSR	2272-2316	3	0.501	0.61	0.337	0.42	1.04

ตารางที่ 26 (ต่อ)

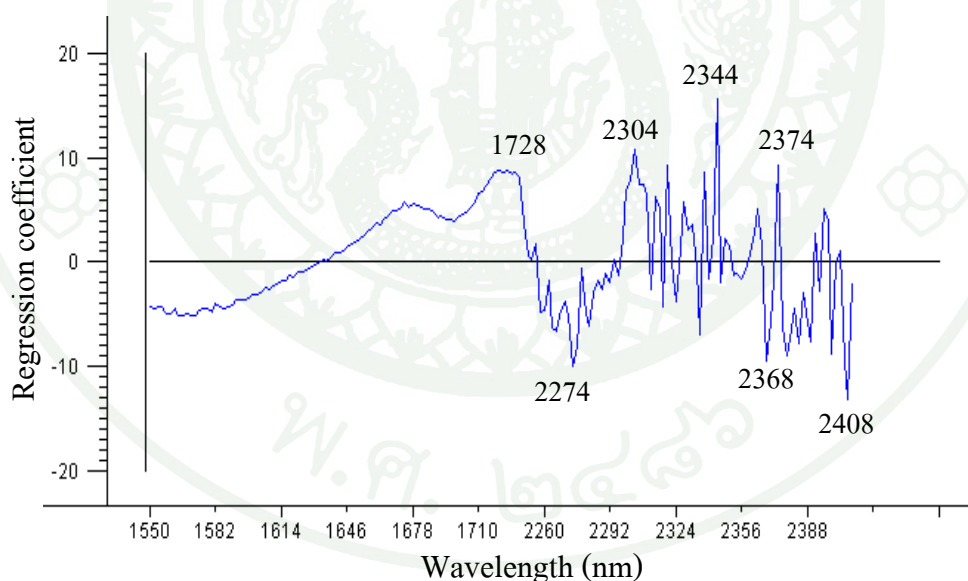
คุณลักษณะ	วิธีทางสถิติ	ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือก (nm)	แฟลคเตอร์	R _{cal}	RMSEC	R _{val}	RMSEP	RPD
ความเผ็ดคอ	PLSR	1100-1918, 1996-2500	8	0.864	0.34	0.387	0.62	0.89
	MWPLSR ¹	1550-1914	6	0.526	0.57	0.276	0.55	1.04
	MWPLSR ²	2250-2420	5	0.672	0.50	0.592	0.50	1.11
	MWPLSR³	1550-1914, 2250-2420	5	0.671	0.50	0.615	0.44	1.25
	SCMWPLSR	2294-2406	4	0.591	0.54	0.392	0.51	1.08

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ วิธีการสร้างสมการทำนายที่เหมาะสมที่สุด
สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 20

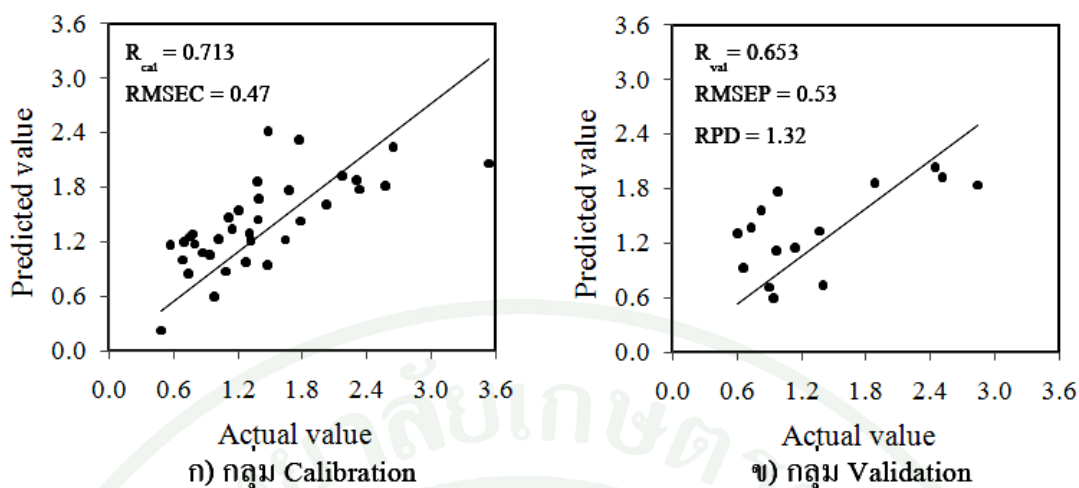
ค่าทางสถิติของสมการทำนายที่สร้างได้แสดงในตารางที่ 26 สามารถสรุปความสามารถในการสร้างสมการทำนายแบบเชิงเส้น เพื่อทำนายความเค้นทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่างได้ดังนี้

1) สมการทำนายความเค้นโดยรวม พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี

MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2250-2410 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าความเค้นโดยรวม โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 5 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.713 และ 0.47 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2250-2410 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 51 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1728, 2274, 2304, 2344, 2368, 2374 และ 2408 นาโนเมตร มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH_2 , $HC=CHCH_2$ และ ROH เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.635, 0.53 และ 1.32 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 26 และภาพที่ 52

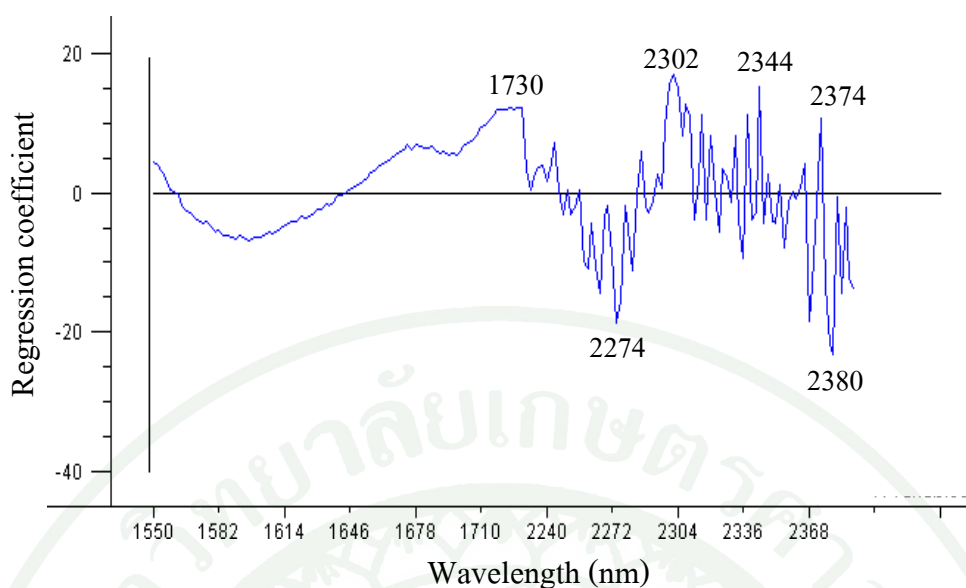


ภาพที่ 51 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเค้นโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2250-2410 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR

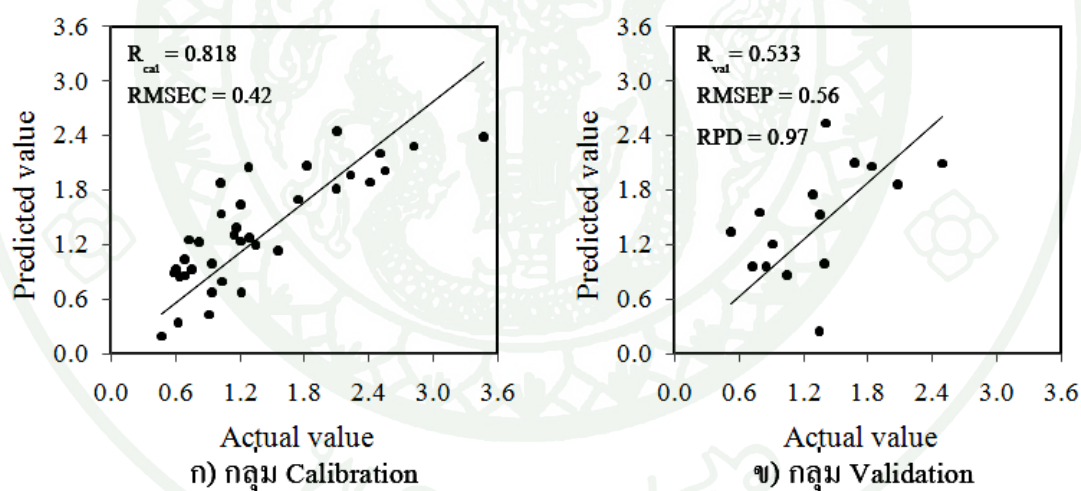


ภาพที่ 52 ค่าความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

2) สมการทำนายความเผ็ดลิ้น พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2230-2390 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าความเผ็ดลิ้น โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 6 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.818 และ 0.42 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2230-2390 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 53 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1730, 2274, 2302, 2344, 2374 และ 2380 นาโนเมตร มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH_2 , $HC=CHCH_2$ และ ROH เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.533, 0.56 และ 0.97 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 26 และภาพที่ 54



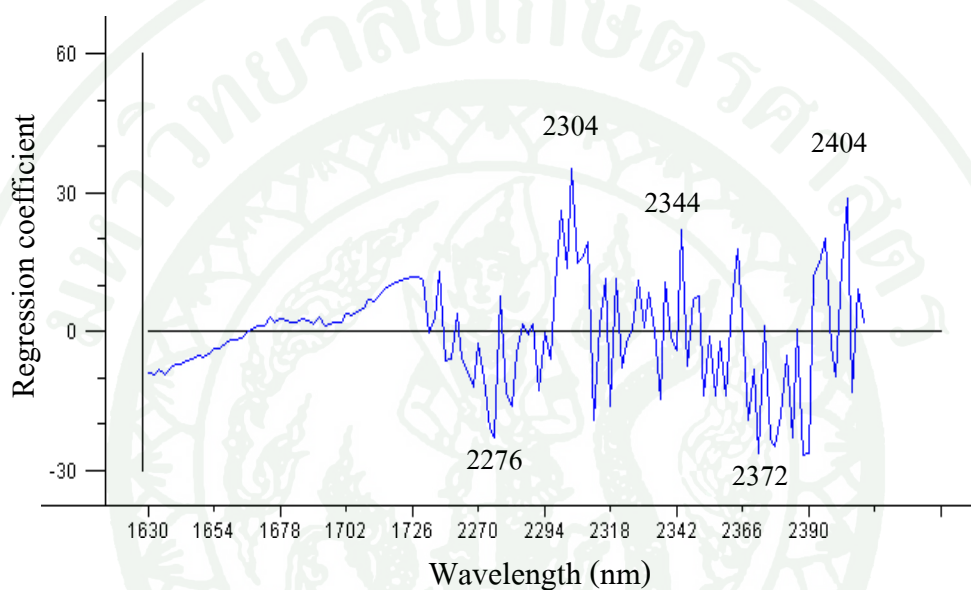
ภาพที่ 53 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1550-1730 นาโนเมตร และ 2230-2390 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



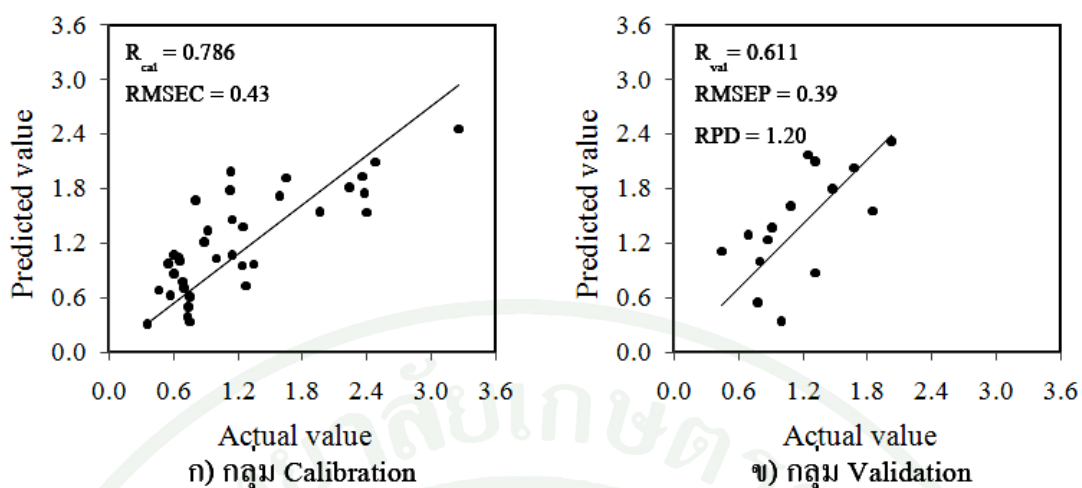
ภาพที่ 54 ค่าความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

3) สมการทำนายความเผ็ดเพดานและช่องปาก พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1630-1730 นาโนเมตร และ 2252-2410 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าความเผ็ดเพดานและช่องปาก โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแทนใหม่ได้ 5 แฟลคเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.786

และ 0.43 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1630-1730 นาโนเมตร และ 2252-2410 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 55 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 2276, 2304, 2344, 2372 และ 2404 นาโนเมตร มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH_2 , $\text{HC}=\text{CHCH}_2$ และ ROH เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.611, 0.39 และ 1.20 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 26 และภาพที่ 56



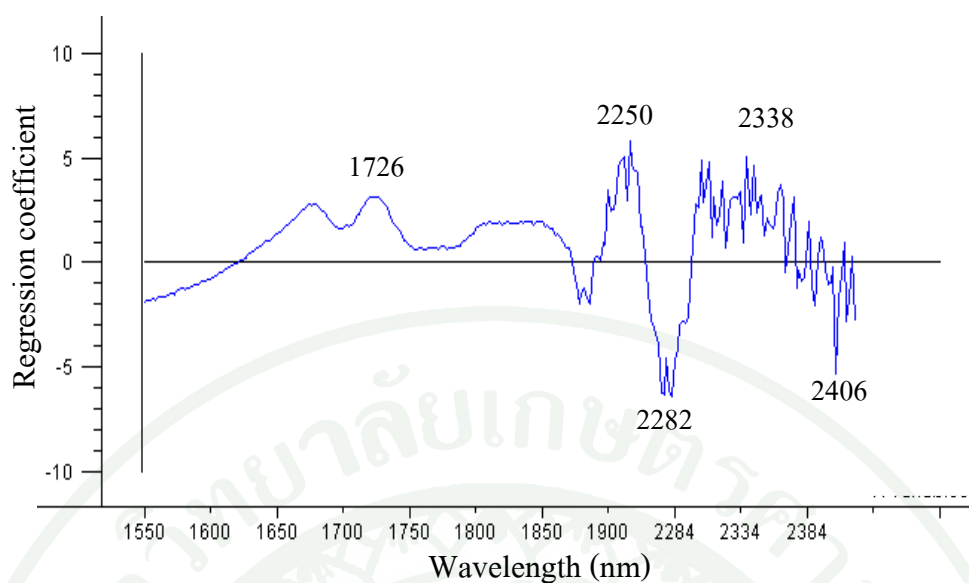
ภาพที่ 55 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเค็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1630-1730 นาโนเมตร และ 2252-2410 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



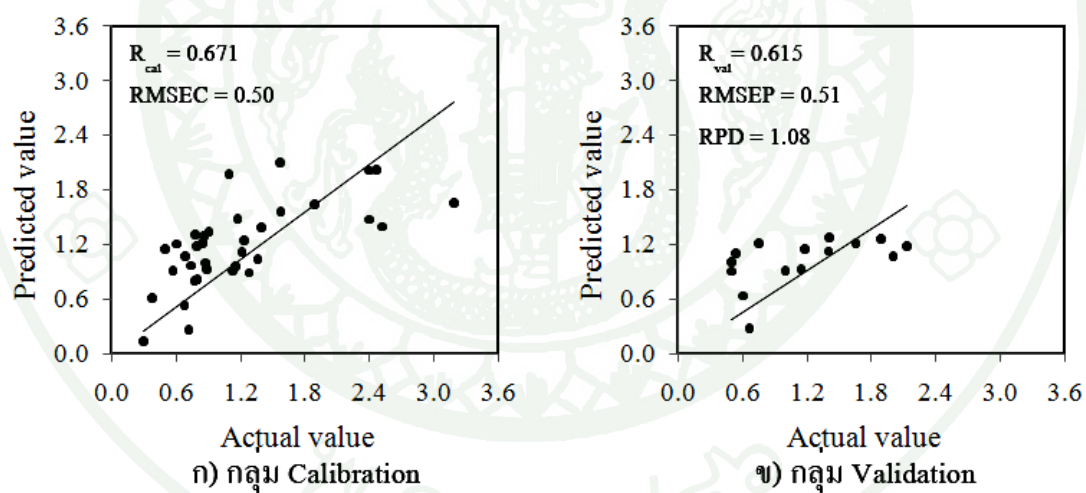
ภาพที่ 56 ค่าความเผ็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

4) สมการทำนายความเผ็ดคอ พบว่าสมการที่สร้างขึ้นด้วยวิธี MWPLSR โดยใช้ช่วงความยาวคลื่น 1550-1914 นาโนเมตร และ 2250-2420 นาโนเมตร ให้สมการที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการทำนายค่าความเผ็ดคอ โดยสมการที่สร้างขึ้นมีการจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมเป็นตัวแปรใหม่ได้ 5 แฟกเตอร์ ให้ค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.671 และ 0.50 ตามลำดับ เมื่อทำการพิจารณาค่า Regression coefficient ของสมการ ในช่วงความยาวคลื่น 1550-1914 นาโนเมตร และ 2250-2420 นาโนเมตร แสดงดังภาพที่ 57 พบว่าที่ความยาวคลื่นตำแหน่ง 1726, 2250, 2282, 2338 และ 2406 นาโนเมตร มีข้อมูลสำคัญที่เกี่ยวข้องกับกลุ่มพันธะ CH_2 , CH_3 และ ROH เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.615, 0.44 และ 1.25 ตามลำดับ ดังแสดงในตารางที่ 26 และภาพที่ 58

สมการทำนายเชิงเส้นตรงที่สร้างขึ้นด้วยวิธีที่เหมาะสมที่สุด เพื่อทำนายค่าความเผ็ดโดยรวม ความเผ็ดลิ้น ความเผ็ดเพดานและช่องปาก และความเผ็ดคอ มีค่า R_{cal} อยู่ในช่วง 0.671-0.818 เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการทำนายความเผ็ดทั้ง 4 คุณลักษณะ (4 สมการ) มีค่า R_{val} อยู่ในช่วง 0.533-0.653 ซึ่งแสดงให้เห็นว่าสมการทำนายความเผ็ดที่สร้างขึ้น มีประสิทธิภาพในการทำนายค่า ไม่สามารถนำมาใช้ทำนายค่าความเผ็ดได้



ภาพที่ 57 ค่า Regression coefficient ที่ใช้ในการทำนายค่าความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ ที่ช่วงความยาวคลื่น 1550-1914 นาโนเมตร และ 2250-2420 นาโนเมตร ด้วยวิธี MWPLSR



ภาพที่ 58 ค่าความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ MWPLSR ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

3.2.4 การสร้างสมการทำนายแบบไม่เชิงเส้น (Non-linear model) ด้วยวิธี BP-ANN

BP-ANN เป็นเทคนิคการสร้างสมการแบบ Black box หรือสร้างสมการแบบไม่เชิงเส้น (Non-linear) ซึ่งข้อมูลความเผ็ดทางประสาทสัมผัสเป็นข้อมูลที่ซับซ้อน ดังนั้นการสร้างสมการด้วยวิธี BP-ANN จึงถูกนำมาใช้ในการสร้างสมการทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ โดยมีขั้นตอนการศึกษา 2 ขั้นตอน ได้แก่ การศึกษาจำนวนข้อมูลนำเข้า (Input) ที่เหมาะสม และการศึกษาโครงสร้างที่เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียม

ก. การศึกษาจำนวนข้อมูลนำเข้า (Input) ที่เหมาะสม

นำข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี MSC (จากข้อ 3.2.2) มาจัดกลุ่มตัวแปรใหม่ด้วยวิธี Principal component analysis (PCA) ลดจำนวนตัวแปรข้อมูลสเปกตรัม (663 ค่า) เพื่อป้องกันความคลาดเคลื่อนที่อาจเกิดขึ้นจากการมีตัวแปรมากเกินไปของเครือข่ายประสาทเทียม ค่าความแปรปรวนทั้งหมดที่สามารถอธิบายได้ ความยาวคลื่นและกลุ่มพันธะที่เกี่ยวข้องในแต่ละองค์ประกอบหลัก (Principal component, PC) แสดงดังตารางที่ 27 พบว่า PC1 สามารถอธิบายความแปรปรวนได้สูงสุด เท่ากับ 55.92% รองลงมาคือ PC2 สามารถอธิบายความแปรปรวนได้ 24.51%

ตารางที่ 27 ค่าความแปรปรวนทั้งหมดที่สามารถอธิบายได้ ความยาวคลื่นที่สามารถอธิบายได้ และกลุ่มพันธะที่เกี่ยวข้องในแต่ละ PC ของข้อมูลสเปกตรัมน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

PC	ความแปรปรวนทั้งหมดที่สามารถอธิบายได้ (%)	ความยาวคลื่นที่สามารถอธิบายได้ ¹ (nm)	กลุ่มพันธะและโมเลกุลที่เกี่ยวข้อง ²
1	55.92	1414, 1888, 2154, 2270	CH ₂ , CONH ₂ , Starch
2	80.43	1420, 1918	H ₂ O
3	96.14	2496	Starch
4	98.76	1478, 2174, 2292	Glucose, =CH ₂ , CH ₃
5	99.42	1426, 1530, 2060, 2246	RNH ₂ , CONH ₂ , Amino acid
6	99.60	1482, 1898, 2008	CONH ₂ , CONHR
7	99.74	2104, 2234	Starch, CH
8	99.81	1520, 2028, 2114	ROH, CONH ₂ , CONHR
9	99.85	1450, 1676, 1724, 2288	Starch, CH ₂ , CH ₃
10	99.87	1116, 1868, 2050, 2346	Protein, HC=CHCH ₂

หมายเหตุ ¹ คือ ความยาวคลื่นที่มีค่า Factor loading สูงสุด ใน PC นั้นๆ เมื่อเทียบกับ PC อื่น

² คือ กลุ่มพันธะและโมเลกุลที่เกี่ยวข้องกับช่วงความยาวคลื่น อ้างอิงจาก Osborne *et al.* (1993)

การสร้างสมการ BP-ANN หรือเครือข่ายประสาทเทียมในการทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ ใช้ข้อมูลนำเข้าคือค่า PC score ของ 4, 6, 8 และ 10 PC แรก ซึ่งสามารถอธิบายความแปรปรวนได้ 98.76, 99.60, 99.81 และ 99.87% ตามลำดับ ส่วนข้อมูลนำออก (Output) คือค่าความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ (จากข้อ 3.2.1) นำมาสร้างเครือข่ายประสาทเทียมโดยใช้โครงสร้างจำนวนชั้นซ่อน (Hidden layer) 2 ชั้น และจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน (Hidden neuron) 10 นิวรอน โดยแบ่งตัวอย่างเป็นกลุ่ม Calibration จำนวน 35 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 15 ตัวอย่าง ผลการศึกษาจำนวนข้อมูลนำเข้าที่เหมาะสมแสดงดังตารางที่ 28

ตารางที่ 28 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้จำนวนข้อมูลนำเข้าแตกต่างกัน (ใช้โครงสร้างจำนวนชั้นซ่อน 2 ชั้น และจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน 10 นิวรอน) เพื่อทำนายค่าความเค็ดของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

คุณลักษณะ	จำนวนข้อมูลนำเข้า (PC)	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
ความเค็ด โดยรวม	4	0.499	0.59	0.477	0.63	1.12
	6	0.647	0.51	0.540	0.62	1.14
	8	0.661	0.51	0.630	0.56	1.27
	10	0.848	0.50	0.748	0.50	1.42
ความเค็ดกลิ่น	4	0.779	0.46	0.457	0.48	1.08
	6	0.734	0.50	0.523	0.47	1.10
	8	0.784	0.46	0.574	0.45	1.41
	10	0.829	0.41	0.767	0.41	1.26
ความเค็ดเพดาน และช่องปาก	4	0.633	0.54	0.457	0.48	0.49
	6	0.646	0.54	0.523	0.47	0.63
	8	0.727	0.48	0.574	0.45	0.77
	10	0.907	0.30	0.664	0.35	1.08
ความเค็ดคอ	4	0.595	0.55	0.457	0.48	0.89
	6	0.696	0.62	0.523	0.47	1.13
	8	0.710	0.48	0.574	0.47	1.13
	10	0.878	0.32	0.771	0.46	1.20

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ จำนวนข้อมูลนำเข้าที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด
สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

การเปรียบเทียบความสามารถของสมการทำนายความเค็ดทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ โดยใช้จำนวนข้อมูลนำเข้าแตกต่างกัน ข้อมูลทางสถิติจากตารางที่ 28 สามารถสรุปได้ว่า ข้อมูลนำเข้าจำนวนใดให้สมการทำนายที่เหมาะสมที่สุด โดยพิจารณาจากค่า R_{cal} และ RPD ที่มีค่าสูงสุด และ ค่า RMSEP ที่มีค่าต่ำสุด เช่นการสร้างสมการทำนายความเค็ดโดยรวม พบว่าจำนวนข้อมูลนำเข้า 10 PC ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด คือมีค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.848 และ 0.50 ตามลำดับ เมื่อตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่ามีค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ

0.748, 0.50 และ 1.42 ตามลำดับ ซึ่งข้อมูลนำเข้า 10 PC นี้ ให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} และ RPD ที่สูงสุด และค่า RMSEP ที่ต่ำสุด เมื่อเทียบกับข้อมูลนำเข้าจำนวนอื่น และสำหรับการสร้างสมการทำนายความเค้นในคุณลักษณะอื่นๆ ก็ได้ผลในลักษณะเดียวกัน คือการเพิ่มจำนวนข้อมูลนำเข้าเป็น 10 PC ทำให้ค่า R_{cal} และ RPD เพิ่มขึ้น และค่า RMSEP ลดลง ดังนั้นจึงเลือกจำนวนข้อมูลนำเข้า 10 PC มาใช้ในการศึกษาโครงสร้างที่เหมาะสมสำหรับการสร้างสมการทำนายความเค้นทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ด้วยวิธี BP-ANN ต่อไป

ข. การศึกษาโครงสร้างที่เหมาะสม

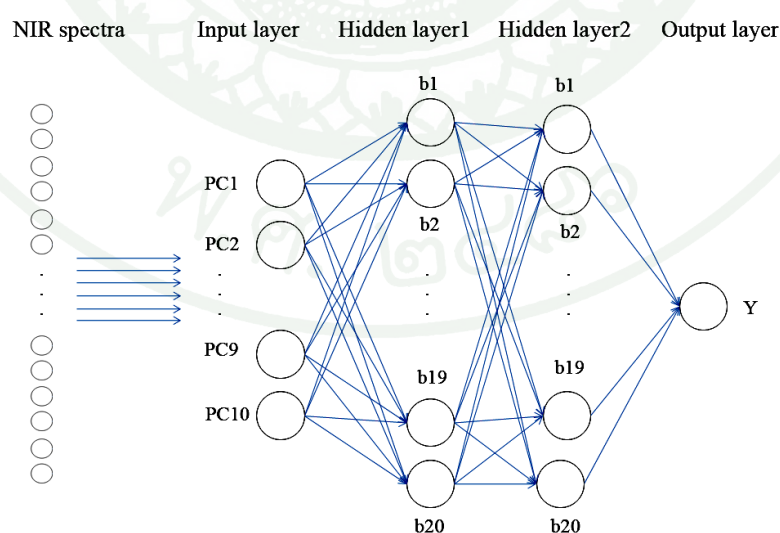
ข้อมูลนำเข้า คือค่า PC score ของ 10 PC แรก และข้อมูลนำออก คือค่าความเค้นของน้ำจิ้มไก่ (จากข้อ 3.2.1) นำมาศึกษาโครงสร้างที่เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียม โดยศึกษาจำนวนชั้นซ่อน (1 และ 2 ชั้น) และจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน (5, 10, 15, 20 และ 25 นิวรอน) โดยแบ่งตัวอย่างเป็นกลุ่ม Calibration จำนวน 35 ตัวอย่าง และกลุ่ม Validation จำนวน 15 ตัวอย่าง ผลการศึกษาโครงสร้างที่เหมาะสมแสดงดังตารางที่ 29-32 และภาพที่ 59-66 ซึ่งสมการทำนายที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายความเค้นในแต่ละคุณลักษณะมีรายละเอียดดังนี้

1) สมการทำนายความเค้นโดยรวม จากข้อมูลตารางที่ 29 พบว่าโครงสร้างที่เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียมเพื่อใช้ในการทำนายความเค้นโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ คือโครงสร้างที่มีจำนวนชั้นซ่อน เท่ากับ 2 ชั้น และมีจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน เท่ากับ 20 นิวรอน ดังแสดงในภาพที่ 59 จากโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมนี้ เมื่อนำมาใช้ทำนายความเค้นโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ พบว่าให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.910 และ 0.29 ตามลำดับ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.900, 0.45 และ 1.58 ตามลำดับ ดังแสดงในภาพที่ 60 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ได้ในระดับการคัดเลือก

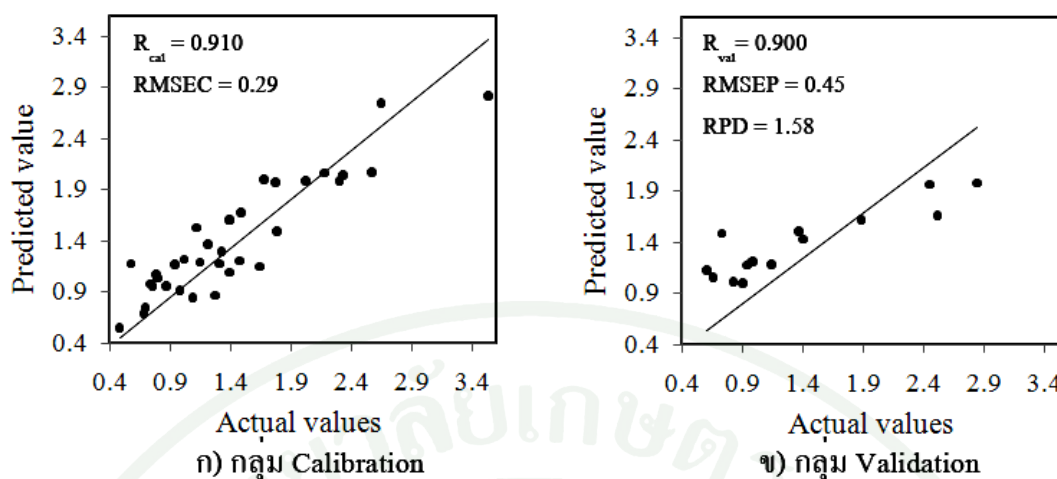
ตารางที่ 29 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

จำนวนชั้นซ่อน	จำนวนนิวรอน	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
1	5	0.766	0.43	0.702	0.52	1.34
1	10	0.651	0.51	0.579	0.58	1.21
1	15	0.810	0.40	0.728	0.53	1.34
1	20	0.738	0.46	0.711	0.52	1.37
1	25	0.925	0.27	0.624	0.66	1.06
2	5	0.712	0.47	0.699	0.54	1.32
2	10	0.848	0.50	0.748	0.50	1.42
2	15	0.901	0.30	0.728	0.50	1.41
2	20	0.910	0.29	0.900	0.45	1.58
2	25	0.923	0.26	0.708	0.52	1.34

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด
สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7



ภาพที่ 59 โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความเผ็ดโดยรวม)



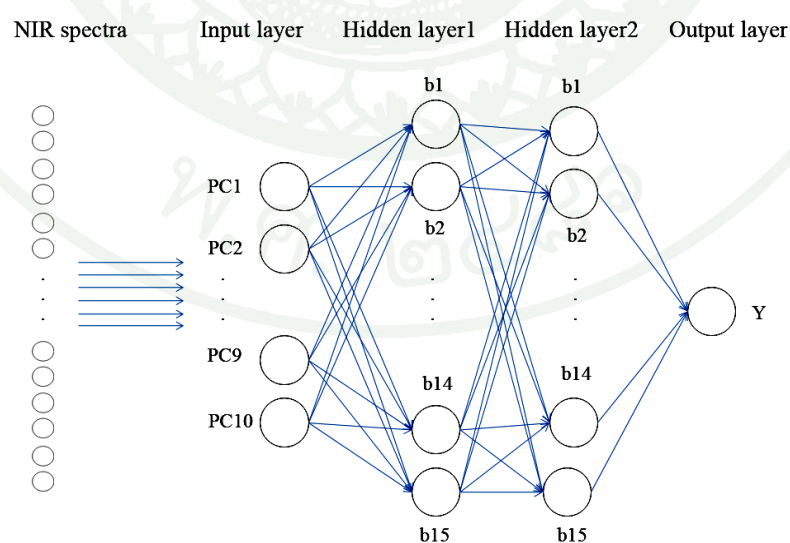
ภาพที่ 60 ค่าความเผ็ดโดยรวมของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

2) สมการทำนายความเผ็ดลิ้น จากข้อมูลตารางที่ 30 พบว่าโครงสร้างที่เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียมเพื่อใช้ในการทำนายความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ คือ โครงสร้างที่มีจำนวนชั้นซ่อน เท่ากับ 2 ชั้น และมีจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน เท่ากับ 15 นิวรอน ดังแสดงในภาพที่ 61 จากโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมนี้ เมื่อนำมาใช้ทำนายความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ พบว่าให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.870 และ 0.36 ตามลำดับ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.803, 0.32 และ 1.62 ตามลำดับ ดังแสดงในภาพที่ 62 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ได้ในระดับการคัดเลือก

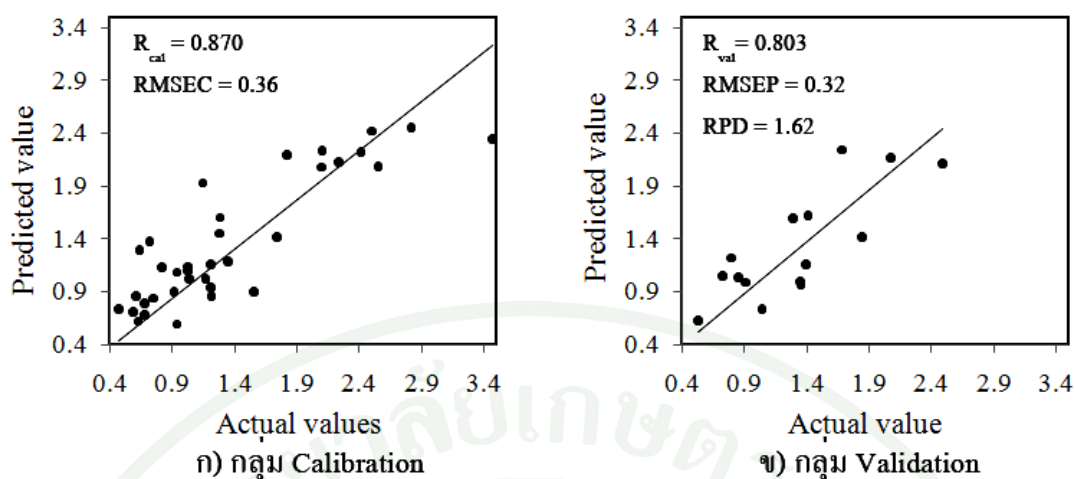
ตารางที่ 30 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

จำนวนชั้นซ่อน	จำนวนนิวรอน	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
1	5	0.679	0.54	0.664	0.42	1.24
1	10	0.778	0.46	0.704	0.39	1.34
1	15	0.897	0.32	0.746	0.58	0.91
1	20	0.829	0.41	0.717	0.38	1.35
1	25	0.905	0.31	0.680	0.47	1.12
2	5	0.816	0.42	0.730	0.40	1.29
2	10	0.829	0.41	0.767	0.41	1.26
2	15	0.870	0.36	0.803	0.32	1.62
2	20	0.919	0.29	0.731	0.50	1.05
2	25	0.909	0.31	0.692	0.48	1.09

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด
สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7



ภาพที่ 61 โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความเผ็ดลิ้นของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความเผ็ดลิ้น)



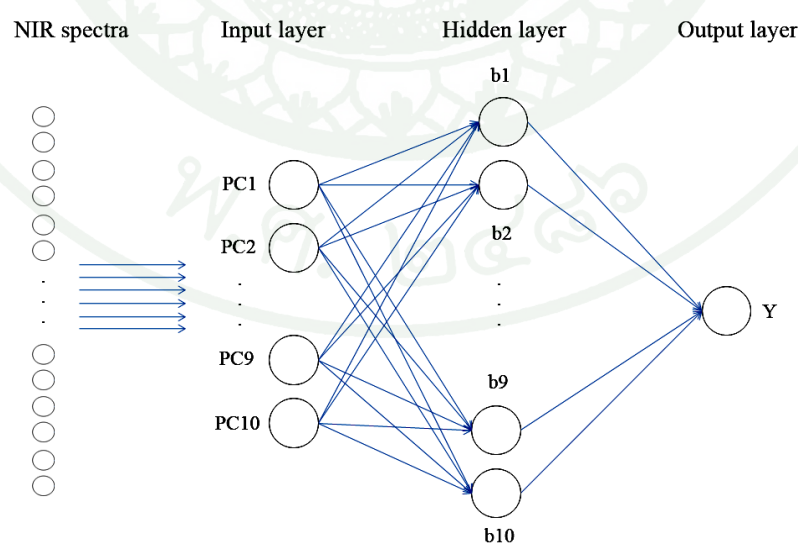
ภาพที่ 62 ค่าความผิดพลาดของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

3) สมการทำนายความผิดพลาดและช่องปาก จากข้อมูลตารางที่ 31 พบว่า โครงสร้างที่เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียมเพื่อใช้ในการทำนายความผิดพลาดและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ คือ โครงสร้างที่มีจำนวนชั้นซ่อน เท่ากับ 1 ชั้น และมีจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน เท่ากับ 10 นิวรอน ดังแสดงในภาพที่ 63 จากโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมนี้ เมื่อนำมาใช้ในการทำนายความผิดพลาดและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ พบว่าให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} และ $RMSEC$ เท่ากับ 0.831 และ 0.39 ตามลำดับ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , $RMSEP$ และ RPD เท่ากับ 0.736, 0.33 และ 1.32 ตามลำดับ ดังแสดงในภาพที่ 64 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ได้ในระดับการคัดเลือก

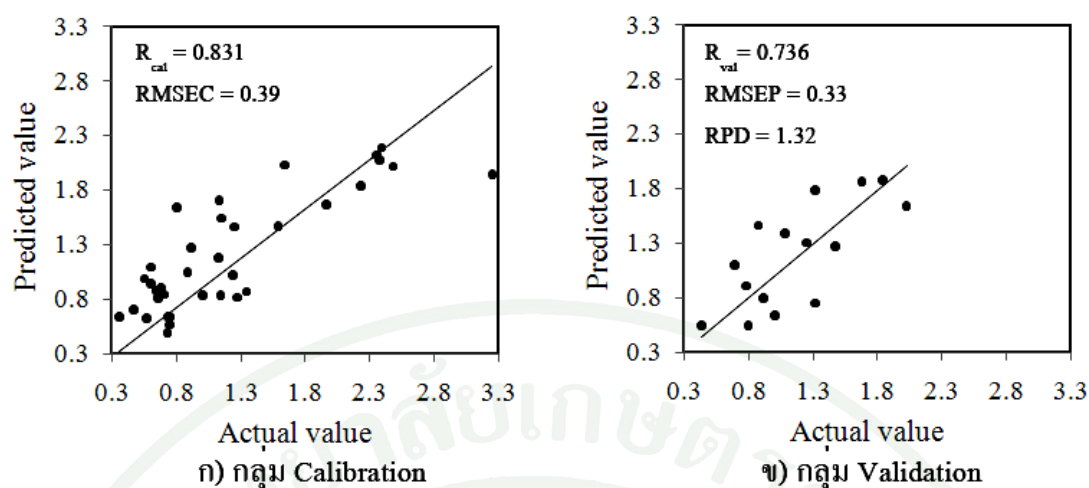
ตารางที่ 31 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

จำนวนชั้นซ่อน	จำนวนนิวรอน	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
1	5	0.748	0.46	0.605	0.46	0.95
1	10	0.831	0.39	0.736	0.33	1.32
1	15	0.737	0.48	0.709	0.36	1.19
1	20	0.795	0.43	0.663	0.40	1.08
1	25	0.806	0.42	0.706	0.42	1.04
2	5	0.759	0.46	0.688	0.39	1.13
2	10	0.907	0.30	0.664	0.35	1.08
2	15	0.915	0.29	0.729	0.43	0.84
2	20	0.907	0.30	0.692	0.40	1.08
2	25	0.915	0.29	0.717	0.52	0.84

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด
สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7



ภาพที่ 63 โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความเผ็ดเพดานและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความเผ็ดเพดาน)



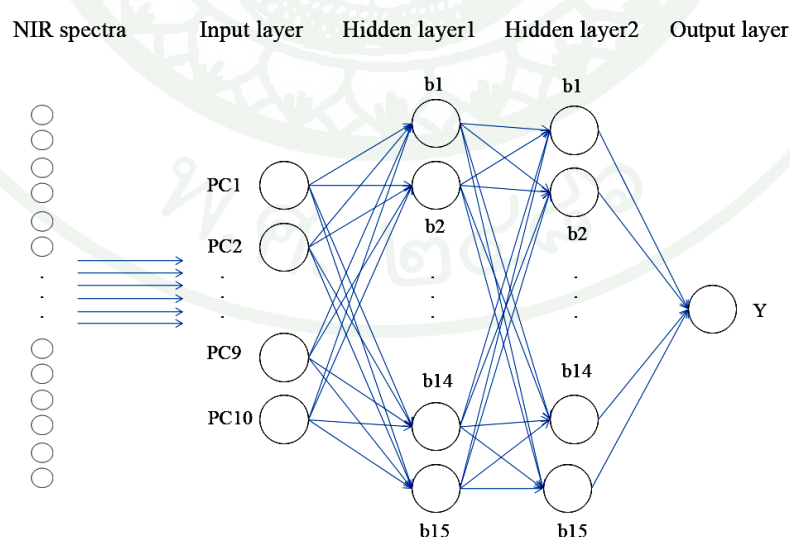
ภาพที่ 64 ค่าความผิดพลาดและช่องปากของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

4) สมการทำนายความเผ็ดคอก จากข้อมูลตารางที่ 32 พบว่าโครงสร้างที่เหมาะสมของเครือข่ายประสาทเทียมเพื่อใช้ในการทำนายความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ คือ โครงสร้างที่มีจำนวนชั้นซ่อน เท่ากับ 2 ชั้น และมีจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน เท่ากับ 15 นิวรอน ดังแสดงในภาพที่ 65 จากโครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมนี้ เมื่อนำมาใช้ทำนายความเผ็ดคอกของน้ำจิ้มไก่ พบว่าให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} และ RMSEC เท่ากับ 0.820 และ 0.40 ตามลำดับ เมื่อทำการตรวจสอบความถูกต้องของสมการ พบว่าสมการที่เหมาะสมให้ค่า R_{val} , RMSEP และ RPD เท่ากับ 0.807, 0.33 และ 1.68 ตามลำดับ ดังแสดงในภาพที่ 66 โดยสมการทำนายที่สร้างขึ้นสามารถประยุกต์ใช้ได้ในระดับการคัดเลือก

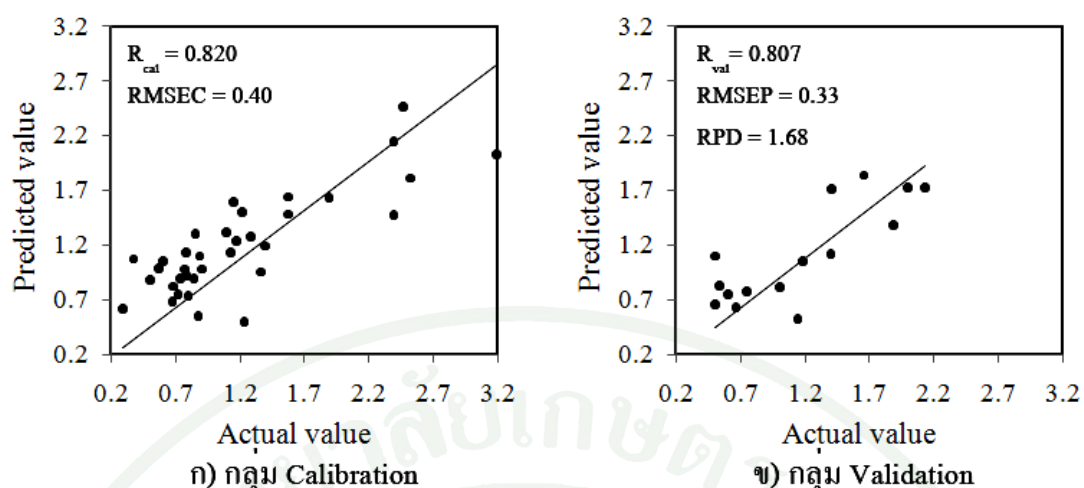
ตารางที่ 32 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้โครงสร้างของเครือข่ายประสาทเทียมแตกต่างกัน (ใช้ข้อมูลนำเข้า 10 PC) เพื่อทำนายค่าความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

จำนวนชั้นซ่อน	จำนวนนิวรอน	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
1	5	0.746	0.45	0.662	0.46	0.32
1	10	0.768	0.44	0.755	0.37	1.47
1	15	0.811	0.40	0.769	0.36	1.51
1	20	0.891	0.31	0.803	0.40	1.38
1	25	0.848	0.36	0.746	0.56	0.99
2	5	0.842	0.37	0.789	0.35	1.58
2	10	0.878	0.32	0.771	0.46	1.20
2	15	0.820	0.40	0.807	0.33	1.68
2	20	0.948	0.22	0.801	0.53	1.04
2	25	0.905	0.29	0.799	0.49	1.12

หมายเหตุ อักษรตัวเข้ม คือ โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด
สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7



ภาพที่ 65 โครงสร้างเครือข่ายประสาทเทียมที่เหมาะสมสำหรับทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ (b คือจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน และ Y คือค่าความเผ็ด)



ภาพที่ 66 ค่าความเผื่อของน้ำจิ้มไก่ที่วิเคราะห์ได้ (Actual value) กับค่าที่ทำนายได้ (Predicted value) จากสมการ BP-ANN ของ ก) กลุ่ม Calibration และ ข) กลุ่ม Validation

สมการทำนายความเผื่อทางประสาทสัมผัสที่สร้างขึ้นด้วยวิธี BP-ANN เพื่อทำนายความเผื่อทั้ง 4 คุณลักษณะของน้ำจิ้มไก่ พบว่าสมการทำนายความเผื่อเพดานและช่องปากมีโครงสร้างเครือข่ายในประสาทเทียมที่เหมาะสมคือ จำนวนชั้นซ่อน 1 ชั้นและจำนวนหน่วยประสาทในชั้นซ่อน 10 นิวรอน ซึ่งเป็นโครงสร้างใยประสาทเทียมที่ซับซ้อนน้อยกว่าสมการทำนายความเผื่อโดยรวม ความเผื่อลิ้น และความเผื่อคอ ที่ต้องใช้โครงสร้างเครือข่ายใยประสาทเทียมที่มีจำนวนชั้นซ่อน 2 ชั้น เนื่องจากจากบริเวณในการรับรู้ความเผื่อโดยรวม ความเผื่อลิ้น และความเผื่อคอ จะมีส่วนรับรู้ความรู้สึก (Receptor) ที่ใช้ในการรับรสชาติเข้ามาเกี่ยวข้อง โดยส่วนที่รับรู้ความรู้สึกเผื่อได้มากที่สุดภายในช่องปากคือลิ้น ที่มีเส้นประสาทไตรเจมินาล (Trigeminal nerve) อยู่มาก (Allison, 1999) จึงทำให้การประเมินตัดสินความเผื่อยุ่ยากกว่าความเผื่อเพดานและช่องปาก ที่มีเพียงเยื่อในการรับรู้ความเผื่อเท่านั้น

จากนั้นนำข้อมูลค่าสถิติของสมการทำนายแบบไม่เป็นเชิงเส้น (Non-linear) ที่สร้างขึ้นด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้จำนวนข้อมูลนำเข้า และโครงสร้างเครือข่ายใยประสาทเทียมที่เหมาะสม (จากข้อ 3.2.4) และข้อมูลค่าสถิติของสมการทำนายแบบเชิงเส้น (Linear) ที่สร้างขึ้นด้วยวิธีที่เหมาะสม (MWPLSR) (จากข้อ 3.2.3) มาทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของสมการทำนายสร้างขึ้น เพื่อให้ได้สมการทำนายที่ดีที่สุดในการทำนายความเผื่อทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่ ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของสมการทำนายที่สร้างจากทั้ง 2 วิธี แสดงดังตารางที่ 33 พบว่าวิธี BP-ANN ให้สมการทำนายความเผื่อโดยรวม ความเผื่อลิ้น ความเผื่อเพดานและช่องปาก และ

ความเผ็ดคอ ที่มีค่า R_{cal} และ RPD สูง และค่า RMSEP ต่ำกว่าวิธี MWPLSR ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่าการสร้างสมการทำนายความเผ็ดทางคุณภาพทางประสาทสัมผัสของน้ำจิ้มไก่โดยวิธี BP-ANN มีประสิทธิภาพมากกว่าวิธี MWPLSR เนื่องจากความเผ็ดทางประสาทสัมผัสเป็นข้อมูลที่มีความซับซ้อน การใช้เทคนิค BP-ANN ซึ่งเป็นวิธีการสร้างสมการแบบไม่เป็นเชิงเส้นจึงสามารถสร้างสมการทำนายค่าความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ได้มีประสิทธิภาพมากกว่าการสร้างสมการด้วยวิธี MWPLSR ซึ่งเป็นวิธีการสร้างสมการแบบเชิงเส้น ผลการทดลองสอดคล้องกับงานวิจัยของ Liu *et al.* (2008) ที่วัดเอนไซม์ของเอนไซม์ Acetolactate synthase ในใบ Oilseed rape งานวิจัยของ Janik *et al.* (2007) ที่วัดปริมาณแอนโทไซยานิน (anthocyanin) ในองุ่นแดง และงานวิจัยของ Balabin *et al.* (2007) ที่วิเคราะห์คุณภาพแก๊สโซลีน พบว่าการสร้างสมการทำนายด้วยวิธี BP-ANN ให้สมการทำนายที่มีประสิทธิภาพมากกว่าวิธี PLSR และ MWPLSR

ตารางที่ 33 การเปรียบเทียบค่าสถิติของสมการทำนายแบบเชิงเส้นด้วยวิธี MWPLSR และแบบไม่เชิงเส้นด้วยวิธี BP-ANN ที่สร้างขึ้น เพื่อทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง

คุณลักษณะ	วิธีการสร้างสมการ	R_{cal}	RMSEC	R_{val}	RMSEP	RPD
ความเผ็ดโดยรวม	MWPLSR	0.713	0.47	0.653	0.53	1.32
	BP-ANN¹	0.910	0.29	0.900	0.45	1.58
ความเผ็ดลิ้น	MWPLSR	0.818	0.42	0.533	0.56	0.97
	BP-ANN²	0.870	0.36	0.803	0.32	1.62
ความเผ็ดเพดานและช่องปาก	MWPLSR	0.786	0.43	0.611	0.39	1.20
	BP-ANN³	0.831	0.39	0.736	0.33	1.32
ความเผ็ดคอ	MWPLSR	0.671	0.50	0.615	0.44	1.25
	BP-ANN⁴	0.820	0.40	0.807	0.33	1.68

หมายเหตุ สัญลักษณ์ต่างๆ เช่นเดียวกับตารางที่ 7

อักษรตัวเข้ม คือ วิธีการสร้างสมการทำนายที่ให้สมการทำนายเหมาะสมที่สุด

วิธี MWPLSR ใช้ช่วงความยาวคลื่นที่คัดเลือกได้ แสดงดังตารางที่ 26 ที่กล่าวมา

¹ คือ วิธี BP-ANN ใช้โครงสร้าง 2 ชั้นซ่อน และหน่วยประสาทในชั้นซ่อน 20 นิวรอน

² คือ วิธี BP-ANN ใช้โครงสร้าง 2 ชั้นซ่อน และหน่วยประสาทในชั้นซ่อน 15 นิวรอน

³ คือ วิธี BP-ANN ใช้โครงสร้าง 1 ชั้นซ่อน และหน่วยประสาทในชั้นซ่อน 10 นิวรอน

⁴ คือ วิธี BP-ANN ใช้โครงสร้าง 2 ชั้นซ่อน และหน่วยประสาทในชั้นซ่อน 15 นิวรอน

ความสามารถในการนำสมการไปประยุกต์ใช้งานพิจารณาได้จากค่า R และ RPD โดยถ้ามีค่า R อยู่ในช่วง 0.71-0.80 และ RPD อยู่ในช่วง 2.4-3.0 ก็สามารถใช้ในการคัดเลือกเบื้องต้น ถ้าค่า R อยู่ในช่วง 0.81-0.90 และ RPD อยู่ในช่วง 3.1-4.9 ก็สามารถใช้ในการคัดเลือกหรือการตรวจวิเคราะห์คุณภาพบางอย่างได้ (William, 2007) จากข้อมูลตารางที่ 33 ถ้าพิจารณาจากค่า R_{cal} พบว่าสมการทำนายความเค็ดโดยรวม ความเค็ดลิ้น ความเค็ดเพดานและช่องปาก และความเค็ดคอที่สร้างขึ้นด้วยวิธี BP-ANN อยู่ในระดับที่สามารถใช้ในการคัดเลือกได้ (R_{cal} อยู่ในช่วง 0.82-0.91) แต่เมื่อพิจารณาค่า RPD พบว่าสมการที่สร้างขึ้นมีค่า RPD อยู่ในช่วง 1.32-1.68 เท่านั้น อาจเนื่องมาจากค่าความเค็ดของน้ำจิ้มไก่มีช่วงข้อมูลค่อนข้างแคบ ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) ของกลุ่ม Validation มีค่าต่ำ จึงทำให้ค่า RPD ของแต่ละสมการมีค่าต่ำด้วย

สรุปและข้อเสนอแนะ

สรุป

การศึกษาความเป็นไปได้ในการประเมินคุณภาพผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีย่านใกล้อินฟราเรด (NIRS) แบ่งการศึกษาออกเป็น 3 ขั้นตอน ได้แก่ 1) การศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR 2) การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพ และ 3) การสร้างสมการทำนายความเผ็ดจากผลการศึกษาสามารถสรุปได้ดังนี้

1. การศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการวัดค่าการดูดกลืนแสงจากเครื่อง NIR ใช้น้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง โดยศึกษาวิธีการเตรียมตัวอย่าง 3 วิธี ได้แก่ การคน การปั่น และการกรอง พบว่า การคนตัวอย่าง 10-15 ครั้ง ก่อนบรรจุลงอุปกรณ์ใส่ตัวอย่างชนิด British cup ที่มีขนาดความหนาของตัวอย่าง 0.5 มิลลิเมตร แล้วนำมาวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยหลักการส่องผ่านสะท้อนเป็นวิธีการเตรียมตัวอย่างที่เหมาะสมที่สุด การสร้างสมการทำนายปริมาณของแข็งทั้งหมดที่ละลายได้ (TSS) โดยใช้วิธีการคนเป็นวิธีเตรียมตัวอย่าง ให้สมการทำนายที่มีค่า R_{cal} สูงสุดและ RMSECV ต่ำสุดเท่ากับ 0.992 และ 0.81°Brix ตามลำดับ

2. การสร้างสมการทำนายค่าคุณภาพทางเคมีและกายภาพของน้ำจิ้มไก่ ใช้น้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ทำการวิเคราะห์ค่าคุณภาพในเรื่อง ปริมาณ TSS ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ ปริมาณกรดทั้งหมด ค่า pH ค่าสี L^* , a^* , b^* , C^* และ h ซึ่งมีช่วงข้อมูลแสดงดังตารางที่ 34 พร้อมวัดค่าการดูดกลืนแสงและปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมด้วยวิธี Multiplicative scatter correction (MSC) จากนั้นนำชุดข้อมูลค่าเคมีและกายภาพแต่ละค่า กับข้อมูลสเปกตรัมมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธี PLSR, MWPLSR และ SCMWPLSR พบว่าสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี SCMWPLSR เป็นสมการทำนายที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณ TSS น้ำตาลรีดิวซ์ และน้ำตาลทั้งหมด โดยมีค่า R_{cal} และ RMSEP เท่ากับ 0.992 และ 0.85°Brix , 0.959 และ 4.13 %w/w และ 0.956 และ $1.73\%\text{w/w}$ ตามลำดับ ในขณะที่สมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี MWPLSR เป็นสมการทำนายที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณกรดทั้งหมด ค่า pH ค่าสี L^* , a^* , b^* , C^* และ h โดยมีค่า R_{cal} และ RMSEP เท่ากับ 0.938 และ 0.08%w/w, 0.692 และ 0.16, 0.514 และ 3.82, 0.502 และ 2.39, 0.566 และ 6.10, 0.600 และ 4.30 และ 0.537 และ 3.21° ตามลำดับ ซึ่งสมการทำนายที่สร้างขึ้นด้วยวิธีที่เหมาะสม เพื่อทำนายปริมาณ

TSS น้ำตาลรีดิวซ์ น้ำตาลทั้งหมด และกรดทั้งหมด สามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการควบคุมคุณภาพได้ แต่สมการทำนายค่า pH ค่าสี L* a* b* C* และ h ไม่สามารถใช้เป็นสมการทำนายได้

ตารางที่ 34 จำนวนตัวอย่าง และช่วงข้อมูลของค่าเคมี ค่ากายภาพ และค่าความเผ็ดทางประสาทสัมผัส ของน้ำจิ้มไก่

ค่าคุณภาพ	N	กลุ่ม Calibration		กลุ่ม Validation	
		n1	ช่วงข้อมูล	n2	ช่วงข้อมูล
TSS (°Brix)	180	126	34.25 - 68.40	54	35.50 - 58.80
น้ำตาลรีดิวซ์ (%w/w)	180	126	4.67 - 53.55	54	5.47 - 50.04
น้ำตาลทั้งหมด (%w/w)	180	126	27.26 - 54.33	54	29.46 - 53.57
กรดทั้งหมด (%w/w)	180	126	0.14 - 1.22	54	0.16 - 1.09
pH	180	126	2.72 - 4.03	54	2.79 - 3.88
ค่าสี L*	180	126	9.26 - 38.92	54	17.94 - 35.98
ค่าสี a*	180	126	18.94 - 37.03	54	19.84 - 34.59
ค่าสี b*	180	126	10.60 - 58.68	54	15.73 - 48.03
ค่าสี C*	180	126	29.03 - 63.24	54	29.03 - 57.46
ค่าสี h (°)	180	126	38.02 - 60.31	54	41.39 - 58.07
แคปไซซิน (mg/kg)	100	70	3.97 - 44.92	30	5.37-34.56
SHU	100	70	194.00 - 2642.00	30	274.00 - 2350.00
ความเผ็ดโดยรวม	50	35	0.48 - 3.53	15	0.60 - 2.84
ความเผ็ดลิ้น	50	35	0.47 - 3.47	15	0.53 - 2.49
ความเผ็ดเพดานและช่องปาก	50	35	0.35 - 3.25	15	0.44 - 2.03
ความเผ็ดคอ	50	35	0.29 - 3.19	15	0.50 - 2.13

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

n1 หมายถึง จำนวนตัวอย่างที่ใช้ในกลุ่ม Calibration

n2 หมายถึง จำนวนตัวอย่างที่ใช้ในกลุ่ม Validation

3. การสร้างสมการทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ โดยวิเคราะห์คุณภาพทางเคมี ได้แก่ ปริมาณแคปไซซินและค่า SHU และคุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ด โดยมีรายละเอียด ดังนี้

3.1 การสร้างสมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ใช้น้ำจิ้มไก่ 100 ตัวอย่าง ทำการวิเคราะห์ปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ซึ่งมีช่วงข้อมูลแสดงในตารางที่ 34 พร้อมวัดค่าการดูดกลืนแสงและปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมเช่นเดียวกับวิธีที่กล่าวมาข้างต้น พบว่าสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี MWPLSR เป็นสมการทำนายที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU โดยมีค่า R_{cal} และ RMSEP เท่ากับ 0.964 และ 2.80 mg/kg และ 0.941 และ 223.45 SHU ตามลำดับ สมการทำนายปริมาณแคปไซซินและค่า SHU ที่สร้างขึ้นสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการควบคุมคุณภาพได้ แต่ไม่เหมาะในการทำนายตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่มีปริมาณแคปไซซินหรือค่า SHU น้อย เนื่องจากค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทำนายสูง

3.2 การสร้างสมการทำนายคุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านความเผ็ด ใช้น้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง ใช้ผู้ทดสอบที่ผ่านการฝึกฝน 10 คน ทำการประเมินระดับความเผ็ดโดยรวม ความเผ็ดลิ้น ความเผ็ดเพดานและช่องปาก และความเผ็ดคอของน้ำจิ้มไก่ ซึ่งมีช่วงข้อมูลแสดงในตารางที่ 34 พร้อมวัดค่าการดูดกลืนแสงและปรับแต่งข้อมูลสเปกตรัมเช่นเดียวกับวิธีที่กล่าวมาข้างต้น จากนั้นนำชุดข้อมูลค่าความเผ็ดแต่ละค่า กับข้อมูลสเปกตรัมมาหาความสัมพันธ์ด้วยวิธี PLSR, MWPLSR, SCMWPLSR และ BP-ANN พบว่าสมการทำนายที่สร้างด้วยวิธี BP-ANN โดยใช้จำนวนข้อมูลนำเข้าและโครงสร้างไฮประสาทเทียมที่เหมาะสม เป็นสมการทำนายที่เหมาะสมที่สุดในการทำนายความเผ็ดโดยรวม ความเผ็ดลิ้น ความเผ็ดเพดานและช่องปาก และความเผ็ดคอ โดยมีค่า R_{cal} และ RMSEP เท่ากับ 0.910 และ 0.45, 0.870 และ 0.32, 0.831 และ 0.33 และ 0.820 และ 0.33 ตามลำดับ ซึ่งสมการทำนายความเผ็ดที่สร้างขึ้นสามารถนำไปประยุกต์ใช้งานได้ในระดับการคัดเลือกคุณภาพ

ข้อเสนอแนะ

1. งานวิจัยครั้งนี้ทำการวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร เพื่อสร้างสมการทำนายคุณภาพของน้ำจิ้มไก่ โดยสมการทำนายค่าสี (L^* , a^* , b^* , C^* และ h) มีประสิทธิภาพในการทำนายต่ำ ซึ่งอาจจะทำการศึกษาเพิ่มเติมโดยเพิ่มช่วงความยาวคลื่นแสงที่ตามองเห็นเข้าร่วมกับช่วง NIR ใช้ช่วงความยาวคลื่น 400-2500 นาโนเมตร (Visible-NIR light) เพื่อปรับปรุงให้การสร้างสมการทำนายค่าสีดีขึ้น แล้วเปรียบเทียบผลการทดลองที่ได้จากการใช้ความยาวคลื่นทั้ง 2 ช่วง

2. การสร้างสมการทำนายความเผ็ดทางประสาทสัมผัส ใช้ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ 50 ตัวอย่าง ซึ่งการสร้างสมการทำนายความเผ็ดด้วยวิธี BP-ANN เป็นเพียงการศึกษาความเป็นไปได้ในการสร้างสมการทำนายโดยใช้วิธีการสร้างสมการแบบไม่เป็นเชิงเส้น (Non-linear) เปรียบเทียบกับการสร้างสมการทำนายด้วยวิธี PLSR ซึ่งเป็นวิธีการสร้างสมการแบบเชิงเส้น (Linear) อย่างไรก็ตามวิธี BP-ANN เป็นโครงข่ายประสาทเทียมแบบหนึ่ง จำเป็นต้องใช้ข้อมูลจำนวนมากในการสร้างสมการ ดังนั้นจึงควรเก็บตัวอย่างน้ำจิ้มไก่เพิ่มเติม เพื่อปรับปรุงประสิทธิภาพของสมการที่สร้างขึ้นเพื่อทำนายความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่

3. ในงานวิจัยนี้ทำการสร้างสมการทำนายคุณภาพประสาทสัมผัสเฉพาะด้านความเผ็ด ดังนั้นอาจทำการวิเคราะห์คุณภาพทางประสาทสัมผัสด้านอื่นๆ ของน้ำจิ้มไก่เพิ่มเติม เพื่อให้การประยุกต์ใช้เทคนิค NIRS ครอบคลุมการตรวจสอบคุณภาพน้ำจิ้มไ้มากยิ่งขึ้น

เอกสารและสิ่งอ้างอิง

ฐานเศรษฐกิจ. 2550. กรุงเทพฯ: 28 ตุลาคม 2550. หน้า 8.

ทิพย์นัตร์ ทิพย์บำรุง. 2548. การวิเคราะห์ความไร้เสถียรภาพการส่งออกผลิตภัณฑ์สิ่งปฐยุธอาหารของประเทศไทย. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

ปณัฐ เจริญ, ธงชัย สุวรรณสิขณน์ และ จินตนา อุปติสสกุล. 2551. ลักษณะทางประสาทสัมผัสและการจัดกลุ่มผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่ในประเทศไทย, น. 57-64. ใน รายงานการประชุมทางวิชาการของมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ครั้งที่ 46 (สาขาอุตสาหกรรมเกษตร). มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

ปารมี เฟื่องปรีชา และ ทิพยา จุลหวิ ฟอร์จูน. 2553. เรื่องเผ็ดๆ ของพริก. แหล่งที่มา: <http://opac.tistr.or.th/Multimedia/STJN/4903/4903-10.pdf>, 15 มีนาคม 2553.

ฟิสิกส์ราชวมงคล. 2553. น้ำจิ้มไก่แบบอุตสาหกรรม. แหล่งที่มา: http://www.neutron.rmutphysics.com/teaching-glossary/index.php?option=com_content&task=view&id=7045&Itemid=3, 15 มีนาคม 2553.

รณฤทธิ์ ฤทธิธิน. 2552. การสร้างระบบ NIR สำหรับการวิเคราะห์ประจำวัน. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิผลทางเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร. มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

รพีพร ตลับใหม่. 2551. การพัฒนากระบวนการผลิตมะกรูดเชื่อมอบแห้งด้วยเทคนิคเครือข่ายประสาทเทียม. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

รวีพิมพ์ ฦวิสุข. 2551. เอกสารประกอบการสอนวิชาเครือข่ายหน่วยประสาทเทียมและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมเกษตร. ภาควิชาเทคโนโลยีการจัดการอุตสาหกรรมเกษตร คณะอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

วลัยพร เตียประสิทธิ์. 2548. การทำนายค่าปริมาณของแข็งที่ละลายได้ ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ และ ปริมาณกรด ทั้งหมด ของชมพูพันธุ์ทับทิมจันทร์ เพชรสามพราน และทุลเกล้า ด้วยเทคนิค Near Infrared Spectroscopy. วิทยานิพนธ์ปริญญาโท, มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.

วารุณี ธนะแพสย์. 2552. สถานการณ์การใช้ประโยชน์เทคนิคสเปกโตรสโกปีอินฟราเรดย่านใกล้ ในประเทศไทย. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. สถาบัน ค้นคว้าและพัฒนาผลผลิตทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร. มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

ศิวลักษณ์ ปฐวิรัตน์ และ อนุพันธ์ เทิดวงศ์วรกุล. 2552. เครื่องมือและอุปกรณ์สเปกโตรสโกปี อินฟราเรดย่านใกล้. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. สถาบัน ค้นคว้าและพัฒนาผลผลิตทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร. มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

ศิวพร ศิวเวช. 2546. วัตถุเจือปนอาหารในผลิตภัณฑ์อาหาร. โรงพิมพ์ศูนย์ส่งเสริมและ ฝึกอบรมการเกษตรแห่งชาติ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, นครปฐม.

ศุมาพร เกษมสำราญ. 2552. หลักการพื้นฐานของสเปกโตรสโกปีอินฟราเรดย่านใกล้. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผล ผลิตทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร. มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

ศูนย์ข้อมูลอาหาร มหาวิทยาลัยมหิดล. 2553. เครื่องปรุงรสเกลือ-น้ำตาลต่ำ ทางเลือกใหม่ของคน รักสุขภาพ. แหล่งที่มา: http://webdb.dmsc.moph.go.th/ifc_food/a_fd_2_00t1.asp?info_id=216, 15 มีนาคม 2553.

ศูนย์วิจัยเพื่ออุตสาหกรรมอาหาร. 2553. อุตสาหกรรมเครื่องเทศและเครื่องปรุงรส. อุตสาหกรรมอาหารไทย. แหล่งที่มา: <http://fic.nfi.or.th/th/thaifood/product52-condiment.asp>, 7 มีนาคม 2553.

สัญญา หกพุดชา. 2553. การวิเคราะห์หาปริมาณสารให้ความเผ็ด (capsaicinoids) ในผลพริกโดยเทคนิคไฮเพอร์ฟอร์แมนซ์ ลิกวิด โครมาโทกราฟี. แหล่งที่มา:

<http://www.trf.or.th/research/abstract/Thai/RDG4920011.txt>, 15 มีนาคม 2553.

สายวรุพ ชัยวานิชศิริ. 2551. การศึกษาหาเอกลักษณ์ของผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่และซอสพริกศรีราชาของไทย. แหล่งที่มา: <http://rde.biotech.or.th/rdedocs/Proposal/667PP/AbstractTh.doc>, 5 พฤษภาคม 2551.

สำนักงานคณะกรรมการอาหารและยา กระทรวงสาธารณสุข. 2546. พระราชบัญญัติอาหาร พ.ศ. 2522 พร้อมกฎกระทรวงและประกาศกระทรวงสาธารณสุข. ฉบับที่ 201 (พ.ศ. 2543).

สำนักงานมาตรฐานผลิตภัณฑ์อุตสาหกรรม. 2547. มาตรฐานผลิตภัณฑ์ชุมชนน้ำจิ้มไก่. มผช. 514-2547.

อนุพันธ์ เทิดวงศ์วรกุล. 2552. การปรับแต่งสเปกตรัมก่อนการวิเคราะห์. ใน เทคโนโลยีอินฟราเรดย่านใกล้ในอุตสาหกรรมเกษตร. สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลิตผลทางการเกษตรและอุตสาหกรรมเกษตร. มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์, กรุงเทพฯ.

Abeni, F. and G. Bergoglio. 2001. Characterization of different strains of broiler chicken by carcass measurements, chemical and physical parameters and NIRS on breast muscle. **Meat Science** 57: 133-137.

Allison, A.A., E. Chambers IV, G.A. Milliken and D.H. Chambers. 1999. Effects of interstimulus rinsing and time on measurements of capsaicin heat in tomato salsa. **Journal of Sensory Studies** 14 (4): 401-414.

AOAC. 2006. **Official Methods of Analysis**. 18th ed., The Association of Official Analytical Chemists, Maryland, U.S.A.

- Balabin, R.M., R.Z. Safieva and E.I. Lomakina. 2007. Comparison of linear and nonlinear calibration models based on near infrared (NIR) spectroscopy data for gasoline properties prediction. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems** 88: 183-188.
- Baylor University. 2010. **Spectroscopy**. Available Source:
<http://www.baylor.edu/bucas/index.php?id=37025>, March 10, 2010.
- Brunet, D., B.G. Barthes, J. Chotte and C. Feller. 2007. Determination of carbon and nitrogen contents in Alfisols, Oxisols and Ultisols from Africa and Brazil using NIRS analysis: Effects of sample grinding and set heterogeneity. **Geoderma** 139: 106-117.
- Chippie, A.L., P.R. Jamieson, C.M. Golt, C.H. Hsu and Y.M. Lo. 2002. Quantitative analysis of fat and moisture in mayonnaise using fourier transform infrared spectrometer. **International Journal of Food Properties** 5: 655-665.
- Chung, H. and M.S. Ku. 2003. Feasibility of monitoring acetic acid process using near-infrared spectroscopy. **Vibrational Spectroscopy** 31: 125-131.
- Clément, A., M. Dorais and M. Vernon. 2008. Nondestructive measurement of fresh tomato lycopene content and other physicochemical characteristics using Visible-NIR spectroscopy. **J. Agric. Food Chem.** 56: 9813-9818.
- Demuth, H. and M. Beale. 2002. **Neural Network Toolbox for Use with MATLAB for User's Guide**. The Math Works, Inc, The United States.
- Downey, G., V. Fouratier and J.D. Kelly. 2003. Detection of honey adulteration by addition of fructose and glucose using near infrared transreflectance spectroscopy. **J. Near Infrared Spectrosc.** 11 (6): 447-456.

- Downey, G., E. Sheehan, C. Delahunty, D. O'Callaghan, T. Guinee and V. Howard. 2005. Prediction of maturity and sensory attributes of Cheddar cheese using near-infrared spectroscopy. **International Dairy Journal** 15: 701-709.
- Du, Y.P., Y.Z. Liang, J.H. Jiang, R.J. Berry and Y. Ozaki. 2004. Spectral regions selection to improve prediction ability of PLS models by changeable size moving window partial least squares and searching combination moving window partial least squares. **Anal. Chim. Acta**. 501: 183-191.
- Esteban-Díez, I., J.M. Gonzáiz and C. Pizarro. 2004. Prediction of sensory properties of espresso from roasted coffee samples by near-infrared spectroscopy. **Analytica Chimica Acta** 525: 171-182.
- García-Alvarez, M., S. Ceresuela, J.F. Huidobro, M. Hermida and J.L. Rodríguez-Otero. 2002. Determination of polarimetric parameters of honey by near-infrared transreflectance spectroscopy. **J. Agric. Food Chem.** 50: 419-425.
- Henninge, J. 2010. **Wilbur Scoville & pepper chemistry**. Available Source: <http://www.g6csy.net/chile/scoville.html>, March 10, 2010.
- Hruschka, W.R. 1990. Data analysis: wavelength selection methods. In P. Williams and K. Norris., eds. **Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries**. American Association of Cereal Chemists, Inc.
- Iizuka, K. and T. Aishima. 1997. Soy sauce classification by geographic region based on NIR spectra and chemometrics pattern recognition. **Journal of Food Science** 62 (1): 101-104.
- Janik, L.J., D. Cozzolino, R. Damberg, W. Cynkar and M. Gishen. 2007. The prediction of total anthocyanin concentration in red-grape homogenates using visible-near-infrared spectroscopy and artificial neural networks. **Analytica Chimica Acta** 594: 107-118.

- Jiang, J.H., R.J. Berry, H.W. Siesler and Y. Ozaki. 2002. Wavelength interval selection in multicomponent spectral analysis by moving window partial leastsquares regression with applications to mid-infrared and near-infrared spectroscopic data. **Anal. Chem.** 74: 3555-3565.
- Karoui, R., L. Pillonel, E. Schaller, J.O. Bosset and J.D. Baerdemaeker. 2006. Prediction of sensory attributes of European Emmental cheese using near-infrared spectroscopy: A feasibility study. **Food Chemistry** 101: 1121-1129.
- Kasemsumran, S., W. Thanapase and A. Kiatsoonthon. 2007. Feasibility of near-infrared spectroscopy to detect and to quantify adulterants in cow milk. **Analytical sciences** 23: 907-910.
- _____, Y.P. Du, K. Murayama, M. Huehne and Y. Ozaki. 2003. Simultaneous determination of human serum albumin, γ -globulin, and glucose in a phosphate buffer solution by near-infrared spectroscopy with moving window partial least-squares regression. **Analyst** 128: 1471-1477.
- Lee, S.M., S.N. Kim, J.B. Park and I.K. Hwang. 2005. Prediction of chemical compositions for on-line quality measurement of red pepper powder using near infrared reflectance spectroscopy (NIRS). **Food Science and Biotechnology** 14 (2): 280-285.
- Liu, F., F. Zhang, Z. Jin, Y. He, H. Fang, Q. Ye and W. Zhou. 2008. Determination of acetolactate synthase activity and protein content of oilseed rape (*Brassica napus* L.) leaves using visible/near-infrared spectroscopy. **Analytica Chimica Acta** 629: 56-65.
- Liu, Y., X. Sun and A. Ouyang. 2010. Nondestructive measurement of soluble solid content of navel orange fruit by visible-NIR spectrometric technique with PLSR and PCA-BPNN. **LWT-Food Science and Technology** 43: 602-607.

- Lu, J.H., W.L. Guo, Y.B. Zhang, T.T. Li, Y.Z. Wang and L.R. Teng. 2007. Application of principal component analysis-artificial neural network in near infrared spectroscopy for determination of compound rifampicin tablets, pp. 262-267. *In Proceedings of the Third International Conference on Natural Computation 2007*, ICNC, China.
- Lucas, A., D. Andueza, E. Rock and B. Martin. 2008. Prediction of dry matter, fat, pH, vitamins, minerals, carotenoids, total antioxidant capacity, and color in fresh and freeze-dried cheeses by visible-near-infrared reflectance spectroscopy. **J. Agric. Food Chem.** 56: 6801-6808.
- Nasrawi, C.W. and R.M. Pangborn. 1990. Temporal effectiveness of mouth-rinsing on capsaicin mouth-burn. **Physiology & Behavior** 47: 617-623.
- Norris, K.H. and P.C. Williams. 1984. Optimization of mathematical treatment of raw near-infrared signal in the measurement of protein in hard red spring wheat **I**. Influence of particle size. **Cereal Chem.** 61: 158 – 165.
- Osborne, B.G., T. Fearn and P.H. Hindle. 1993. **Practical NIR spectroscopy with application in food and beverage analysis**. Longman scientific and technical.
- Park T.S., Y.M. Bae, M.J. Sim and D.E. Kim. 2008. Analysis of capsaicinoids from hot red pepper powder by near-infrared spectroscopy. **American Society of Agricultural and Biological Engineers**.
- Pedro, A.K. and M.C. Ferreira. 2007. Simultaneously calibrating solids, sugars and acidity of tomato products using PLS2 and NIR spectroscopy. **Analytica Chimica Acta** 595: 221-227.
- Prieto, N., S. Andrés, F.J. Giráldez, A.R. Mantecón and P. Lavín. 2008. Ability of near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) to estimate physical parameters of adult steers (oxen) and young cattle meat samples. **Meat Science** 79: 692-699.

- Qiu, P.Y., H.B. Ding, Y.K. Tang and R.J. Xu. 1999. Determination of chemical composition of commercial honey by near-infrared spectroscopy. **J. Agric. Food Chem.** 47: 2760-2765.
- Rambla, F. J., S. Garrigues and M. Guardia. 1997. PLS-NIR determination of total sugar, glucose, fructose and sucrose in aqueous solutions of fruit juices. **Analytica chimica acta** 344: 41-53.
- Ritthiruangdej, P. 2006. **Evaluation of Thai fish sauce qualities by near-infrared spectroscopy**. Ph.D. Thesis, Kasetsart University.
- _____ and T. Suwonshichon. 2007. Relationships between NIR spectra and sensory attributes of Thai commercial fish sauces. **Analytical Sciences** 23: 809-814.
- _____, S. Kasemsumran, T. Suwonsichon, V. Haruthaithanasan, W. Thanapase and Y. Ozaki. 2005. Determination of total nitrogen content, pH, density, refractive index, and brix in Thai fish sauces and their classification by near-infrared spectroscopy with searching combination moving window partial least squares. **Analyst** 130: 1439–1445.
- Roggo, Y., L. Duponchel and J.P. Huvenne. 2004. Quality evaluation of sugar beet (*Beta vulgaris*) by near-infrared spectroscopy. **J. Agric. Food Chem.** 52: 1055-1061.
- Saiz-Abajo, M.J., J. Gonzalez-Saiz and C. Pizarro. 2004. Classification of wine and alcohol vinegar samples based on near-infrared spectroscopy, Feasibility study on the detection of adulterated vinegar samples. **J. Agric. Food Chem.** 52 (25): 7711 -7719.
- Savenije, B., G.H. Geesink, J.G.P. van der Palen and G. Hemke. 2006. Prediction of pork quality using visible/near-infrared reflectance spectroscopy. **Meat Science** 73: 181-184.
- Shao, Y. and Y. He. 2009. Measurement of soluble solids content and pH of yogurt using visible /near infrared spectroscopy and chemometrics. **Food Bioprocess Technol** 2: 229-233.

Shim, M.J. 2009. **Measurement of spicy taste in red pepper powder using near infrared spectroscopy**. M.S. Thesis, Seoul National University.

Terhoeven-Urselmans, T., H. Schmidt, R.G. Joergensen and B. Ludwig. 2008. Usefulness of near-infrared spectroscopy to determine biological and chemical soil properties: Importance of sample pre-treatment. **Soil Biology & Biochemistry** 40: 1178-1188.

Wikipedia. 2010. **Capsaicin**. Available Source: <http://en.wikipedia.org/wiki/Capsaicin>, March 10, 2010.

Williams, P. 2007. **Near-infrared technology-getting the best out of light**. PDK Grain, Canada.

_____ and K. Norris. 1990. **Near-infrared technology in the agriculture and food industries**. American Association of Cereal Chemists, Inc.

Woodcock, T., G. Downey, J.D. Kelly and C. O'Donnell. 2007. Geographical classification of honey samples by near-infrared spectroscopy: A feasibility study. **J. Agric. Food Chem.** 55: 9128-9134.

Xie, L., X. Ye, D. Liu and Y. Ying. 2009. Quantification of glucose, fructose and sucrose in bayberry juice by NIR and PLS. **Food Chemistry** 114: 1135-1140.

Yang, H. and Y. He. 2008. Design and implement of variety discriminator of fragrant mushrooms based on Vis/NIR spectroscopy and BP-ANN, pp. 2727-2730. *In* **Proceedings of the IEEE International Conference on Automation and Logistics**. September 2008, Qingdao, China.

Yano, T., T. Aimi, Y. Nakano and M. Tamai. 1997. Prediction of the concentrations of ethanol and acetic acid in the culture broth of a rice vinegar fermentation using near-infrared spectroscopy. **Journal of Fermentation and Bioengineering** 84: 461-465.

Zhang, Y., Q. Cong, Y. Xie, J. Yang and B. Zhao. 2008. Quantitative analysis of routine chemical constituents in tobacco by near-infrared spectroscopy and support vector machine. **Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy** 71 (4): 1408-1413.







ภาคผนวก ก
วิธีวิเคราะห์คุณภาพทางเคมี

1. การวิเคราะห์ความเป็นกรดต่าง (pH)

ขั้นตอนการวิเคราะห์ดังต่อไปนี้

- 1.1 เทตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ 100 มิลลิลิตร บรรจุลงในปิกรอร์ขนาด 125 มิลลิลิตร
- 1.2 ปรับเทียบค่าเครื่อง pH meter โดยใช้สารละลายบัฟเฟอร์ที่ทราบค่า pH แน่นอน (pH 4 และ pH 7)
- 1.3 นำตัวอย่างไปวัดด้วยเครื่อง pH meter โดยจุ่มหัววัดเครื่อง pH meter ลงในตัวอย่าง ลึกประมาณ 4 เซนติเมตร รอจนค่า pH นิ่ง
- 1.4 อ่านและบันทึกค่า pH จากเครื่อง

2. การวิเคราะห์ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ และน้ำตาลทั้งหมดด้วยวิธี Lane and Eynon (AOAC, 2006)

2.1 สารเคมี

2.1.1 Fehling' A solution เตรียมโดยละลาย $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 62.28 กรัม ในน้ำกลั่น ปรับปริมาตรเป็น 1000 มิลลิลิตร ด้วยน้ำกลั่น เก็บในขวดสีชา

2.1.2 Fehling' B solution เตรียมโดยละลาย $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 346 กรัม และ NaOH 100 กรัมในน้ำกลั่น ปรับปริมาตรเป็น 1000 มิลลิลิตรด้วยน้ำกลั่น เก็บในขวดสีชา

2.1.3 Methylene blue 1% เตรียมโดยละลาย Methylene blue 1 กรัม ในน้ำกลั่น เติมน้ำกลั่นลงไปจนได้ปริมาตรครบ 100 มิลลิลิตร

2.1.4 Neutral lead acetate solution 10 % เตรียมโดยละลาย Neutral lead acetate 10 กรัม ในน้ำกลั่น เติมน้ำกลั่นลงไปจนได้ปริมาตรครบ 100 มิลลิลิตร

2.1.5 Potassium oxalate solution 10 % เตรียมโดยละลาย Potassium oxalate 10 กรัม ในน้ำกลั่น เติมน้ำกลั่นลงไปจนได้ปริมาตรครบ 100 มิลลิลิตร

2.1.6 Standard glucose solution เตรียมโดยละลาย glucose 0.2 กรัม ที่อบแห้งแล้ว ในน้ำกลั่น เติมน้ำกลั่นลงไปจนได้ปริมาตรครบ 100 มิลลิลิตร

2.2 ขั้นตอนการวิเคราะห์

2.2.1 การวิเคราะห์น้ำตาลรีดิวซ์

ก. ชั่งตัวอย่างในน้ำหนักที่แน่นอน ผสมน้ำกลั่น 100 มิลลิลิตร ใส่ในขวดปรับปริมาตรขนาด 250 มิลลิลิตร

ข. เติมสารละลาย lead acetate 2 มิลลิลิตร ทิ้งไว้ 10 นาที

ค. เติมสารละลาย Potassium oxalate ลงไป 2 มิลลิลิตร แล้วปรับปริมาตรเป็น 250 มิลลิลิตร แล้วกรองเอาตะกอนออก

ง. นำสารละลายที่ผ่านการกรองแล้วใส่บิวเรตไทเทรตกับ Fehling' A และ B อย่างละ 5 มิลลิลิตรที่บรรจุอยู่ในขวดรูปชมพู่ โดยปล่อยสารละลายลงมาก่อนถึงจุดยุติประมาณ 1 มิลลิลิตร แล้วทิ้งให้เดือดนาน 2 นาที

จ. เติมสารละลาย Methylene Blue 2 – 3 หยด แล้วไทเทรตต่อจนสารละลาย

เปลี่ยนเป็นสีแดงอิฐ บันทึกปริมาตรสารละลายตัวอย่างที่ใช้ไทเทรต แล้วคำนวณหาปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์

2.2.2 การวิเคราะห์น้ำตาลทั้งหมด

- ก. นำสารละลายที่ได้จากการกรองมาจำนวน 50-100 มิลลิลิตร ใส่ในบีกเกอร์ เติมสารละลาย HCl 50% จำนวน 5 มิลลิลิตร ต้มให้เดือดนาน 10 นาที
- ข. ทิ้งให้เย็น และทำให้เป็นกลางด้วย NaOH 50%
- ค. นำมาปรับปริมาตรด้วยน้ำกลั่นในขวดปรับปริมาตรขนาด 250 มิลลิลิตร (A_2)
- ง. ไทเทรตกับ Fehling's A และ B เช่นเดียวกับวิธีการหาปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์
- จ. บันทึกปริมาตรสารละลายตัวอย่างที่ใช้ไทเทรต แล้วคำนวณหาปริมาณน้ำตาลทั้งหมด

2.3 การคำนวณ

$$\text{Factor} = \frac{\text{ปริมาณน้ำตาลกลูโคส (กรัม)} \times \text{ปริมาตรน้ำตาลกลูโคส (มิลลิลิตร)}}{100}$$

$$\% \text{ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ (D}_1\text{)} = \frac{F \times 100 \times A_1}{\text{กรัมของตัวอย่างเริ่มต้น} \times \text{ปริมาตรสารละลายตัวอย่างที่ใช้ไทเทรต}}$$

$$\% \text{ปริมาณน้ำตาลทั้งหมด (D}_2\text{)} = \frac{F \times 100 \times A_2}{\text{กรัมของตัวอย่างเริ่มต้น} \times \text{ปริมาตรสารละลายตัวอย่างที่ใช้ไทเทรต}}$$

$$\% \text{ น้ำตาลซูโครส (S)} = 0.95 (D_2 - D_1)$$

A_1 และ A_2 หมายถึง ปริมาตรที่ใช้ในการเจือจางสารละลายตัวอย่าง ซึ่งมีค่าเท่ากับ 250 มิลลิลิตร

3. การวิเคราะห์ปริมาณกรดทั้งหมดด้วยการไทเทรต (AOAC, 2006)

3.1 สารเคมี

3.1.1 สารละลายมาตรฐาน NaOH ความเข้มข้น 0.1 N

3.1.2 สารละลายฟีนอล์ฟทาลีน 0.1% ในเอทิลแอลกอฮอล์ 95%

3.2 ขั้นตอนการวิเคราะห์

3.2.1 ชั่งน้ำหนักตัวอย่างประมาณ 10 กรัม แล้วนำมาปรับปริมาตรเป็น 250 มิลลิลิตร

3.2.2 ใช้ปิเปตดูดตัวอย่างออกมาประมาณ 20 มิลลิลิตรใส่ลงในขวดรูปชมพู่

3.2.3 หยดฟีนอล์ฟทาลีน 2–3 หยด แล้วนำมาไทเทรตกับ 0.1 NaOH จนกระทั่งถึงจุดยุติ คือ ตัวอย่างเปลี่ยนเป็นสีชมพูอ่อนนาน 30 วินาที

3.2.4 บันทึกปริมาตร NaOH ที่ใช้ไทเทรต แล้วคำนวณหาปริมาณกรดทั้งหมดในรูปกรดอะซิติกจากสูตร

$$\% \text{ กรดทั้งหมด} = \frac{V \times N \times \text{น้ำหนักสมมูลของกรด} \times 100}{W \times 1000}$$

เมื่อ V = ปริมาตรของสารละลายมาตรฐาน NaOH ที่ใช้ในการไทเทรต (มิลลิลิตร)

N = ความเข้มข้นของสารละลายมาตรฐาน NaOH

W = น้ำหนักตัวอย่าง (กรัม)

น้ำหนักสมมูลของกรดอะซิติก = 60.05

4. การวิเคราะห์ปริมาณแคปไซซิน (AOAC, 2006)

4.1 สารเคมี

4.1.1 เอทานอล 95%

4.1.2 อะซิโตน ACS เกรด

4.1.3 LC mobile phase เป็น Acetonitrile กับน้ำ ใช้ solvent หรือ equivalent เป็น LC เกรด โดยผสม acetonitrile 400 มิลลิลิตร กับน้ำ 600 มิลลิลิตร ที่มีกรดอะซิติกเข้มข้น 1% แล้วได้แก๊สด้วย Helium

4.1.4 N-vanillyl-n-nonanamide standard solutions เตรียมสารละลายแคปไซซินมาตรฐาน 2 แบบ คือ

ก. สารละลายมาตรฐาน A ความเข้มข้น 0.15 mg/ml เตรียมโดยชั่ง N-vanillyl-n-nonanamide 75 มิลลิกรัมใส่ขวดปรับปริมาตร ปรับปริมาตรด้วยเอทานอล แล้วผสมให้เข้ากัน ใช้สำหรับวิเคราะห์ pepper ทั้งหมด ยกเว้น chili pepper

ข. สารละลายมาตรฐาน B ความเข้มข้น 0.015 mg/ml เตรียมโดยเปิดสารละลายมาตรฐาน A 10 มิลลิลิตร ลงในขวดรูปปรับปริมาตรขนาด 100 มิลลิลิตร ปรับปริมาตรด้วยเอทานอล แล้วผสมให้เข้ากัน ใช้สำหรับวิเคราะห์ chili pepper

4.2 ขั้นตอนการวิเคราะห์

4.2.1 ทำการสกัดแคปไซซินในตัวอย่าง โดยชั่งตัวอย่าง 1-2 กรัม ใส่ขวดปรับปริมาตรขนาด 50 มิลลิลิตร ใส่อะซิโตน 5 มิลลิลิตร หมุนวนขวดอย่างรวดเร็วผสมจนเข้ากันดี จากนั้นใส่เอทานอล 3-5 มิลลิลิตร หมุนวนขวดอย่างรวดเร็วผสมจนเข้ากันดี ใส่เอทานอลประมาณ 5 ครั้ง แล้วจึงปรับปริมาตรด้วยเอทานอล

4.2.2 นำสารละลาย 5 มิลลิลิตรที่สกัดได้ใส่ C18 solid-phase extraction cartridge หรือ glass syringe ขนาด 10 มิลลิลิตร

4.2.3 กรองสารละลาย 1-4 มิลลิลิตร ด้วย syringe filter ขนาด 0.45 ไมครอน เก็บในขวดแก้ว (glass vial) ขนาดเล็ก

4.2.4 ฉีดเข้าเครื่อง HPLC

4.3 การคำนวณ

แคปไซซินอยด์ ประกอบด้วย 3 สารประกอบหลัก คือ nordihydrocapsaicin (N), capsaicin(C) and dihydrocapsaicin (D) การคำนวณความเผ็ดจะรวมสารประกอบทั้งสาม คิดค่าความเผ็ดในหน่วย Scoville heat units (SHU) โดย 1 μg total capsaicinoids/g มีค่าประมาณ 15 SHU มีสูตรการคำนวณดังนี้

$$\text{ค่า SHU} = N + C + D$$

โดยที่

$$N = (P_N/P_S) \times (C_S/W_T) \times (250/0.98) \times 9300$$

$$C = (P_C/P_S) \times (C_S/W_T) \times (250/0.89) \times 16100$$

$$D = (P_D/P_S) \times (C_S/W_T) \times (250/0.93) \times 16100$$

เมื่อ P_N , P_C และ P_D = average peak areas for nordihydrocapsaicin, capsaicin and dihydrocapsaicin, respectively, from duplicate injections

P_S = average peak areas of appropriate standard solution;

C_S = concentration of standard solution, mg/mL; W_T = weight of test portion, g



ภาคผนวก ข

วิธีวิเคราะห์คุณภาพทางกายภาพ

1. การวิเคราะห์ปริมาณของแข็งที่สามารถละลายได้ทั้งหมด (TSS)

ขั้นตอนการวิเคราะห์ดังต่อไปนี้

1.1 เทตัวอย่างน้ำจืด 100 มิลลิลิตร บรรจุลงในบีกเกอร์ขนาด 125 มิลลิลิตร ตั้งทิ้งไว้ที่อุณหภูมิห้อง จนตัวอย่างมีอุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส

1.2 ใช้ช้อนตักตัวอย่างเฉพาะส่วนที่เป็นของเหลวประมาณ 2 มิลลิลิตร (1-2 หยด) หยดลงบนแผ่นปริซึม (Prism) ของ Refractometer เกลี่ยตัวอย่างให้ทั่วไม่ให้มีช่องว่างหรือฟองอากาศ จากนั้นปิดแผ่นพลาสติก (Daylight plate)

1.3 ยก Refractometer ขึ้นส่องกับแสง อ่านค่า TSS ที่วัดได้ในหน่วยของسابริกซ์ ($^{\circ}\text{Brix}$)

2. การวิเคราะห์ค่าสี ระบบ CIE $L^*a^*b^*$

ขั้นตอนการวิเคราะห์ดังต่อไปนี้

2.1 ทำการปรับเทียบค่าเครื่องวัดค่าสี (Hunter Lab รุ่น Mini Scan XE Plus) กำหนดมุมมอง (Observer angle) 10 องศา และใช้แสงมาตรฐาน (Illuminant) ชนิด D65 ทำการวัดค่าสีในระบบ CIE $L^*a^*b^*$

2.2 เทตัวอย่างน้ำจืดลงในอุปกรณ์ใส่ตัวอย่างให้เต็ม (ปริมาตรประมาณ 2 ออนซ์) จากนั้นปิดอุปกรณ์ใส่ตัวอย่างด้วยฝาอะลูมิเนียมสีขาว

2.3 วางอุปกรณ์ใส่ตัวอย่างไว้ด้านบนเครื่องวัดค่าสี โดยให้ก้นถ้วยอยู่บนหัววัดของเครื่อง จากนั้นใช้ถ้วยอะลูมิเนียมสีดำครอบอุปกรณ์ใส่ตัวอย่างไว้ เพื่อกันแสงจากภายนอกเล็ดลอดเข้าไปขณะทำการวัดค่าสี

2.4 ทำการวัดค่าสี บันทึกค่าสี $L^*a^*b^*$ C^* และ h



1. ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่

ใช้ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ทั้งหมด 50 ตัวอย่าง การคัดเลือกตัวอย่างพิจารณาจากปริมาณ แคลปีไซซินที่ตรวจวิเคราะห์ได้ โดยทำการคัดเลือกตัวอย่างให้มีค่าแคลปีไซซินหรือค่าความเผ็ดครอบคลุมค่าความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ทั้งหมด

2. ผู้ทดสอบ

ผู้ทดสอบจำนวน 10 คน (ชาย 4 คน หญิง 6 คน) อายุ 22-28 ปี จากภาควิชาพัฒนาผลิตภัณฑ์ คณะอุตสาหกรรมเกษตร มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ เข้าร่วมการวิจัยครั้งนี้ โดยเป็นผู้ที่มีประสบการณ์ในการประเมินคุณภาพทางประสาทสัมผัสเชิงพรรณนา ทำการฝึกฝนผู้ทดสอบ ให้ชิมตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ แล้วฝึกการให้คะแนนระดับความเผ็ดของตัวอย่าง โดยเทียบกับสารละลาย แคลปีไซซินที่ใช้เป็นตัวอย่างอ้างอิง สารละลายแคลปีไซซินเตรียมตามวิธี ASTM (1994) ใช้ระดับความเข้มข้นเท่ากับ 0.8 และ 1.3 ppm ซึ่งมีคะแนนระดับความเผ็ดเท่ากับ 5 และ 10 ตามลำดับ

3. การประเมินตัวอย่าง

การประเมินตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ทำครั้งละ 4-5 ตัวอย่าง โดยเสนอตัวอย่างในถ้วยพลาสติกสีขาว พร้อมฝาปิด และใส่รหัสตัวอย่างด้วยเลขสุ่ม 3 หลัก ผู้ทดสอบทำการประเมินความเผ็ดใน 4 คุณลักษณะ ได้แก่ ความเผ็ดโดยรวม ความเผ็ดลิ้น ความเผ็ดเพดานและช่องปาก และความเผ็ดคอ โดยจำกัดความด้านความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่ แสดงดังตารางผนวกที่ ข1 ผู้ทดสอบดักตัวอย่างครั้งละ ½ ช้อนชา อมไว้ในปาก 5 วินาทีก่อนกลืน และระบุระดับความเผ็ดของตัวอย่าง 0-15 (น้อยไปมาก) ทำการทดสอบ 2 ครั้ง ในแต่ละตัวอย่าง

ตารางผนวกที่ ค1 คุณลักษณะและคำจำกัดความเผ็ดของน้ำจิ้มไก่

คุณลักษณะ	คำจำกัดความ	ตัวอย่างอ้างอิง (ระดับคะแนน)
ความเผ็ดโดยรวม (Overall heat intensity)	ความรู้สึกละสบ และเผ็ดร้อนภายในช่องปากและลำคอเนื่องมาจากสารให้ความเผ็ด (แคปไซซิน) ในพริก	สารละลายแคปไซซิน ความเข้มข้น 0.8 ppm = 5.0 ความเข้มข้น 1.3 ppm = 7.5
ความเผ็ดลิ้น (Tongue burn)	ความรู้สึกละสบ และเผ็ดร้อนที่ปรากฏบริเวณด้านหน้า ด้านข้าง ด้านหลัง หรือผิวหน้าของลิ้น เนื่องมาจากสารให้ความเผ็ด (แคปไซซิน) ในพริก	สารละลายแคปไซซิน ความเข้มข้น 0.8 ppm = 5.0 ความเข้มข้น 1.3 ppm = 7.5
ความเผ็ดเพดานและช่องปาก (Oral cavity burn)	ความรู้สึกละสบ และเผ็ดร้อนที่บริเวณช่องปาก ได้แก่ ริมฝีปาก เหงือก เพดานปาก และกระพุ้งแก้ม เนื่องมาจากสารให้ความเผ็ด (แคปไซซิน) ในพริก	สารละลายแคปไซซิน ความเข้มข้น 0.8 ppm = 5.0 ความเข้มข้น 1.3 ppm = 5.5
ความเผ็ดคอ (Throat burn)	ความรู้สึกละสบ และเผ็ดร้อนที่ปรากฏบริเวณลำคอ รวมไปถึงเพดานอ่อน เนื่องมาจากสารให้ความเผ็ด (แคปไซซิน) ในพริก	สารละลายแคปไซซิน ความเข้มข้น 0.8 ppm = 4.0 ความเข้มข้น 1.3 ppm = 6.5

ใบรายงานผลการทดสอบผลิตภัณฑ์น้ำจิ้มไก่

ผู้ทดสอบ.....

ตัวอย่าง.....

วันที่.....

คำแนะนำ : ทิ้งตัวอย่างไว้ในปากนาน 5 วินาทีก่อนกลืน หลังจากนั้นอีก 25 วินาทีจึงให้คะแนน

คุณลักษณะด้านความเผ็ด

1. ความเผ็ดโดยรวม (Overall heat intensity)

น้อย 0 0.5 1 1.5 2 2.5 3 3.5 4 4.5 5 5.5 6 6.5 7 7.5 8 8.5 9 9.5 10 10.5 11 11.5 12 12.5 13 13.5 14 14.5 15 มาก

2. ความเผ็ดบริเวณลิ้น (Tongue burn)

น้อย 0 0.5 1 1.5 2 2.5 3 3.5 4 4.5 5 5.5 6 6.5 7 7.5 8 8.5 9 9.5 10 10.5 11 11.5 12 12.5 13 13.5 14 14.5 15 มาก

3. ความเผ็ดบริเวณเพดานปาก (Oral cavity burn)

น้อย 0 0.5 1 1.5 2 2.5 3 3.5 4 4.5 5 5.5 6 6.5 7 7.5 8 8.5 9 9.5 10 10.5 11 11.5 12 12.5 13 13.5 14 14.5 15 มาก

4. ความเผ็ดบริเวณลำคอ (Throat burn)

น้อย 0 0.5 1 1.5 2 2.5 3 3.5 4 4.5 5 5.5 6 6.5 7 7.5 8 8.5 9 9.5 10 10.5 11 11.5 12 12.5 13 13.5 14 14.5 15 มาก



1. การวัดค่าการดูดกลืนแสงของน้ำจิ้มไก่

การวัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR มีรายละเอียดดังต่อไปนี้

1.1 นำตัวอย่างน้ำจิ้มไก่มาวัดค่าการดูดกลืนแสง โดยเทตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ประมาณ 20 มิลลิลิตร ลงในหลอดทดลองที่มีฝาปิดขนาด 40 มิลลิลิตร ดังแสดงภาพผนวกที่ ค1

1.2 ใส่หลอดทดลองใน Water bath ควบคุมให้มีอุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส เป็นเวลา 15 นาที จากนั้นบรรจุตัวอย่างลงอุปกรณ์สำหรับใส่ตัวอย่างชนิด British cup ที่มีความหนาของตัวอย่าง (Path length) 0.5 มิลลิเมตร ดังแสดงภาพผนวกที่ ค2

1.3 วัดค่าการดูดกลืนแสงด้วยเครื่อง NIR ทำการวัดด้วยหลักการส่องผ่านสะท้อน (Transflectance) ในช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร โดยบันทึกค่าทุก 2 นาโนเมตร จะได้ค่าการดูดกลืนแสง ($\log 1/R$) จำนวน 701 ค่า ทำการทดสอบตัวอย่างละ 2 ซ้ำ แล้วหาค่าเฉลี่ยการดูดกลืนแสงของแต่ละตัวอย่าง



ภาพผนวกที่ ง1 ตัวอย่างน้ำจิ้มไก่ที่บรรจุในหลอดทดลอง ก่อนนำไปควบคุมให้มีอุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียสใน Water bath

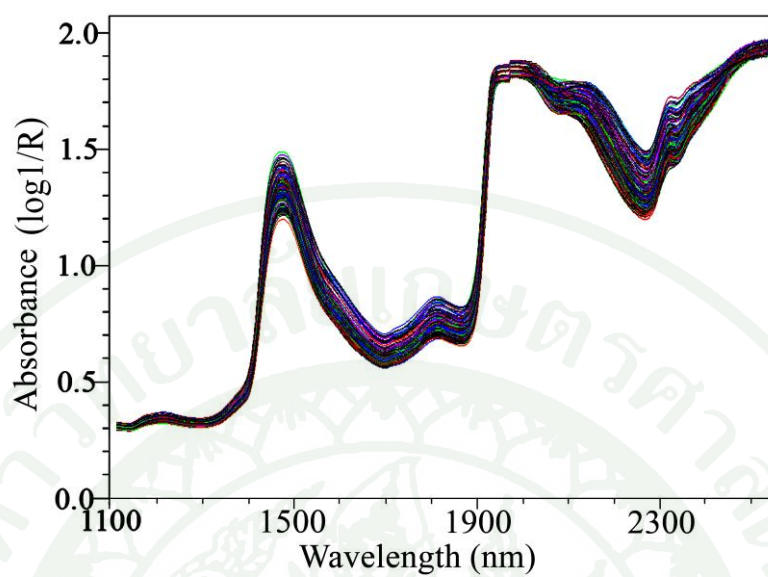


ภาพผนวกที่ ง2 อุปกรณ์ใส่ตัวอย่างชนิด British cup ที่มีความหนาของตัวอย่าง 0.5 มิลลิเมตร



ภาพผนวกที่ ง3 เครื่อง Near infrared (NIR) spectroscopy ยี่ห้อ BRAN + LUEBBE รุ่น
InfraAnalyzer 500 ประเทศเยอรมนี

2. ข้อมูลสเปกตรัมของน้ำจิ้มไก่ตลอดช่วงความยาวคลื่น (1100-2500 นาโนเมตร)



ภาพผนวกที่ ๔4 สเปกตรัมของน้ำจิ้มไก่ 180 ตัวอย่าง ที่ช่วงความยาวคลื่น 1100-2500 นาโนเมตร

ประวัติการศึกษา และการทำงาน

- ชื่อ –นามสกุล นางสาวกรกช วรณกุล
- วัน เดือน ปี ที่เกิด 8 กรกฎาคม พ.ศ. 2526
- สถานที่เกิด กรุงเทพฯ
- ประวัติการศึกษา วท.บ. (วิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีการอาหาร) เกียรตินิยมอันดับสอง มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ (พ.ศ. 2550)
- ผลงานทางวิชาการ Wannagul, K., T. Suwonsichon, W. Thanapase and S. Kasemsumran. 2008. Prediction of total soluble solids and total acidity of sweet chili sauces by near Infrared spectroscopy, pp. 206-207. *In Proceedings of the 1st Asian NIR Symposium*. 10-14th November 2008, Tsukuba, Japan.
- Wannagul, K., T. Suwonsichon, W. Thanapase and S. Kasemsumran. 2009. Prediction of total soluble solids, reducing sugar and total sugar of Thai sweet chili sauces by near infrared spectroscopy, pp. 77-84. *In Proceedings of the 47th Kasetsart University Annual Conference*. 17-20th March 2009, Bangkok, Thailand.
- Wannagul, K. and T. Suwonsichon. 2009. Determination of heat sensation of Thai sweet chili sauces by near infrared spectroscopy and back propagation neural network. *In Proceedings of Summer Program In Sensory Evaluation 2009*. 7-9th August 2009, Hochiminh, Vietnam.
- Wannagul, K., T. Suwonsichon, W. Thanapase and S. Kasemsumran. 2009. Capsaicin and scoville heat units (SHU) determination on Thai sweet sauces by near infrared spectroscopy. *In Proceedings of the 14th International Conference on Near Infrared Spectroscopy*. 9-13th November 2009, Bangkok, Thailand.