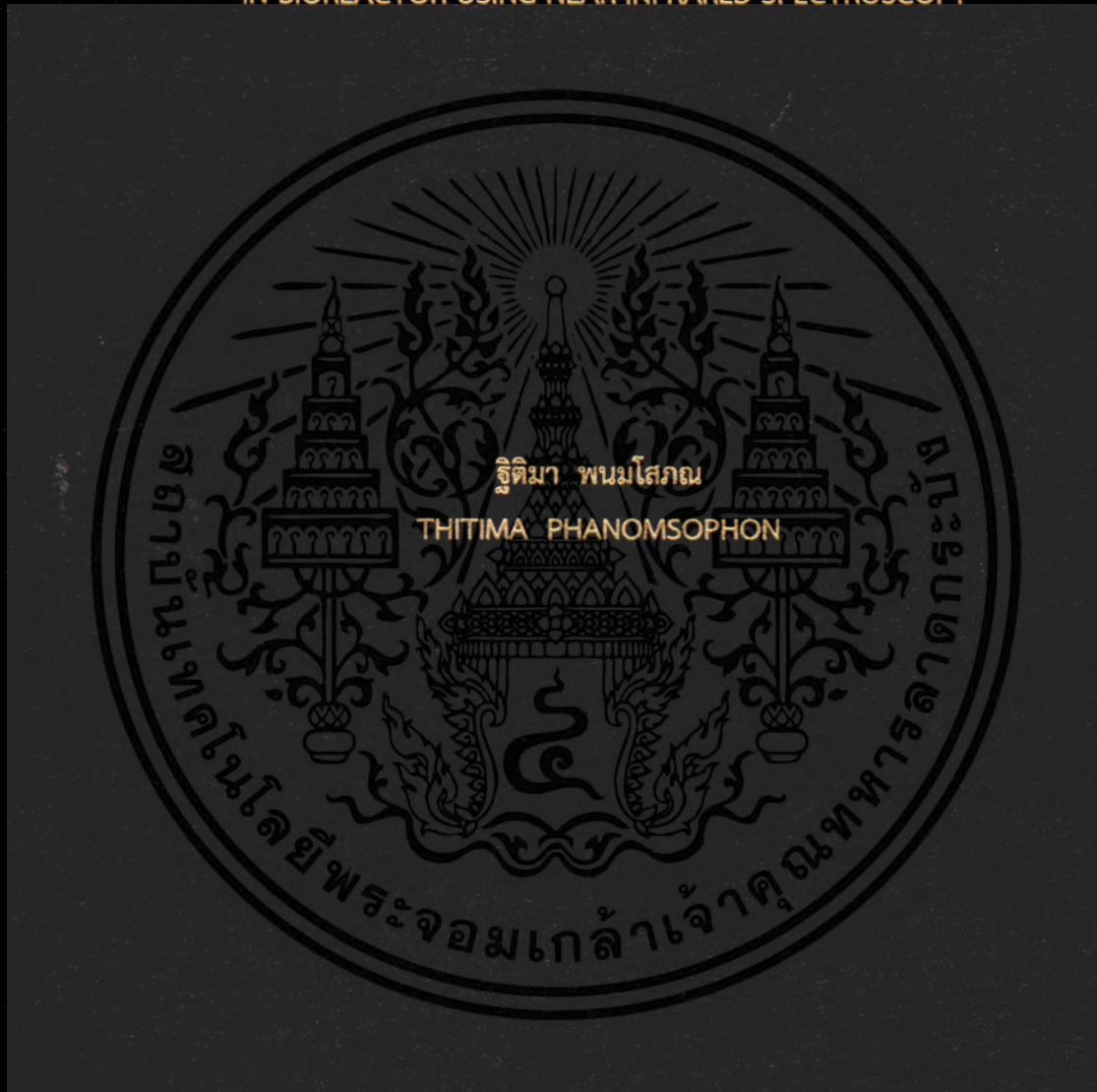


การติดตามความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลของน้ำส้มสายชูจากข้าว
ในถังหมักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

MONITORING OF ACETIC ACID AND ETHANOL CONCENTRATIONS OF RICE VINEGAR
IN BIOREACTOR USING NEAR INFRARED SPECTROSCOPY



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเกษตร

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

พ.ศ. 2561

KMITL-2018-EN-M-100-049

การติดตามความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลของน้ำส้มสายชูจากข้าว
ในถังหมักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

MONITORING OF ACETIC ACID AND ETHANOL CONCENTRATIONS OF RICE VINEGAR
IN BIOREACTOR USING NEAR INFRARED SPECTROSCOPY



ฐิติมา พนมโสภณ
THITIMA PHANOMSOPHON

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเกษตร

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

พ.ศ. 2561

KMITL-2018-EN-M-100-049

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การติดตามความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลของน้ำส้มสายชูจากข้าว
ในถังหมักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

MONITORING OF ACETIC ACID AND ETHANOL CONCENTRATIONS OF RICE VINEGAR
IN BIOREACTOR USING NEAR INFRARED SPECTROSCOPY



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเกษตร

คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

พ.ศ. 2561

KMITL-2018-EN-M-100-049

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

MONITORING OF ACETIC ACID AND ETHANOL CONCENTRATIONS OF RICE VINEGAR
IN BIOREACTOR USING NEAR INFRARED SPECTROSCOPY



THITIMA PHANOMSOPHON

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF
MASTER OF ENGINEERING IN AGRICULTURAL ENGINEERING
FACULTY OF ENGINEERING
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

2018

KMITL-2018-EN-M-100-049

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



COPYRIGHT 2018

FACULTY OF ENGINEERING

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

คณะวิศวกรรมศาสตร์
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ใบรับรองวิทยานิพนธ์

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การติดตามความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลของน้ำส้มสายชูจากข้าว
ในถังหมักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

Thesis Title Monitoring of Acetic Acid and Ethanol Concentrations of Rice Vinegar in
Bioreactor using Near Infrared Spectroscopy

นักศึกษา นางสาวฐิติมา พนมโสภณ

รหัสประจำตัว 60601138



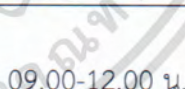
ปริญญา วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชา วิศวกรรมเกษตร

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ รศ.ดร.ปานมนัส ศิริสมบุญ

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม ศ.ดร.วราวุฒิ ครูสง

หมายเลขวิทยานิพนธ์ KMITL-2018-EN-M-100-049

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์		ลายมือชื่อ
รศ.ดร.อนุพันธ์	เทอดวงศ์วรกุล	
ผศ.ดร.ประสันท	ชุ่มใจหาญ	
ผศ.ดร.รวิภัทร	ลาภเจริญสุข	
ศ.ดร.วราวุฒิ	ครูสง	
รศ.ดร.ปานมนัส	ศิริสมบุญ	

วัน / เดือน / ปี ที่สอบ วันอังคารที่ 10 กรกฎาคม พ.ศ. 2561 เวลา 09.00-12.00 น.
สถานที่สอบ ณ ห้อง AE-302 อาคาร CCA

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

คณะวิศวกรรมศาสตร์ รับรองแล้ว



(รองศาสตราจารย์ ดร. คมสัน มาลีสี)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
โดยไม่ได้รับอนุญาตจากคณะวิศวกรรมศาสตร์
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้
วันที่ 10 กรกฎาคม พ.ศ. 2561

หัวข้อวิทยานิพนธ์

การติดตามความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลของ
น้ำส้มสายชูจากข้าวในถังหมักด้วยเนียร์อินฟราเรด
สเปกโทรสโกปี

นักศึกษา

นางสาวฐิติมา พนมโสภณ

รหัสประจำตัว

60601138

ปริญญา

วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชา

วิศวกรรมเกษตร

พ.ศ.

2561

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์

รศ.ดร.ปานมนัส ศิริสมบุญ

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ร่วม

ศ.ดร.วรารุณี ครูสง

บทคัดย่อ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้ นำเสนอการติดตามความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลของ
น้ำส้มสายชูจากข้าวในถังหมักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ในการหมักน้ำส้มสายชูจำเป็นต้องวัดค่า
ความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) และเอทานอล (ETC) ทุกวัน เพื่อหาความเข้มข้นรวม (TC) ของ
น้ำส้มสายชูตามที่ต้องการ โดยวิธีอ้างอิงในการวัดค่า AAC วัดได้จากการไทเทรต และการวัดค่า ETC วัด
ได้จากเครื่องอินฟราเรด ซึ่งในการวัดค่าอ้างอิงต้องใช้ผู้เชี่ยวชาญ และใช้ระยะเวลาในการวัด ดังนั้น
งานวิจัยนี้จึงเสนอการนำเทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีมาประยุกต์ใช้ทำนายค่า AAC และ ETC
เพื่อลดระยะเวลาในการวัดค่า และลดการสูญเสียปริมาณตัวอย่างในการวัดค่าในแต่ละครั้ง จากการวิจัย
พบว่าการสร้างแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี โดยวิเคราะห์ด้วย partial least squares
regression ด้วยวิธี test set โดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยเป็นแบบจำลองที่มีสมรรถนะ
ที่ดีกว่าแบบจำลองอื่นเพียงเล็กน้อย สำหรับการทำนายค่า AAC มีค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา (R^2), ค่า
ความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของแบบจำลอง (RMSEE), ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการ
ทำนาย (RMSEP), ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย (Bias) และ อัตราส่วนของพิสัยควอร์ไทล์ต่อค่าความ
คลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ย (RPIQ) เท่ากับ 0.959, 2.30 g/L, 2.44 g/L, 1.1100 g/L และ 9.26
ตามลำดับ แสดงว่าแบบจำลองนี้ สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพได้ และ
สำหรับการทำนายค่า ETC มี R^2 , RMSEE, RMSEP, Bias และ RPIQ เท่ากับ 0.938, 3.15 g/L, 2.73 g/L,
-0.3960 g/L และ 7.49 ตามลำดับ แสดงว่าแบบจำลองนี้สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึง
การประกันคุณภาพได้ และเมื่อทดลองทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จัก (unknown) พบว่าแบบจำลองการทำนาย
ค่า AAC และ ETC สามารถทำนายค่าได้

Thesis	Monitoring of acetic acid and ethanol concentrations of rice vinegar in bioreactor using near infrared spectroscopy
Student	Miss Thitima Phanomsophon
Student ID.	60601138
Degree	Master of Engineering
Program	Agricultural Engineering
Year	2018
Thesis Advisor	Assoc. Prof. Dr. Panmanas Sirisomboon
Thesis Co-advisor	Prof. Dr. Warawut Krusong

ABSTRACT

This thesis proposes to monitoring of acetic acid and ethanol concentrations of rice vinegar in bioreactor using near infrared spectroscopy. In vinegar fermentation, it is necessary to measure the concentration of acetic (AAC) and ethanol (ETC) daily to determine the total concentration of vinegar. The reference test for the AAC is titration method while that for the ETC is by the Ebulliometer. Both measurement methods must be taken by an expert. It also takes a long time to measure. This study, therefore, proposes the use of near infrared spectroscopy techniques to predict the AAC and ETC to reduce the duration of measurement. It also reduces sample loss in measurement. Result indicates that, the model developed by using the partial least squares regression (PLSR) by average of three spectra for 1 sample is better than other models. For predicting AAC, the coefficient of determination (R^2), root mean squares error of estimation (RMSEE), root mean squared error of prediction (RMSEP), bias and ratio of performance to inter-quartile range (RPIQ) was 0.959, 2.30 g/L, 2.44 g/L, 1.1100 g/L and 9.26 respectively. That means this model can be used in most applications. For predicting ETC, value of R^2 , RMSEE, RMSEP, Bias and RPIQ was 0.938, 3.15 g/L, 2.73 g/L, -0.3960 g/L and 7.49 respectively. That means this model can be used in most applications. When the models are applied to the unknown for validation, the models can be used for monitoring the acetic acid and ethanol.

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์เรื่องการติดตามความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลของน้ำส้มสายชูข้าวในถังหมักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสามารถลุล่วงไปได้ด้วยดี เนื่องจากได้รับความอนุเคราะห์และคำปรึกษาจากบุคคลหลายท่าน ตลอดทั้งให้ความรู้ในการทำวิจัยแก่ผู้จัดทำมาโดยตลอด ข้าพเจ้าขอขอบพระคุณหลักสูตรวิศวกรรมเกษตร สาขาวิศวกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ที่สนับสนุนเครื่องมือ สถานที่และงบประมาณในงานวิจัยนี้

ข้าพเจ้าขอขอบพระคุณ รศ. ดร.ปานมนัส ศิริสมบุรณ์ อาจารย์ที่ปรึกษา ที่ให้ความสนับสนุน แนะนำแนวทาง ให้ความกรุณาตรวจสอบผลงานและแก้ไขข้อบกพร่องในเอกสารให้มีความสมบูรณ์ รวมถึงให้ความช่วยเหลือในเรื่องต่างๆอย่างเต็มที่ ขอขอบพระคุณ ศ. ดร.วราวุฒิ ครุสง อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม ที่ให้ความอนุเคราะห์ตัวอย่างในการทำงานวิจัย และอนุญาตให้นักศึกษา สาขาเทคโนโลยีการหมัก คณะอุตสาหกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ช่วยวัดค่าอ้างอิงในงานวิจัย ข้าพเจ้าขอขอบคุณนักศึกษา สาขาเทคโนโลยีการหมัก คณะอุตสาหกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ที่ช่วยวัดค่าอ้างอิง และข้าพเจ้าขอขอบพระคุณ ดร.จิตรภาพ กังสวัสดิ์ และนางสุวัลณา คุณากาญจน์ เจ้าหน้าที่บริหารงานทั่วไป ประจำภาควิชาวิศวกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง ที่ช่วยเหลือในเรื่องต่างๆอย่างเต็มที่

สุดท้ายนี้ขอขอบพระคุณ บิดา มารดาที่เลี้ยงดู อบรมสั่งสอนและให้การศึกษาย่างเต็มที่ ทำให้ข้าพเจ้ามีวันนี้ได้ และยังให้กำลังใจ คำปรึกษาในทุกๆด้าน รวมถึงเป็นแรงผลักดันให้ข้าพเจ้าในการทำสิ่งต่างๆให้ประสบความสำเร็จ ตลอดจนครูอาจารย์ที่เคารพทุกท่านที่ได้ประสิทธิ์ประสาทวิชาความรู้และถ่ายทอดประสบการณ์ที่ดีให้แก่อข้าพเจ้า

จิตติมา พนมโสภณ

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	I
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	II
กิตติกรรมประกาศ.....	III
สารบัญ.....	IV
สารบัญตาราง.....	VIII
สารบัญรูป.....	X
รายการค้าย่อและสัญลักษณ์.....	XIII
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ความเป็นมาของปัญหา.....	1
1.2 ความมุ่งหมายและวัตถุประสงค์ของการศึกษา.....	2
1.3 ทฤษฎีหรือแนวความคิดที่ใช้ในการวิจัย.....	2
1.4 ขอบเขตการวิจัย.....	3
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	4
1.6 ขั้นตอนการดำเนินงาน.....	4
บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง.....	6
2.1 น้ำส้มสายชู.....	6
2.1.1 ไวน์ข้าว.....	7
2.1.2 น้ำส้มสายชูข้าว.....	7
2.2 ถังหมัก internal Venturi injector bioreactor.....	9
2.3 กรดอะซิติก.....	10
2.4 เอทานอล.....	11
2.5 การไทเทรต.....	11
2.6 อีบูลลิโอมิเตอร์.....	13
2.7 เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี.....	15
2.7.1 หลักการทำงานของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี.....	15
2.7.2 ขั้นตอนในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัม.....	16
2.7.3 การปรับแต่งข้อมูลก่อนการวิเคราะห์.....	17
2.7.4 ปัจจัยที่มีผลต่อการใช้เทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี.....	18

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
2.7.5 วิธีการสร้างสมการ calibration.....	19
2.7.6 วิธีการทดสอบสมการ (validation test).....	21
2.7.7 สมรรถนะของแบบจำลอง.....	22
2.8 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	26
บทที่ 3 วิธีการทดลอง.....	27
3.1 ตัวอย่าง.....	27
3.2 การสแกนด้วยคลื่นเนียร์อินฟราเรด.....	29
3.3 การวัดค่าอ้างอิง.....	30
3.3.1 ค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC).....	30
3.3.2 ค่าความเข้มข้นของเอทานอล (ETC).....	31
3.4 repeatability, reproducibility และ R^2_{max}	33
3.4.1 repeatability ของการสแกน.....	33
3.4.2 reproducibility ของการสแกน.....	33
3.4.3 repeatability ของวิธีอ้างอิง (Rep).....	34
3.4.4 ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณาสูงสุด (R^2_{max}).....	34
3.5 การวิเคราะห์ผลการทดลอง.....	35
3.5.1 วิเคราะห์ค่านอกกลุ่ม (outlier).....	35
3.5.2 การวิเคราะห์ผลการทดลองเบื้องต้น.....	36
3.5.3 การวิเคราะห์ลักษณะของสเปกตรัม.....	36
3.6 การสร้างและพิสูจน์แบบจำลอง.....	37
บทที่ 4 ผลการทดลอง.....	40
4.1 repeatability, reproducibility และ R^2_{max}	44
4.2 การวิเคราะห์สเปกตรัม.....	40
4.3 แบบจำลอง.....	41
4.3.1 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม.....	45
4.3.1.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation.....	45
4.3.1.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set.....	55
4.3.1.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง.....	66

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
4.3.2 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย....	66
4.3.2.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation.....	66
4.3.2.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set.....	77
4.3.2.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง.....	87
4.4 การเปรียบเทียบแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม กับ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย.....	87
4.5 ผลคูณของค่าการดูกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเป็น ๒ ส่วนกับ regression coefficient.....	88
4.5.1 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก.....	88
4.5.2 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของเอทานอล.....	89
4.6 พฤติกรรมเปลี่ยนแปลงค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอล.....	90
บทที่ 5 สรุปผลการทดลอง.....	91
5.1 repeatability, reproducibility และ R^2_{max}	91
5.2 การวิเคราะห์สเปกตรัม.....	91
5.3 แบบจำลอง.....	91
5.3.1 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม.....	91
5.3.1.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation.....	91
5.3.1.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set.....	92
5.3.1.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง.....	92
5.3.2 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม.....	92
5.3.2.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation.....	92
5.3.2.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set.....	92
5.3.2.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง.....	92
5.4 การเปรียบเทียบแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม กับ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย.....	92
5.5 สรุปผลจาก regression coefficient และ x-loading weight.....	93
5.6 ผลคูณของค่าการดูกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเป็น ๒ ส่วนกับ regression coefficient.....	93

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
4.5.1 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของกรดกรดอะซิติค.....	93
4.5.2 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของเอทานอล.....	93
5.7 พฤติกรรมการเปลี่ยนแปลงค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติคและเอทานอล.....	93
5.8 ข้อเสนอแนะ.....	94
เอกสารอ้างอิง.....	95
ภาคผนวก ก ผลการทดลอง.....	98
ภาคผนวก ข การสันเสีเอนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ.....	103
ภาคผนวก ค ผลงานที่ได้รับการเผยแพร่.....	109
ประวัติผู้เขียน.....	118



สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
2.1 การแปลความหมายของค่า R และ R^2	23
4.1 ค่าทางสถิติของ repeatability, reproducibility และ R^2_{max} สำหรับ NIR scanning และการวิเคราะห์ผลของค่า AAC และ ETC ด้วยวิธีอ้างอิง.....	40
4.2 ค่าสถิติของข้อมูลที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC.....	42
4.3 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLSR ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	49
4.4 การสัมพันธ์ของพินัธ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	52
4.5 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	55
4.6 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLSR ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	59
4.7 การสัมพันธ์ของพินัธ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set....	63
4.8 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	66
4.9 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLSR ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	70

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางที่	หน้า
4.10 การสัมพันธ์ของพินระ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	73
4.11 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	77
4.12 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLSR ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	81
4.13 การสัมพันธ์ของพินระ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set	84
4.14 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	87
4.15 การเปรียบเทียบค่า r^2	87
1ก คำอ้างอิงสำหรับค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) และเอทานอล (ETC).....	99
1ข การสัมพันธ์ของพินระเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ.....	104

สารบัญรูป

รูปที่	หน้า
1.1	โครงสร้างโมเลกุลของน้ำตาลผสมยuzu..... 2
1.2	Venturi injector bioreactor..... 3
1.3	ขั้นตอนการดำเนินงาน..... 5
2.1	ไวน์ข้าว..... 7
2.2	น้ำตาลผสมยuzu..... 8
2.3	ถังหมัก internal Venturi injector bioreactor..... 9
2.4	อุปกรณ์ไทเทรต..... 12
2.5	อิมพัลส์โอมิเตอร์..... 13
2.6	การอ่านค่าดีกรีของน้ำตาลที่ช่วยแผ่นเทียบดีกรีของเครื่องอิมพัลส์โอมิเตอร์..... 14
2.7	แบบการวัด..... 15
2.8	ขั้นตอนในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัม..... 16
3.1	น้ำตาลผสมยuzu..... 27
3.2	การหมักน้ำตาลผสมยuzuและการเก็บข้อมูลของค่าอ้างอิง..... 28
3.3	FT-NIR spectrometer..... 29
3.4	การเก็บข้อมูลของสเปกตรัม..... 29
3.5	การไทเทรต..... 30
3.6	การเก็บข้อมูลของค่า AAC..... 31
3.7	อิมพัลส์โอมิเตอร์..... 32
3.8	การเก็บข้อมูลของค่า ETC..... 32
3.9	การหาค่า repeatability และ reproducibility..... 33
3.10	การหาค่า R^2_{max} 34
3.11	การตัดข้อมูลที่มีย่านนอกกลุ่ม..... 35
3.12	การวิเคราะห์ผลการทดลองเบื้องต้น..... 36
3.13	การวิเคราะห์ลักษณะของสเปกตรัม..... 37
3.14	การสร้างและพิสูจน์แบบจำลอง..... 39
4.1	สเปกตรัมเฉลี่ยของน้ำตาลผสมยuzu กรดอะซิติกเข้มข้น และเอทานอลเข้มข้น..... 41
4.2	สเปกตรัมของน้ำตาลผสมยuzu ทั้งหมด..... 42
4.3	ความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงที่นำมาสร้างแบบจำลองด้วยวิธี cross validation. 43

สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่	หน้า
4.4 ความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงที่นำมาสร้างแบบจำลองด้วยวิธี test set.....	44
4.5 ความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก.....	44
4.6 สเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบ้ ๓๓๓ สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	46
4.7 กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	47
4.8 กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	48
4.9 กราฟ regression coefficient plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	50
4.10 กราฟ x-loading weight plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	51
4.11 การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation.....	54
4.12 สเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบ้ ๓๓๓ สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	56
4.13 กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	57
4.14 กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	58
4.15 กราฟ regression coefficient plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	61
4.16 กราฟ x-loading weight plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	62
4.17 การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set.....	65
4.18 สเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบ้ ๓๓๓ สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	67

4.19	กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	68
4.20	กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	69
4.21	กราฟ regression coefficient plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	71
4.22	กราฟ x-loading weight plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	72
4.23	การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation.....	76
4.24	สเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบสตัน สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	78
4.25	กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	79
4.26	กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	80
4.27	กราฟ regression coefficient plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	82
4.28	กราฟ x-loading weight plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	83
4.29	การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set.....	86
4.30	การคูณของค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นกับ regression coefficient สำหรับค่า AAC.....	88
4.31	การคูณของค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นกับ regression coefficient สำหรับค่า ETC.....	89
4.32	พฤติกรรมของการเปลี่ยนแปลงค่าความเข้มข้นของกรดอะซิกติกและเอทานอล.....	90

รายการคำย่อและสัญลักษณ์

คำย่อและสัญลักษณ์	ความหมาย
AAB	acetic acid bacteria
AAC	acetic acid concentration ความเข้มข้นของกรดอะซิติก
ETC	ethanol concentration ความเข้มข้นของเอทานอล
MLR	multiplicative scatter correction
NIR	near infrared เนียร์อินฟราเรด
PLSR	partial least squares regression
R ²	coefficient of determination ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา
Rep	repeatability ของวิธีอ้างอิง
RMSECV	root mean square error of cross validation ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้
RMSEE	root mean squares error of estimation ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของแบบจำลอง
RMSEP	root mean squared error of prediction ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการทำนาย
RPIQ	ratio of performance to inter-quartile range อัตราส่วนของพิสัยควอร์ไทล์ต่อค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ย
SEP	standard deviation of error of prediction ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของความคลาดเคลื่อนสำหรับการทำนาย
SNV	vector normalization
TC	total concentration ค่าความเข้มข้นรวม

บทที่ 1

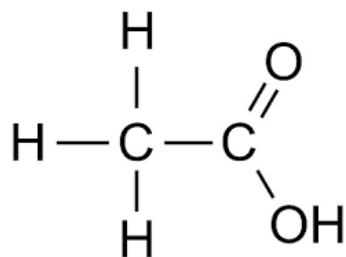
บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

น้ำส้มสายชูเป็นเครื่องปรุงชนิดหนึ่งที่เป็นที่นิยมในการปรุงรสอาหาร เพื่อให้เกิดรสเปรี้ยวและนิยมใช้ในการถนอมอาหาร น้ำส้มสายชูได้จากการหมักพืชเช่น ข้าว ข้าวโพด หรือผลไม้ เป็นต้น การผลิตน้ำส้มสายชูเป็นการหมักน้ำตาลให้เกิดเป็นแอลกอฮอล์โดยการใช้อีสต์ และหมักแอลกอฮอล์ให้เป็นกรดอะซิติกโดยใช้แบคทีเรียในสภาวะที่มีออกซิเจน เพื่อทำให้เกิดเป็นกรดที่มีรสชาติเปรี้ยว

ในการหมักน้ำส้มสายชูข้าวโดยการเพาะเชื้อน้ำส้มสายชู (acetic acid bacteria; AAB) จะมีการติดตามกระบวนการเกิดกรดอะซิติกในถังหมักทุกวัน จากการวัดค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (acetic acid concentration; AAC) และเอทานอล (ethanol concentration; ETC) ในถังหมัก โดยค่า AAC จะวัดได้จากการไทเทรตน้ำส้มสายชู โดยใช้ NaOH เป็นอินดิเคเตอร์ และค่า ETC จะวัดได้จากเครื่องอิมัลลิโอมิเตอร์ [1] เพื่อหาความเข้มข้นรวม (total concentration; TC) ที่ต้องการในการหมักน้ำส้มสายชู [1]

เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (NIR spectroscopy) [2] ซึ่งเป็นวิธีการวิเคราะห์ตัวอย่างได้อย่างรวดเร็วและไม่ทำลายตัวอย่างเนื่องจากไม่ต้องเตรียมตัวอย่าง และใช้สารเคมี โดยหลักการของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี คือการใช้คลื่นแสงในช่วงเนียร์อินฟราเรด (NIR) ส่งเข้าไปในตัวอย่าง ทำให้โมเลกุลของตัวอย่างดูดกลืนพลังงาน แล้วมีการเปลี่ยนแปลงของพันธะระหว่างอะตอมของคาร์บอนกับไฮโดรเจน C-H, ไนโตรเจนกับไฮโดรเจน N-H และออกซิเจนกับไฮโดรเจน O-H โดยเกิดการยืด-หด หรือบิด-งอ ในรูปแบบต่างๆ แล้วทำการตรวจวัดคลื่นแสงที่ไม่ถูกดูดกลืน ซึ่งสะท้อนหรือส่องผ่านออกมา โดยสามารถตรวจวัดด้วยตัวตรวจจับ (detector) แล้วประมวลผลเป็นค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นต่างๆ เกิดเป็นสเปกตรัมที่มีลักษณะเฉพาะตัวในแต่ละตัวอย่าง ซึ่งสเปกตรัมในช่วงคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ได้ จะถูกนำมาประมวลผล และหาความสัมพันธ์ทางสถิติกับข้อมูลของตัวอย่างที่วิเคราะห์ด้วยวิธีการทางเคมี หรือวิธีอื่นๆ ที่ได้ค่ามาตรฐาน จะได้สมการสอบเทียบมาตรฐาน (calibration equation) เพื่อใช้ทำนายค่าที่ต้องการ โดยน้ำส้มสายชูมีสูตรโมเลกุลคือ $C_2H_4O_2$ (รูปที่ 1.1) ซึ่งมีพันธะ C-H และ O-H จึงมีความเป็นไปได้ที่จะสามารถใช้เนียร์อินฟราเรดมาวิเคราะห์ผลได้ [2]



รูปที่ 1.1 โครงสร้างโมเลกุลของน้ำส้มสายชู [3]

ในการวัดค่า AAC และ ETC ต้องใช้เวลาในการวัดค่าและยังต้องใช้ผู้ชำนาญในการวัดค่า ดังนั้นการประยุกต์ใช้เครื่องเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในการวัดค่าแทนการวัดทางเคมี จึงเป็นแนวทางในการลดระยะเวลาในการวัดค่า และลดปริมาณการสูญเสียตัวอย่างให้น้อยลง

1.2 ความมุ่งหมายและวัตถุประสงค์ของการศึกษา

1. เพื่อติดตามกระบวนการเกิดกรดอะซิติกในถังหมักน้ำส้มสายชูด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี
2. เพื่อสร้างแบบจำลองทำนายค่า AAC และ ETC ในถังหมักน้ำส้มสายชู
3. เพื่อลดระยะเวลาในการวัดค่า AAC และ ETC ในน้ำส้มสายชู

1.3 ทฤษฎีหรือแนวความคิดที่ใช้ในการวิจัย

จากงานวิจัยเรื่อง Feasibility of monitoring acetic acid process using near-infrared spectroscopy [4] พบว่า กรดอะซิติกสามารถดูดกลืนคลื่นในช่วง 1,800-2,500 nm ซึ่งเป็นช่วงของ hydrogen bonded -OH band ของ carboxylic acid ในช่วงเนียร์อินฟราเรดและมีการดูดซับคลื่นเนียร์อินฟราเรด ที่ความยาวคลื่น 1,680 nm และ 1,724 nm [4]

จากงานวิจัยเรื่อง Monitoring of the cellulosic ethanol fermentation process by near-infrared spectroscopy [5] พบว่าสามารถใช้เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีทำนายปริมาณเอทานอลจาก production of second generation (2G) or cellulosic ethanol ได้ [5]

และจากการศึกษาวิจัยต่างๆ เช่น Rapid detecting total acid content and classifying different types of vinegar based on near infrared spectroscopy and least-squares support vector machine, Real-time monitoring of process parameters in rice wine fermentation by a portable spectral analytical system combined with multivariate analysis, Comparison of calibrations for the determination of soluble solids content and pH of rice vinegars using visible and short-wave near infrared spectroscopy, Prediction of organic acids and other

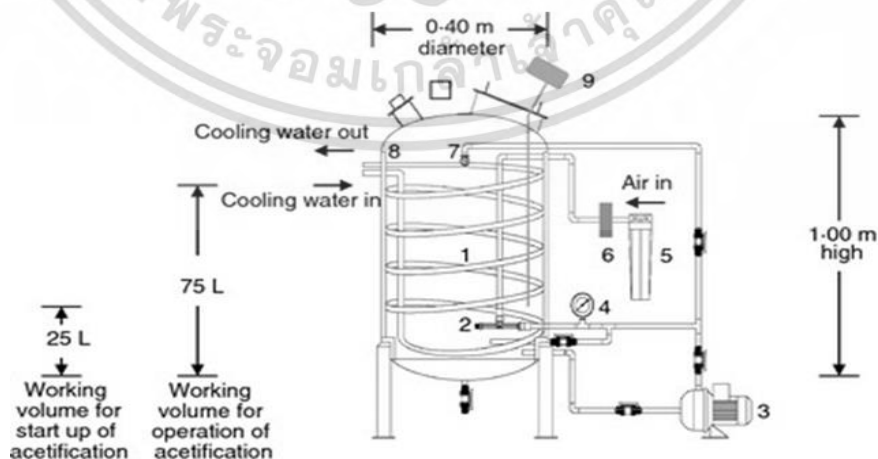
quality parameters of wine vinegar by near-infrared spectroscopy และ Prediction of the concentrations of ethanol and acetic acid in the culture broth of a rice vinegar fermentation using near-infrared spectroscopy โดยวิเคราะห์ด้วยวิธี multiple linear regression (MLR) จำกังานวิจัยข้างต้นมีการทำนนำความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีมากมาย แต่ยังไม่มีการทำนนำความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลในน้ำส้มสายชูข้าวด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี โดยวิเคราะห์ด้วยวิธี partial least squares regression (PLSR)

นอกจากนี้ยังเป็นองค์ประกอบทางเคมีที่มีการดูดซับคลื่นเนียร์อินฟราเรด ที่ความยาวคลื่น 760 nm ซึ่งเป็นกำรสั่นสะเทือนของ O-H str. Third overtone, ที่ความยาวคลื่น 970 nm ซึ่งเป็นกำรสั่นสะเทือนของ O-H second overtone, ที่ความยาวคลื่น 1450 nm ซึ่งเป็นกำรสั่นสะเทือนของ O-H str. first overtone และ ที่ความยาวคลื่น 1940 nm ซึ่งเป็นกำรสั่นสะเทือนของ O-H str.+ O.H. def

ดังนั้นน้ำส้มสายชูเป็นของเหลวที่มีน้ำเป็นองค์ประกอบ และมีกรดอะซิติกและเอทานอล ดังนั้นกำรใช้เทคนิคเนียร์อินฟราเรดในการทำนนำค่า AAC และ ETC ในน้ำส้มสายชูข้าวจึงมีความเป็นไปได้ จำกัข้อมูลข้างต้นที่กล่าวมา แต่อย่างไรก็ต้งต้องศึกษาสมรรถนะของแบบจำลอง

1.4 ขอบเขตการวิจัย

น้ำส้มสายชูที่ใช้ทดสอบต้องเป็นน้ำส้มสายชูจากข้าวจากกำรหมักในถังหมัก internal Venturi injector bioreactor (รูป 1.2) โดยกำรเพาะเชื้อน้ำส้มสายชู และในการสแกนต้องใช้เครื่อง FT (Fourier transform)-NIR spectrometer (MPA, Bruker, Germany) สแกนแบบ transreflectance โดยใช้แท่งอลูมิเนียมที่มีช่องความลึก 0.1 mm สแกนในช่วงความยาวคลื่น $12,500-4000\text{ cm}^{-1}$ (800-2500 nm) สแกนทุกๆ 16 cm^{-1} และสแกน 32 ครั้งต่อ 1 สเปกตรัม ใช้แผ่นทองคำเป็นวัสดุอ้างอิง สแกนที่ห้องอุณหภูมิ $25\pm 1.0^{\circ}\text{C}$ และตัวอย่างอุณหภูมิ $0.0\pm 1.0^{\circ}\text{C}$ เท่านั้น



รูปที่ 1.2 internal Venturi injector bioreactor [1]

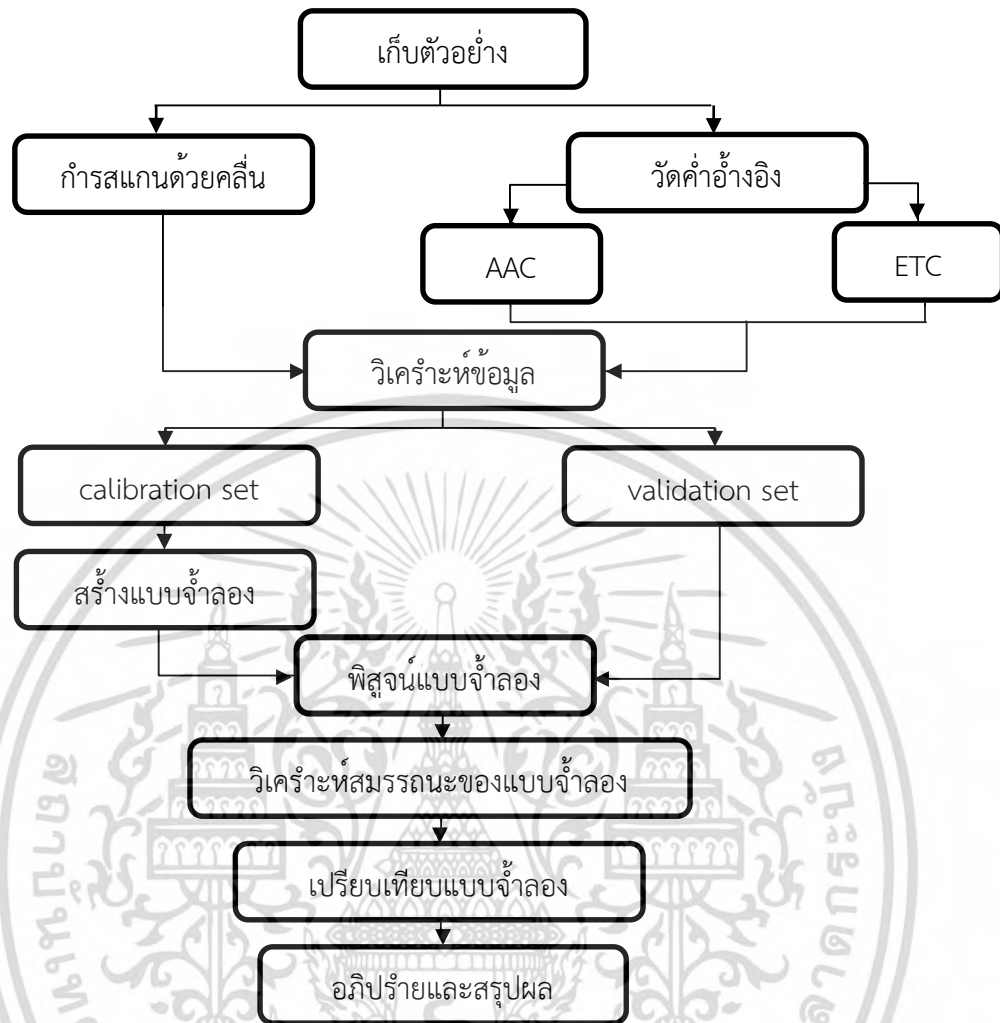
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นอนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. สามารถวัดค่า AAC และ ETC ได้อย่างรวดเร็วภายใน 1 นาทีต่อตัวอย่าง
2. สามารถประหยัดเวลาในการวัดค่า AAC และ ETC
3. ลดปริมาณการสูญเสียของตัวอย่างน้ำส้มสายชูในการวัดค่า AAC และ ETC
4. ลดการใช้สารเคมี

1.6 ขั้นตอนการดำเนินงาน

จากรูป 1.3 แสดงขั้นตอนของการดำเนินงาน เริ่มจากการเก็บตัวอย่างน้ำหมัก น้ำตัวอย่างที่ได้แบ่งเป็น 2 ส่วน ส่วนแรกนำไปสแกนด้วยคลื่นเนียร์อินฟราเรดจะได้ข้อมูลสเปกตรัม ส่วนที่สองนำไปหาค่าอ้างอิง ได้แก่ ค่า AAC และ ETC จะได้ข้อมูลค่าอ้างอิง ทำแบบนี้ทุกวันจนได้ข้อมูลที่เพียงพอ แล้วนำข้อมูลทั้งหมดมาวิเคราะห์ จากนั้นนำข้อมูลสเปกตรัมและค่าอ้างอิงไปสร้างแบบจำลองด้วยวิธี cross validation และ test set ในการสร้างแบบจำลองต้องแบ่งข้อมูลเป็น 2 ชุด คือ calibration และ validation โดยนำข้อมูลชุด calibration มาสร้างแบบจำลอง และนำข้อมูลชุด validation มาทดสอบสมรรถนะของแบบจำลอง แล้วทดลองใช้แบบจำลอง จากนั้นนำแบบจำลองมาเปรียบเทียบกับ เพื่อหาแบบจำลองที่มีสมรรถนะที่ดีที่สุด จึงอธิบายผลและสรุปผล



รูปที่ 1.3 ขั้นตอนการดำเนินงาน

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 2

ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

2.1 น้ำส้มสายชู

น้ำส้มสายชู (vinegar) หรือกรดอะซิติก (acetic) เป็นผลิตภัณฑ์ชนิดหนึ่งที่เกิดจากการหมักคาร์โบไฮเดรตของพืช โดยน้ำส้มสายชูเกิดจากการเสื่อมเสียของไวน์ จากการปนเปื้อนของเชื้อแบคทีเรียในสกุล *Acetobacter* ก่อให้เกิดปฏิกิริยาการเปลี่ยนแปลงแอลกอฮอล์ให้กลายเป็นกรดอะซิติก คุณสมบัติของน้ำส้มสายชูคือเป็นของเหลวที่ใสปราศจากสีและสิ่งเจือปน ในกรณีที่มีสีจะต้องเป็นสีของวัตถุดิบที่ใช้หมักเท่านั้น และค่า pH ของน้ำส้มสายชูควรอยู่ระหว่าง 2.0-3.5 [11]

วัตถุดิบที่สามารถนำมาใช้ในการผลิตน้ำส้มสายชูสามารถแบ่งออกได้ 5 ประเภทได้แก่

- 1) ผลไม้ เช่น องุ่น แอปเปิ้ล ส้ม แพร์ เป็นต้น
- 2) ผักที่มีแป้งเป็นองค์ประกอบหลัก เช่น มันเทศ มันฝรั่ง มันสำปะหลัง เป็นต้น โดยจะต้องแปรสภาพแป้งให้กลายเป็นน้ำตาลก่อนนำมาใช้
- 3) ธัญพืช เช่น ข้าวบาร์เลย์ ข้าวไรย์ ข้าวมอลต์ ข้าวสาลี ข้าวเหนียว ข้าวเจ้า ข้าวโพด เป็นต้น
- 4) น้ำตาลเช่น กากน้ำตาล น้ำผึ้ง น้ำอ้อย น้ำเชื่อม เป็นต้น
- 5) แอลกอฮอล์ เช่น แอลกอฮอล์เจือจาง แอลกอฮอล์ที่สูญเสียสภาพธรรมชาติ น้ำทิ้งจากโรงงานผลิตแอลกอฮอล์ที่มีปริมาณแอลกอฮอล์เหลืออยู่ เป็นต้น

กลไกการผลิตน้ำส้มสายชูมี 2 ขั้นตอน คือ

- 1) การหมักน้ำตาลให้เป็นแอลกอฮอล์ เป็นกระบวนการหมักแบบไม่ใช้ออกซิเจน และอาศัยยีสต์ในสกุล *Saccharomyces cerevisiae* var. *ellipsoideus* เปลี่ยนน้ำตาลให้กลายเป็นแอลกอฮอล์
 - 2) การหมักแอลกอฮอล์ให้เป็นกรดอะซิติก เป็นกระบวนการหมักแบบใช้ออกซิเจน และอาศัยเชื้อแบคทีเรียในกลุ่ม *acetic acid bacteria* เปลี่ยนแอลกอฮอล์ให้เป็นกรดอะซิติก
- ประเภทของน้ำส้มสายชู สามารถแบ่งได้ประมาณนี้
- 1) distilled vinegar เป็นน้ำส้มสายชูที่ผลิตจากแอลกอฮอล์
 - 2) cider vinegar เป็นน้ำส้มสายชูที่ผลิตจากน้ำแอปเปิ้ล (ที่มีความหวานประมาณ 10 °brix)
 - 3) malt vinegar เป็นน้ำส้มสายชูที่ผลิตจากข้าวมอลต์
 - 4) whey vinegar เป็นน้ำส้มสายชูที่ผลิตจากน้ำที่งาโรงงานนมที่ถูกทำให้เข้มข้นแล้ว

- 5) rice vinegar เป็นน้ำส้มสายชูที่ผลิตจากข้าว
 - 6) wine vinegar เป็นน้ำส้มสายชูที่ผลิตจากน้ำอุน
- นอกจากนี้ แล้วยังมีน้ำส้มสายชูอีกหลายประเภท เช่น fruit vinegar ทำจากผลไม้ sugar vinegar ทำจากน้ำตาลหรือจากน้ำตาล glucose vinegar ทำจากสารละลายกลูโคส เป็นต้น [11]

2.1.1 ไวน์ข้าว

ไวน์ข้าว (rice wine) เครื่องดื่มแอลกอฮอล์ (alcoholic beverage) ที่ใช้ข้าวเป็นวัตถุดิบ โดยทำการหมักด้วยเชื้อราที่เตรียมให้อยู่ในรูปของหัวเชื้อ และระหว่างทำการหมักแบ่งในข้าว แบ่งจะถูกย่อยให้โมเลกุลเล็กลงจนกลายเป็นน้ำตาล และน้ำตาลที่ได้จะถูกหมักให้เป็นแอลกอฮอล์ไปพร้อมๆกันด้วยยีสต์ ในสภาวะที่เป็นสภาวะ [12]



รูปที่ 2.1 ไวน์ข้าว [13]

2.1.2 น้ำส้มสายชูข้าว [14]

น้ำส้มสายชูข้าวมีขั้นตอนการผลิต ดังนี้

- 1) เตรียมกล้าเชื้อ โดยทำการเตรียมอาหารที่ใช้เลี้ยงเชื้อรา *Amylomyces* spp. ใช้อาหาร potato dextrose agar (PDA) 40 g ต่อน้ำ 1 L ทำการ autoclave อาหารที่ 121°C เป็นเวลา 15 นาที ก่อนนำไปใส่ในหลอดแก้ว 6 ml ต่อหลอด จากนั้นนำไปเอียง slant รอให้อาหารแข็งตัวก่อนจะนำไปถ่ายเชื้อ อเชื้อเชื้อ อร์าลงไปในหลอดแก้วภายใต้ aseptic technique จากนั้น นบ่มที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 3 วัน
- 2) เตรียม mold bran โดยเตรียมขวดรูปชมพู่ขนาด 250 ml แล้วเติมรำข้าวหยาบและรำข้าวละเอียดอย่างละ 10 g ลงไป แล้วเติมน้ำกรองที่ autoclave แล้วผสมกับ $MgSO_4$ 0.25% ใส่ขวดรูปชมพู่ละ 5 ml จำนวน 14 ขวด คลุกให้เข้ากันแล้วนำไป autoclave ที่ 121°C เป็นเวลา 1 ชั่วโมง ทิ้งไว้ให้เย็นแล้วนำไป autoclave อีกครั้งตามเดิม ทิ้งไว้ให้เย็นแล้วเติม

- น้ำกรรณที่ auto clave แล้วใส่ขวดรูปชมพู่ละ 2.5 ml ก่อนจะนำเชื้อ ธาที่บ่มไว้เขี่ยลงในขวด รูปชมพู่ภายใต้ aseptic technique จากนั้น นบ่มที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 3 วัน
- 3) หมักข้าว โดยแช่ข้าวเหนียวทิ้งไว้ 1 คืนแล้วนำไปนึ่ง จากนั้นนำ mold bran ที่เตรียมไว้มา คลุกให้เข้ากัน และเติมน้ำกรรณ 1,000 ml ต่อข้าว 1 kg แล้วคลุมด้วยผ้าข้าวบางที่ auto clave แล้ว หมักที่ อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 4 วัน
 - 4) หมักไวน์ข้าว โดยในวันที่ 3 ของการหมักข้าว ให้ทำอาหารเลี้ยงเชื้อยีสต์ (YM) *Saccharomyces cerevisiae* FER1 เลี้ยงไว้เป็นเวลา 1 วัน แล้วนำข้าวที่หมักแล้ว น้ำเชื่อม น้ำกรรณและยีสต์มาหมักที่อุณหภูมิห้องเป็นเวลา 7 วัน จากนั้นทำการพาสเจอร์ไรส์และกรอง ไวน์ข้าว
 - 5) หมักน้ำส้มสายชูข้าว โดยนำน้ำส้มสายชูหมักและไวน์ข้าวมาหมักในถัง แล้วปรับความเข้มข้น รวม (TC) ให้เท่ากับ 80 g/L คือผลรวมของค่าเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) เป็น 45 ± 1 g/L และค่าความเข้มข้นของเอทานอล (ETC) เป็น 35 ± 1 g/L โดยติดตามผลการหมักทุกวัน จนกว่า ETC จะต่ำกว่า 5 g/L จึงจะครบ 1 cycle หลังจากนั้น ให้ทำการตั้งน้ำหมักตก 40% ของน้ำหมักทั้งหมด แล้วเติมไวน์ข้าวลงไปและปรับค่า TC ให้เท่ากับ 80 g/L ตามเดิม เป็น การเริ่มหมัก cycle ใหม่ และน้ำส้มสายชูข้าวที่ตั้งออกมา ให้นำไปพาสเจอร์ไรส์จะได้เป็น น้ำส้มสายชูข้าว

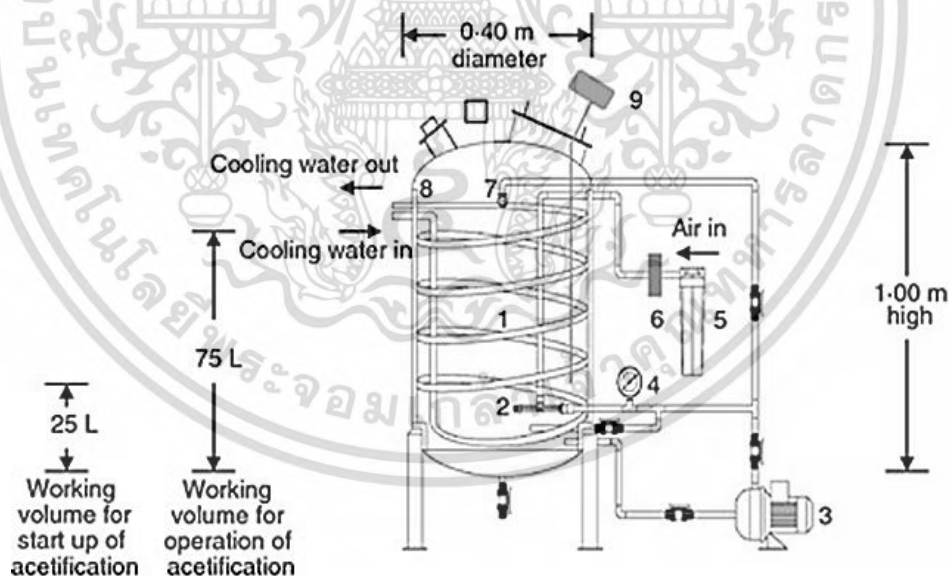


รูปที่ 2.2 น้ำส้มสายชูข้าว [15]

2.2 ถังหมัก internal Venturi injector bioreactor

ถังหมัก internal Venturi injector bioreactor เป็นถังหมักน้ำส้มสายชูที่คิดค้น ออกแบบและประดิษฐ์โดยนาย วรวิฑูฒิ ครุสงฆ์ ถังหมักนี้เป็นถังหมักที่ทำให้กระบวนการผลิตน้ำส้มสายชูหมักเป็นระบบผสมน้ำหมักเข้ากับอากาศภายในถังหมัก (internal Venturi ejector system) [16] เป็นกระบวนการหมักที่ใช้การผสมน้ำหมักเข้ากับอากาศ โดยอาศัยหลักการเรื่องความต่างของแรงดันของของเหลวภายในท่อเพื่อให้เกิดแรงดูด (suction) ของอากาศภายนอกถังหมักเข้าไปผสมกับของเหลวภายในถังหมัก โดยอาศัยเครื่องสูบน้ำในการสูบน้ำหมักจากถังหมักผ่านไปยังท่อ แล้วส่งผ่านไปยังระบบผสมน้ำหมักกับอากาศภายในถังหมักจึงเกิดแรงดูดของอากาศผ่านท่อส่งผ่านอากาศ (air pipe) จากภายนอกถังหมัก เข้าไปที่ระบบผสมน้ำหมักกับอากาศภายในถังหมักจึงเกิดการผสมของน้ำหมักเข้ากับอากาศเป็นอย่างดี ช่วยเพิ่มปริมาณอากาศที่ละลายในน้ำทำให้ประสิทธิภาพการสร้างกรดอะซิติกของเชื้อแบคทีเรียสูงขึ้น สามารถผลิตกรดอะซิติกตามที่กำหนดได้ในระยะเวลาสั้น และสามารถทำการหมักในลักษณะกึ่งอัตโนมัติ (semi-continuous fermentation) ซึ่งทำให้ได้น้ำส้มสายชูหมักอย่างต่อเนื่อง

ระบบผสมน้ำหมักเข้ากับอากาศภายในถังหมัก ได้ทำการจดสิทธิบัตรในนามของสถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง โดยมีเลขที่สิทธิบัตร คือ 12907



รูปที่ 2.3 internal venturi injector bioreactor [1]

- (1) ถังหมักสแตนเลสสตีลขนาด 100 L
- (2) internal Venturi injector
- (3) ปั๊มลอยโข่ง
- (4) เกจวัดความดัน
- (5) ตัวกรองอากาศ
- (6) โรตัมมิเตอร์
- (7) หัวฉีด antifoam
- (8) คอยล์ทำความเย็น
- (9) เครื่องวัดค่าออกซิเจนในน้ำ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.3 กรดอะซิติก

กรดอะซิติก (acetic acid) หรือ กรดน้ำส้มคือ กรดอินทรีย์หรือสารประกอบเคมีอินทรีย์ที่พบได้ในธรรมชาติมีฤทธิ์เป็นกรดอ่อน ไม่มีสี มีกลิ่นฉุนที่เป็นเอกลักษณ์ มีรสเปรี้ยว ระเหยง่าย และสามารถละลายได้ในน้ำ แอลกอฮอล์ และกลีเซอริน มีความเสถียร สูตรทางเคมี คือ CH_3COOH มีคุณสมบัติทางเคมีดังนี้ น้ำหนักโมเลกุลเท่ากับ 60.05 g/mol ความหนาแน่นเท่ากับ 1.05 g/cm³ จุดเดือดเท่ากับ 118.1°C และจุดแข็งตัวเท่ากับ 16.67°C เมื่อแข็งตัวมีลักษณะเป็นผลึกใส ผลึกของกรดอะซิติกนั้นจะมีความบริสุทธิ์สูง เรียกว่าห้วนน้ำส้มหรือกรดกลacialอะซิติก (glacial acid) ที่ได้จากการสะกัดทางเคมี ห้วนกรดน้ำส้มนี้ นิยมารดน้ำไปเจือจางเพื่อทำน้ำส้มสายชูเทียม

อะซิติกสามารถผลิตน้ำส้มสายชูที่ใช้ในการปรุงอาหารให้มีรสเปรี้ยวและช่วยในการถนอมอาหารและไม่เป็นอันตรายต่อร่างกาย หากใช้ในปริมาณที่ทางกระทรวงสาธารณสุขควบคุม และมีราคาถูกเมื่อเทียบกับสารให้ความเปรี้ยวจำกรธรรมชาติอื่นๆ เช่น มะนาว มะขาม เป็นต้น และประโยชน์ของกรดอะซิติกด้านอื่นๆ ได้แก่

- 1) ด้านอาหาร ช่วยในการถนอมอาหารป้องกันการเน่าเสียจากจุลินทรีย์บางชนิด โดยใช้ในรูปแบบของน้ำส้มสายชูแท้ที่มีกรดอะซิติกเข้มข้น 5-10% หรือสารละลายกรดอะซิติกเข้มข้น 25-80% ผสมในอาหารเพื่อปรับสภาวะความเป็นกรด-ด่างของอาหารให้ไม่เหมาะสมต่อการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ ทำให้อาหารสามารถเก็บไว้ได้นาน เช่น น้ำสลัด ผักดอง ผลไม้บางชนิด เป็นต้น และเกลือของกรดอะซิติก เช่น โซเดียมอะซิเตต แคลเซียมอะซิเตต สามารถนำมาผสมในขนมปังหรือขนมปังอบเพื่อป้องกันการเน่าเสียจากเชื้อ อเมกที่เรียและเชื้อ อรา
- 2) ด้านการแพทย์ น้ำกรดอะซิติกมาเป็นตัวทำละลายเพื่อเตรียมสารหรือผสมกับสารอื่นในการผลิตยาบางชนิด เช่น ยาแอสไพรีน เป็นต้น และมีการนำมาผลิตยาหยอดหูสำหรับรักษาโรคหูอักเสบ โดยที่กรดอะซิติกที่ผสมอยู่ในยารักษาหูจะเข้าไปยับยั้งการเจริญของเชื้อราและเชื้อ จุลินทรีย์ที่ทำให้เกิดโรคหูอักเสบ
- 3) ด้านอุตสาหกรรม ใช้กรดอะซิติกที่สังเคราะห์ได้จากกระบวนการทางวิทยาศาสตร์ ที่เป็นกรดอะซิติกความบริสุทธิ์ต่ำ และมีการเจือปนของโลหะหนัก กรดอะซิติกประเภทนี้ มีราคาถูก จึงนิยมนำมาใช้ในอุตสาหกรรม เช่น การผลิตพลาสติก การผลิตสีย้อมผ้า การผลิตเส้นใยโพลีเมอร์ ผลิตภัณฑ์ อุตสาหกรรมสิ่งพิมพ์และใช้ในอุตสาหกรรมฟอกหนัง เป็นต้น
- 4) ด้านการเกษตร น้ำกรดอะซิติกนำมาผสมในยาฆ่าแมลง ยากำจัดเชื้อราและเชื้อจุลินทรีย์ในผักผลไม้หรือนำมาผสมในน้ำหมักชีวภาพ เพื่อช่วยในการควบคุมการเจริญเติบโตของเชื้อราที่สร้างความเสียหายให้กับผักและผลไม้ [17]

2.4 เอทานอล

เอทานอล (ethanol) หรือ เอทิลแอลกอฮอล์ (ethyl alcohol) เป็นแอลกอฮอล์ปฐมภูมิ สามารถผลิตได้จากกระบวนการสังเคราะห์ทางเคมี และกระบวนการหมักวัตถุดิบจำพวกแป้ง และน้ำตาลด้วยจุลินทรีย์ นิยมนำมาใช้เป็นสารตั้งต้นสำหรับผลิตสารเคมีอื่นๆ หรือนำมาใช้ประโยชน์โดยตรง เช่น ใช้เป็นตัวทำละลาย เครื่องดื่ม และเชื้อเพลิง เป็นต้น เป็นของเหลวใส ไม่มีสี ระเหยง่าย มีกลิ่นเฉพาะตัว และสามารถละลายน้ำได้ดี สูตรทางเคมี คือ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ มีคุณสมบัติทางเคมีดังนี้ น้ำหนักโมเลกุลเท่ากับ 46.07 g/mol ความหนาแน่นเท่ากับ 0.7893 g/cm³ จุดเดือดเท่ากับ 78.32°C และจุดแข็งตัวเท่ากับ -114.1°C และประโยชน์ของเอทานอล ได้แก่

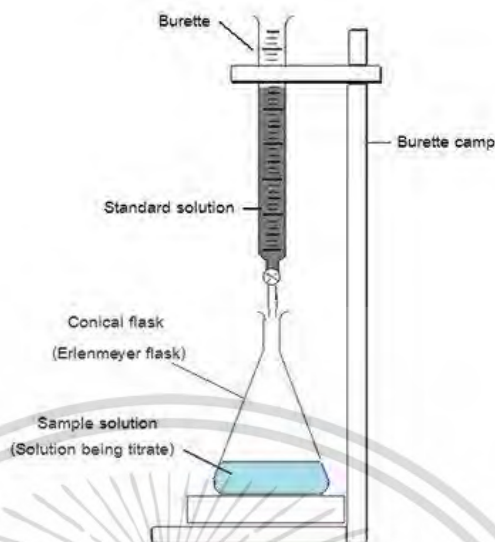
- 1) ใช้เป็นสารตั้งต้นหรือตัวทำละลาย เช่น การผลิตเครื่องดื่มแอลกอฮอล์ ยาน้ำหอม เป็นต้น
- 2) ใช้ผสมในเชื้อเพลิงเพื่อเพิ่มค่าออกเทน และลดปริมาณเชื้อเพลิงบางชนิด เช่น น้ำมันแก๊สโซฮอล์ E10 (แอลกอฮอล์ 1 ส่วน น้ำมันเบนซิน 9 ส่วน) E20 (แอลกอฮอล์ 2 ส่วน น้ำมันเบนซิน 8 ส่วน)
- 3) เป็นส่วนผสมของเครื่องดื่มแอลกอฮอล์ต่างๆ
- 4) ใช้สำหรับการฆ่าเชื้อ หรือล้างแผล เช่น แอลกอฮอล์ 70%
- 5) ใช้สำหรับการทำความสะอาด และฆ่าเชื้อ ในส่วนผสมของน้ำยาฆ่าเชื้อ [18]

2.5 การไทเทรต

การไทเทรต (titration) เป็นการวิเคราะห์หาปริมาณของสารที่ไม่ทราบความเข้มข้น (unknown) ด้วยการวัดปริมาตรของสารละลาย ซึ่งปริมาตรของสารละลายจะมีความสัมพันธ์กับปริมาณสาร โดยทำปฏิกิริยากับสารที่ทราบปริมาณหรือความเข้มข้นที่แน่นอน โดยสารที่ไม่ทราบความเข้มข้นจะบรรจุในขวดรูปชมพู่เรียกว่าไทแทรนด์ (titrand) และสารที่ทราบความเข้มข้นแล้วหรือเรียกว่าสารมาตรฐานจะถูกบรรจุในบิวเรตต์ เรียกว่าไทแทรนต์ (titrant)

สำหรับการไทเทรตทุกชนิด จุดที่สารที่นำมาไทเทรตทำปฏิกิริยากันพอดี เรียกว่าจุดสมมูลหรือจุดสะเทิน (equivalence point) จุดที่กรดทำปฏิกิริยากันพอดีหรือสะเทินพอดีกับเบส ส่วนจุดที่อินดิเคเตอร์ (indicator) เปลี่ยนสี เรียกว่าจุดยุติ (end point) ซึ่งเป็นจุดที่จะยุติการไทเทรต โดยต้องใช้อินดิเคเตอร์ที่เหมาะสมจึงจะทำให้จุดยุติตรงกับจุดสมมูลหรือใกล้เคียงกับจุดสมมูลมากที่สุด ถ้าใช้อินดิเคเตอร์ไม่เหมาะสมอาจจะทำให้จุดยุติอยู่ห่างจากจุดสมมูลมาก ทำให้ผลการทดลองคลาดเคลื่อนได้

วัสดุอุปกรณ์ที่เกี่ยวข้อง (รูปที่ 2.3) ประกอบด้วยขาตั้งเหล็ก (stand) ที่ยึดบิวเรตต์ (burette clamp) บิวเรตต์ (burette) ขวดรูปชมพู่ (erlenmeyer flask) และกระเบื้องสีขาว (tile)



รูปที่ 2.4 อุปกรณ์ไทเทรต

ขั้นตอนของการไทเทรต

- 1) บรรจุสารละลายมาตรฐานลงในบิวเรตต์ โล่ฟองอำคาบบริเวณส่วนปลายด้านล่างออกให้หมด
- 2) ใช้ปิเปตดูดสารละลายตัวอย่างแล้วใส่ลงในขวดรูปชมพู่ (จดปริมาตรของสารละลายตัวอย่างเอาไว้)
- 3) หยดอินดิเคเตอร์ 2-3 หยด ลงในสารละลายตัวอย่าง
- 4) เปิดก๊อกที่บิวเรตต์เพื่อปล่อยให้สารละลายมาตรฐานหยดลงไปทำปฏิกิริยากับสารละลายตัวอย่าง โดยใช้มือข้างที่ถนัดจับขวดรูปชมพู่ เพราะต้องเขย่าตลอดเวลา มือที่ไม่ถนัดใช้จับเพื่อเปิด-ปิดก๊อกที่บิวเรตต์ ควรวางกระดาษขาวเอาไว้บนโต๊ะ เพื่อช่วยให้สังเกตเห็นการเปลี่ยนสีของอินดิเคเตอร์ได้ง่ายขึ้น การเปลี่ยนสีในตอนแรกจะไม่ถาวร คือเมื่อเปลี่ยนสีไปแล้วชั่วครู่ก็กลับไปเป็นอย่างเดิมอีกแสดงว่ายังไม่ถึงจุดยุติ เมื่อถึงขั้นตอนนี้ต้องระวังมากยิ่งขึ้นในการเปิดก๊อกให้สารละลายมาตรฐานหยดลงมา ถ้ามักไปจะเลยจุดยุติได้ง่าย ผลการไทเทรตจะให้ได้ไม่ต้องเสียเวลาเริ่มต้นใหม่การสังเกตสีของอินดิเคเตอร์สำหรับบอกจุดยุติ ให้ดูที่สีอ่อน ๆ จาง ๆ ไม่ให้เข้มมาก
- 5) คำนวณหาความเข้มข้นของสารละลายตัวอย่างจากสมการ [19]

$$C_a \times V_a = C_b \times V_b \quad (2.1)$$

เมื่อ C_a = ความเข้มข้นของสาร A (สารละลายตัวอย่าง)

V_a = ปริมาตรของสาร A (สารละลายตัวอย่าง) ที่ใส่ในขวดรูปชมพู่

C_b = ความเข้มข้นของสาร B (สารมาตรฐาน)

V_b = ปริมาตรของสาร B ได้จากการไทเทรต อ่านค่าจากบิวเรตต์เมื่อถึงจุดสมมูล

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.6 อีบูลลิโอมิเตอร์

อีบูลลิโอมิเตอร์ (Ebulliometer) เป็นเครื่องมือที่ใช้ในการตรวจสอบดิกิริแอลกอฮอล์ในน้ำหมักประเภทไวน์ เครื่องนี้ได้รับการออกแบบให้เทียบหาจุดเดือดของน้ำหมักกับจุดเดือดของน้ำสะอาด โดยมีตำราเทียบจุดเดือดของน้ำหมักกับค่าดิกิริแอลกอฮอล์ ข้อดีของเครื่องมือชนิดนี้ คือใช้ตัวอย่างน้ำสะอาดในการตรวจวิเคราะห์ไม่มาก (ประมาณ 50 ml) ใช้เวลาตรวจวัดไม่นานมากต่อการตรวจวิเคราะห์ 1 ตัวอย่าง เครื่องมือชนิดนี้เป็นที่ได้รับความนิยม เนื่องจากมีความรวดเร็วและสะดวกในการตรวจวัดดิกิริแอลกอฮอล์



รูปที่ 2.5 อีบูลลิโอมิเตอร์ [20]

ขั้นตอนของการตรวจวัดค่าแอลกอฮอล์

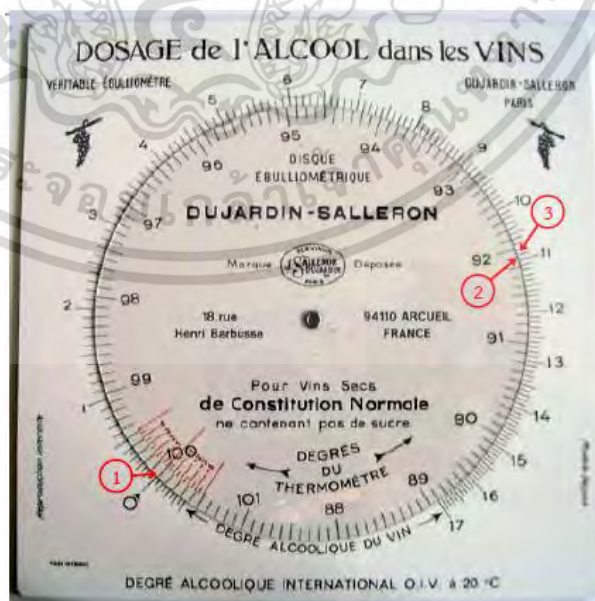
- 1) เทน้ำสะอาดลงในหม้อต้มของตัวเครื่อง (ใช้หลอดแก้วตวงที่มากับตัวเครื่อง ตวงน้ำในระดับขีดล่างสุด - EAU) ใส่คอนเดนเซอร์โดยไม่ต้องเติมน้ำหล่อเย็น และติดเทอร์โมมิเตอร์ในตำแหน่ง แล้วจุดตะเกียงแอลกอฮอล์เพื่อหาจุดเดือดของน้ำ
- 2) อ่านค่าอุณหภูมิเมื่อปรอทในเทอร์โมมิเตอร์หยุดนิ่งคงที่นานประมาณ 30 วินาที บันทึกจุดเดือดของน้ำแล้วนำไปตั้งค่าบนแผ่นเทียบทึบเปอร์เซ็นต์แอลกอฮอล์
- 3) เปิดวาล์วระบายน้ำด้านหน้าตัวเครื่องเพื่อระบายน้ำออก จากนั้นนำตัวอย่างน้ำหมักที่ต้องการวัดประมาณ 50 ml เทลงในตัวเครื่อง เขย่าเล็กน้อยเพื่อกลั้วตัวอย่างในตัวเครื่อง แล้วเปิดวาล์วระบายทิ้งไป

- 4) เทตัวอย่างน้ำหมักลงในตัวเครื่อง (ใช้หลอดแก้วตวงที่มากับตัวเครื่อง ตวงในระดับขีดบนสุด VIN) ติดตั้งคอนเดนเซอร์และเติมน้ำหล่อเย็นลงในกระบอกคอนเดนเซอร์ ติดเทอร์โมมิเตอร์ในตำแหน่งแล้วจุดตะเกียง
- 5) คอยสังเกตอุณหภูมิที่เทอร์โมมิเตอร์ (ใช้เวลาประมาณ 15 นาที) เมื่อปรอทวัดอุณหภูมิหยุดนิ่งคงที่ นานกว่า 30 วินาที อ่านค่า แล้วนำมาเทียบบนแผ่นเทียบทำเปอร์เซ็นต์แอลกอฮอล์ โดยกำหนดให้ตำแหน่งจุดเดือดของน้ำมีค่าตรงกับดีกรีแอลกอฮอล์เท่ากับ 0% หรือ 0 ดีกรี อ่านค่าจุดเดือดของตัวอย่างน้ำหมักที่อยู่ในวงกลมรอบใน แล้วอ่านค่าดีกรีที่อยู่บนเส้นวงกลมรอบนอก (ดูวิธีการอ่านค่าดีกรีประกอบ)

6) บันทึกค่าที่ได้

วิธีการอ่านค่าดีกรีของตัวอย่างน้ำหมักด้วยแผ่นเทียบทำเปอร์เซ็นต์แอลกอฮอล์ของเครื่องอีบูลลิโอมิเตอร์

- 1) สมมติให้จุดเดือดของน้ำที่วัดด้วยเครื่องอีบูลลิโอมิเตอร์ อ่านค่าได้เท่ากับ 100°C ให้เลื่อนแผ่นวงกลมด้านใน จนตัวเลข 100 ตรงกับลูกศรที่ 0 ดีกรี (วงกลมเลข 1) แผ่นวงกลมด้านในมีค่าตั้งแต่ 87.0-101.0 เป็นค่าที่ใช้บอกตำแหน่งจุดเดือดของตัวอย่างน้ำหมัก มีหน่วยเป็น $^{\circ}\text{C}$
- 2) สมมติให้จุดเดือดของตัวอย่างน้ำหมักที่อ่านได้จากการใช้เครื่องอีบูลลิโอมิเตอร์ มีค่าเท่ากับ 91.9°C ดูสเกลวงกลมด้านในที่ตำแหน่งตัวเลข 91.9 (วงกลมเลข 2)
- 3) การอ่านค่าดีกรีตัวอย่างน้ำหมัก อ่านค่าตัวเลขที่อยู่บนสเกลในวงกลมด้านนอก จะพบว่าตัวอย่างน้ำหมักที่นำมาตรวจสอบมีแอลกอฮอล์อยู่ 10.9 ดีกรี (วงกลมเลข 3) [21]



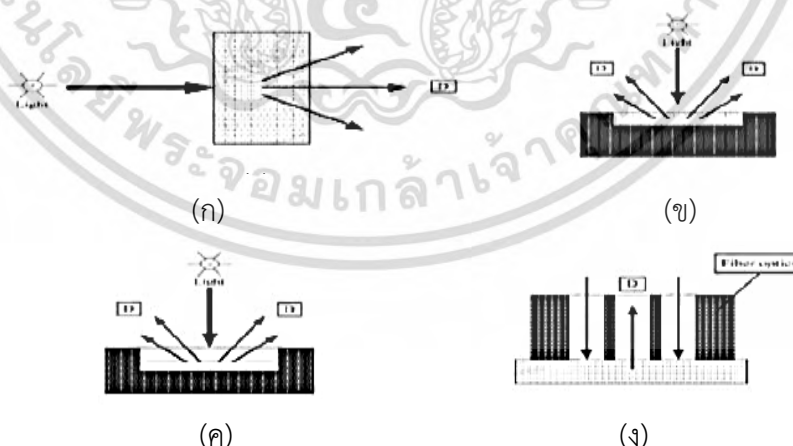
รูปที่ 2.6 การอ่านค่าดีกรีของน้ำหมักด้วยแผ่นเทียบดีกรีของเครื่องอีบูลลิโอมิเตอร์

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2.7 เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

2.7.1 หลักการของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

เทคนิคเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (near infrared spectroscopy) เป็นเทคนิคที่ใช้หลักการอันตรกิริยา (interaction) เมื่อคลื่นเนียร์อินฟราเรด (ความยาวคลื่นระหว่าง 700-2,500 nm) ที่ส่องไปยังวัสดุ ทำให้พันธะทางเคมีภายในวัสดุ โดยเฉพาะอย่างยิ่งพันธะ O-H, C-H และ N-H ของวัสดุ ดูดซับคลื่น และทำให้เกิดอาการสั่นสะเทือนของพันธะ โดยการเปลี่ยนระดับพลังงานข้ามชั้นมากกว่า 1 ชั้น (overtone) หรือเกิดจากการสั่นสะเทือนข้าม 1 ชั้น (fundamental vibration) พร้อมกันของพันธะ ตั้งแต่ 2 พันธะขึ้นไป ทำให้ได้ผลรวมของการสั่น (combination vibration) เครื่องมือที่ใช้เรียกว่า สเปกโตรมิเตอร์ (spectrometer) ซึ่งมีแหล่งแสงที่ให้ช่วงคลื่นเนียร์อินฟราเรด ปกติเป็นหลอดทังสเตนฮาโลเจน (tungsten halogen) และตัวตรวจวัด (detector) โดยวิธีการจัดวางตัวอย่างเพื่อการสแกนด้วยสเปกโตรมิเตอร์สามารถทำได้หลายวิธี เช่น transmittance, reflectance, transreflectance และ interactance โดย transmittance แสงตกกระทบตัวอย่างด้านหนึ่งโดยที่ตัวตรวจวัด จะวัดปริมาณแสงที่ผ่านออกมาจากตัวอย่างในด้านตรงกันข้าม (รูปที่ 2.6ก) reflectance แสงจะตกกระทบที่ผิวของตัวอย่างและอาจแพร่กระจายในปริมาณหนึ่งก่อน แล้ววัดปริมาณแสงสะท้อนกลับออกมาโดยตัวตรวจวัด (รูปที่ 2.6ข) transreflectance แสงจากแหล่งกำเนิดแสงตกกระทบตัวอย่างและส่องผ่านตัวอย่างลงไปตกกระทบวัตถุที่ไม่ดูดกลืนแสง (แผ่นเซรามิกทองหรืออลูมิเนียม) ที่อยู่ด้านล่างตัวอย่าง แล้วเกิดการสะท้อนกลับมายังตัวตรวจวัด (รูปที่ 2.6ค) และ interactance กระบวนการนี้เกิดในกรณีที่ใช้หัววัดใยแก้วนำแสง (fiber optics probe) แสงจะออกมาจากส่วนวงแหวนด้านนอกของหัววัดมาตกกระทบตัวอย่าง และแสงที่สะท้อนออกมาจากนี้ ตัวอย่างจะถูกส่งไปยังที่ตัวตรวจวัดที่บริเวณส่วนกลาง (รูปที่ 2.6ง) [22]



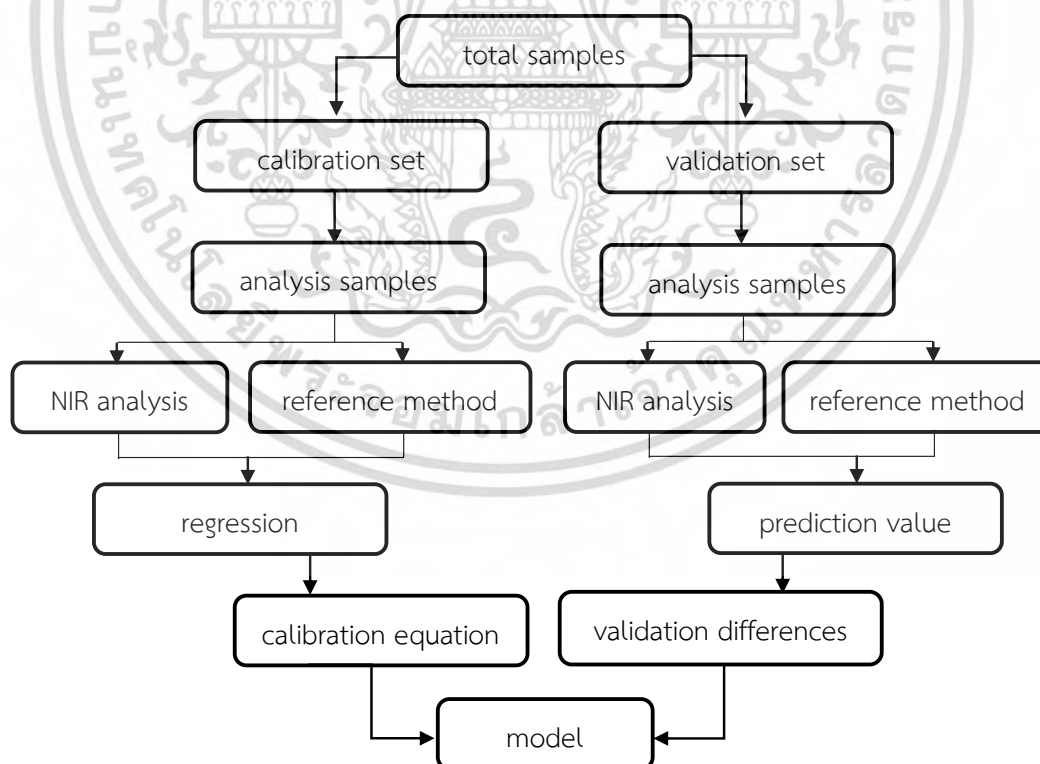
รูปที่ 2.7 แบบการวัด (ก) transmittance (ข) reflectance

(ค) transreflectance และ (ง) interactance

ที่มา : <http://www.nirsresearch.com>

2.7.2 ขั้นตอนในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัม

การดำเนินการวิเคราะห์ข้อมูลจากสเปกตรัม (รูปที่ 2.7) ประกอบไปด้วยขั้นตอน 2 ขั้นตอนหลักเป็นอย่างน้อย คือ ขั้นตอนการสร้างสมการที่ใช้ทำนาย (calibration set) และขั้นตอนการตรวจสอบความถูกต้องของสมการที่สร้างขึ้นมา (validation set) ในการสร้างสมการที่ใช้ทำนาย เพื่อให้ได้สมการมาตรฐานที่ใช้ในการทำนายค่าคุณลักษณะคุณภาพผลิตภัณฑ์ที่ต้องการทราบ ต่อจากนั้นต้องมีกำรนำสมการมาตรฐานที่ได้จากกำรทำ calibration มาตรวจสอบความถูกต้องแม่นยำของสมการมาตรฐานในการทำนายค่าคุณภาพ ซึ่งขั้นตอนนี้เรียกว่ากำรทำ validation เพื่อทดสอบสมการที่ได้ว่ามี ความแม่นยำหรือไม่ เมื่อได้ผลการทดสอบที่น่าเชื่อถือแล้วจึงนำสมการที่ได้ไปใช้ทำนายค่าคุณลักษณะที่ ต้องการศึกษำ จากสเปกตรัมที่ทำการวัดมาได้ โดยกลุ่มตัวอย่างที่ดีจะต้องมีจำนวนตัวอย่างที่นำมา วิเคราะห์ห้อย่างพอเพียงทั้งตัวอย่างในปัจจุบันและตัวอย่างที่จะนำมาวิเคราะห์ในอนาคต โดยเฉพาะ ปริมาณองค์ประกอบทางเคมีจะต้องมีค่าครอบคลุมปริมาณทั้งต่ำสุดและสูงสุดของตัวอย่าง โดยมีการสุ่ม ตัวอย่าง (sampling) ที่ถูกต้อง เพียงพอและเป็นตัวแทนที่ของประชากร การสุ่มตัวอย่างถือเป็นขั้นตอนที่ สำคัญในการที่จะได้สมการทำนายปริมาณองค์ประกอบทางเคมีที่ดี ทำให้ค่าผิดพลาดที่ได้จากการทดลอง ลดลง นอกจากนี้ ควรพิจารณาวิธีวิเคราะห์ทางเคมีซึ่งควรเป็นวิธีที่เป็นมาตรฐานและมีความแม่นยำเพื่อให้ ได้ข้อมูลที่ถูกต้อง เนื่องจากส่งผลต่อสมการที่สร้างขึ้นต่อไป [22]



รูปที่ 2.8 ขั้นตอนในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัม

2.7.3 การปรับแต่งข้อมูลก่อนการวิเคราะห์

ปัจจัยที่มีผลต่อสเปกตรัมของตัวอย่างได้แก่ อุณหภูมิ ความชื้นและขนาดอนุภาค ซึ่งจะ ทำให้สเปกตรัมที่ได้มีความแตกต่างกัน อันเนื่องมาจากสภาพกระเจิงแสงและความแตกต่างที่เป็นผลมา จากความเข้มข้นขององค์ประกอบที่ต้องกำรวัด ซึ่งอาจจะทำให้เกิดความแตกต่างในผลเชิงบวก (additive scattering) สเปกตรัมเพิ่มขึ้นตามตลอดช่วงความยาวคลื่น หรือผลเชิงคูณ (multiplicative scattering) สเปกตรัมเพิ่มขึ้นเมื่อความยาวคลื่นสูงขึ้น นอกจากนี้สเปกตรัมที่ได้จากการดูดกลืนแสงเนียร์อินฟราเรด เป็นสเปกตรัมที่มีการเหลื่อมซ้อนทับกันอยู่ (overlapping band) ดังนั้น ในการวิเคราะห์จึงนำไปปรับแต่ง ด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์ก่อน เพื่อลดความคลาดเคลื่อนให้น้อยลงวิธีที่นิยมใช้มี 5 วิธี คือ

- 1) วิธีอนุพันธ์ (derivative) เป็นการหาความชันของเส้นสเปกตรัม เพื่อแก้ปัญหาพีคที่มีฐานกว้าง (broad peak) เนื่องจากการซ้อนทับกันของพีค (overlapping) และอิทธิพลจากการยกตัวของเส้น สเปกตรัม (baseline shift) ที่เกิดจากการกระเจิงแสง (scattering light) เมื่อแสงตกกระทบที่ ตัวอย่างทำให้แสงเปลี่ยนทิศทางซึ่งมีผลต่อการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นต่างๆ ทั้งนี้ มีสาเหตุมาจาก ขนาดของตัวอย่างไม่สม่ำเสมอ การอัดตัว และการกระจายตัวของตัวอย่างภายในเซลล์บรรจุที่ ต่างกัน รวมทั้ง ความชื้น ในภายในตัวอย่างที่แตกต่างกันด้วย
 - a) first derivative เป็นการหาความชันของสเปกตรัมซึ่งจะช่วยแก้ปัญหาที่สเปกตรัมมีค่าเพิ่มขึ้นคงที่ ตลอดช่วงความยาวคลื่น หรือการเลื่อนตัวของสเปกตรัมแกน y เนื่องจากอิทธิพลของความชื้นและ ขนาดของอนุภาคที่แตกต่างกัน การทำ first derivative ทำให้การแปลความหมายยากดังนั้นจึงนิยม ใช้ second derivative มากกว่า first derivative
 - b) second derivative การใช้ second derivative จะเป็นการเปลี่ยนแปลงความชันของสเปกตรัม สเปกตรัมที่ได้จะมีรูปร่างที่แตกต่างจากสเปกตรัมเริ่มต้น การทำการเปลี่ยนแปลงของความชัน สามารถแยกจุดยอดที่เหลื่อมซ้อนกันอยู่ สเปกตรัมที่ผ่านการปรับแต่งด้วยวิธี second derivative ที่ ได้จะมีจุดยอดที่เป็นบวกในด้านซ้ายและด้านขวา ส่วนจุดยอดตรงกลางจะอยู่ด้านตรงข้ามที่มีค่ามาก ที่สุดและตรงกับจุดยอดเริ่มต้น การคำนวณการเปลี่ยนแปลงความชันของสเปกตรัมสามารถแยกจุด ยอดของสเปกตรัมที่เหลื่อมซ้อนกันของสเปกตรัมเริ่มต้นได้ ดังนั้นข้อมูลที่ได้จากการปรับแต่ง สเปกตรัมด้วยวิธี second derivative จึงเป็นที่นิยมมากกว่าวิธี first derivative
- 2) min-max normalization สเปกตรัมจะถูกขยับเชิงเส้นเพื่อให้ค่า y ที่ต่ำสุดมีค่าเท่ากับศูนย์ แล้ว สเปกตรัมจะถูกขยายเพื่อให้ค่า y สูงสุดเท่ากับสองหน่วยของการดูดซับคลื่น ซึ่งสามารถลดอิทธิพล จากการยกตัวของเส้นสเปกตรัม
- 3) multiplicative scatter correction (MSC) สเปกตรัมที่ได้จากการวัดการดูดกลืนย่านแสง อินฟราเรดแบบ diffuse reflectance และแบบ transmission มักจะเกิดการกระเจิงแสง (scatter

light) ดังนั้น ได้มีการใช้วิธีทางคณิตศาสตร์ที่เรียกว่า MSC มาปรับแต่งสเปกตรัม เป็นการหาค่าเฉลี่ยของข้อมูลทั้งสเปกตรัมเพื่อลดอิทธิพลของการกระเจิงของแสง ซึ่งเป็นอีกวิธีหนึ่งที่นิยมใช้ในการลดค่าผิดพลาด

- 4) vector normalization (SNV) เป็นการทำให้สเปกตรัมกลาง จากนั้นผลรวมของค่ายกกำลังสองของค่า Y ทั้งหมดจะถูกคำนวณ และสเปกตรัมใดๆจะถูกหารด้วยค่ารากที่สองของผลรวมนี้ สิ่งนี้เรียกว่า vector norm ของสเปกตรัมที่ได้จะเท่ากับ 1 เสมอ ซึ่งสามารถลดอิทธิพลจากการยกตัวของเส้นสเปกตรัม
- 5) smoothing เป็นการหาค่าเฉลี่ยเคลื่อนโดยมีการแทนค่าการดูดกลืนแสงแต่ละความยาวคลื่นด้วยค่าเฉลี่ยของค่าการดูดกลืนแสงในช่วงความยาวคลื่นที่มีจุดศูนย์กลางในช่วงความยาวคลื่นตรงกับจุดที่ถูกแทนที่ ต่อจากนั้น เสนอช่วงไปหนึ่งความยาวคลื่น แล้วคำนวณค่าเฉลี่ยของช่วงความยาวคลื่น ซึ่งสามารถลดปัญหาของสัญญาณรบกวนต่อค่าการดูดกลืนแสง โดยจะได้สเปกตรัมที่มีลักษณะเหมือนสเปกตรัมดี เดิมแต่จะเรียบสมมา่กว่า [22]

2.7.4 ปัจจัยที่มีผลต่อการใช้เทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

1) ขนาดของอนุภาค

ขนาดของอนุภาคเป็นแหล่งของความผิดพลาดที่สำคัญ เพราะขนาดของตัวอย่างมีความสัมพันธ์กับการดูดกลืนแสง ซึ่งขึ้นอยู่กับคุณสมบัติขององค์ประกอบของสาร โดยตัวอย่างขนาดเล็กสามารถสะท้อนแสงได้ดีกว่าตัวอย่างขนาดใหญ่ ดังนั้นค่าการดูดกลืนแสงของเส้นสเปกตรัมตัวอย่างขนาดเล็กจึงมีค่าต่ำกว่าตัวอย่างขนาดใหญ่ ขนาดของอนุภาคยังขึ้นอยู่กับวิธีการเตรียมตัวอย่างอีกด้วย เพราะจะทำให้การวัดค่าองค์ประกอบทางเคมีต่างกัน จึงควรใช้การเตรียมตัวอย่างแบบเดียวกันทุกครั้งที่ทำารวัด และควรให้มีขนาดใกล้เคียงกัน

2) อุณหภูมิ

อุณหภูมิของตัวอย่างระหว่างการทำวัดโดยใช้อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีอาจทำให้เกิดข้อผิดพลาดในการวัดองค์ประกอบทางเคมี ทำการแก้ไขโดยควบคุมอุณหภูมิของห้องทดลองให้คงที่

3) ความชื้น

เป็นปัจจัยที่ก่อให้เกิดความผิดพลาดในการอ่านค่าองค์ประกอบทางเคมี ความชื้นอาจสูญเสียไปได้จากการเตรียมตัวอย่างและการเก็บรักษา [22]

2.7.5 วิธีการสร้างสมการ calibration

สมการ calibration ประกอบไปด้วยด้วยตัวแปร 2 ชนิด คือ ตัวแปรอิสระ (X) และตัวแปรตาม (Y) การหาตัวแปรอิสระที่มีความสัมพันธ์กับค่าตัวแปรตามเป็นสิ่งสำคัญของการสร้างสมการ calibration ซึ่งแบ่งได้ 2 วิธีหลัก คือ

- 1) wavelength selection เป็นการเลือกความยาวคลื่นเฉพาะซึ่งเป็นตัวแปรอิสระให้มีความสัมพันธ์กับค่าตัวแปรตามนั้น โดยการพิจารณาจากข้อมูลทางสถิติ ดังนี้
 - a) simple linear regression (SLR) เป็นการสร้างสมการที่ประกอบด้วยตัวแปรสองชนิดที่มีความสัมพันธ์กัน คือ ตัวแปรอิสระ (X) และตัวแปรตาม (Y) SLR เป็นการเลือกพิจารณาความสัมพันธ์เชิงปริมาณของตัวอย่างที่มีความยาวคลื่นเพียงความยาวคลื่นเดียว (single wavelength) การวิเคราะห์หองค์ประกอบทางเคมีด้วยอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีเป็นไปไม่ได้ที่จะใช้ความยาวคลื่นใด ความยาวคลื่นหนึ่งในการหาปริมาณองค์ประกอบทางเคมีของตัวอย่างได้ เนื่องจากตัวอย่างประกอบด้วยองค์ประกอบทางเคมีหลายชนิดด้วยกัน ดังนั้นจึงต้องใช้ข้อมูลจากหลายความยาวคลื่น (multiple wavelengths) เพื่อทำนายปริมาณองค์ประกอบทางเคมีของผลผลิตสมการ SLR สามารถเขียนได้ดังนี้ คือ

$$Y = b_0 + b_1X \quad (2.2)$$

เมื่อ $Y =$ ค่าองค์ประกอบทางเคมี
 $X =$ ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่นตำแหน่งเดียว
 $b_0 =$ ค่าคงที่จุดตัดแกน Y เมื่อ X มีค่าเท่ากับศูนย์
 $b_1 =$ ค่าคงที่การถดถอย

- b) multiple linear regression (MLR) เป็นวิธีการวิเคราะห์ผลทางสถิติที่นำตัวแปรอิสระ (X) มากกว่าหนึ่งตัวมาใช้ในการประมาณค่าตัวแปรตาม (Y) การนำเทคนิค MLR มาใช้ในการวิเคราะห์ผลมีข้อดีมากกว่าวิธี SLR หลายประการ เช่น สมการที่สร้างขึ้นสามารถนำไปใช้กับตัวอย่างที่มีองค์ประกอบซับซ้อนได้ อย่างไรก็ตามการสร้างสมการด้วยวิธี MLR มีข้อเสียคือการคัดเลือกตัวแปรอิสระหรือค่าการดูดกลืนแสงที่แต่ละความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับข้อมูลทางเคมีต้องใช้เวลารานาน จำนวนของตัวแปรอิสระหรือจำนวนของความยาวคลื่นที่นำมาใช้ในการสมการจะถูกจำกัด โดยจำนวนของตัวอย่างที่นำมาทำการทดสอบต้องมีตัวอย่างจำนวนมาก เพื่อให้สมการที่สร้างขึ้นมีความถูกต้องและแม่นยำ การคัดเลือกตัวแปรอิสระหรือความยาวคลื่นที่เหมาะสมจากความยาวคลื่นทั้งหมดมาสร้างสมการอาจได้ข้อมูลที่

ไม่ครอบคลุมมากพอ ทำให้ค่าที่ทำนายได้จากวิธีนี้ มีค่าต่ำกว่าหรือสูงกว่าค่าที่แท้จริง สมการ MLR สามารถเขียนได้ดังนี้คือ

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 \dots + b_nX_n \quad (2.3)$$

เมื่อ $X_1, X_2 \dots X_n =$ ค่าการดูดกลืนแสงที่ความยาวคลื่น n ตำแหน่ง

$$b_0, b_1 \dots b_n = \text{ค่าสัมประสิทธิ์การถดถอยที่ความยาวคลื่น } n \text{ ตำแหน่ง}$$

- 2) full spectrum method การที่จะพิจารณาเลือกความยาวคลื่นที่มีความสัมพันธ์กับค่าองค์ประกอบที่ศึกษานั้นค่อนข้างทำได้ยาก เกิดข้อผิดพลาดได้ง่าย การใช้ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดหรือในช่วงความยาวคลื่นที่สนใจจะช่วยให้สมการ calibration ที่ได้มีความถูกต้องมากขึ้น full spectrum method เป็นทางเลือกช่วงความยาวคลื่นที่เหมาะสมจากความยาวคลื่นทั้งหมดในสเปกตรัม (full spectrum) มาสร้างสมการโดยทำการลดจำนวนตัวแปรอิสระ (X) และสร้างตัวแปรกลุ่มใหม่ขึ้นมา วิธีทางสถิติที่นิยมใช้ได้แก่ 2 วิธีคือ principle component regression (PCR) และ partial least square regression (PLSR) ทั้งสองวิธีนี้ ต้องใช้ในการสร้างตัวแปรใหม่ที่เรียกว่า เฟกเตอร์ หรือองค์ประกอบ
- a) principle component regression (PCR) เป็นเทคนิคที่ใช้ในการลดจำนวนของตัวแปรอิสระ ในกรณีที่ตัวแปรอิสระมีจำนวนมากการลดจำนวนของตัวแปร คือ แบ่งกลุ่มตัวแปรที่มีความสัมพันธ์กันเพื่อสร้างตัวแปรขึ้นมาใหม่เรียกว่า เฟกเตอร์ หรือองค์ประกอบ เฟกเตอร์ที่สร้างขึ้นก็คือผลรวมของค่าสเปกตรัมทุกความยาวคลื่นที่น้ำหนักแตกต่างกัน เฟกเตอร์แรกจะถูกสร้างขึ้นมาให้สามารถอธิบายความแปรปรวนที่เหลือซึ่งจะทำให้ เฟกเตอร์แต่ละเฟกเตอร์แทบไม่มีความสัมพันธ์ต่อกัน ซึ่งเป็นข้อดีสำหรับการวิเคราะห์ด้วย PCR เมื่อทำการทำเฟกเตอร์เรียบร้อยแล้ว นำเฟกเตอร์ที่ได้มาทำ regression กับค่าทางเคมีโดยใช้วิธีกำลังสองน้อยที่สุด (least square method) ก็จะได้ค่า calibration coefficient
- b) partial least square regression (PLSR) วิธีจะคล้ายคลึงกับ PCR แต่จะต่างกันตรงที่วิธี PCR กระบวนการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมจะเป็นอิสระจากกระบวนการทำสมการถดถอยของสมการ calibration ซึ่งใน PLSR ทั้งสองกระบวนการจะถูกเชื่อมโยงเข้าไว้ด้วยกันโดยมีการนำค่าองค์ประกอบทางเคมีมาคิดรวมข้อมูลและเกี่ยวข้องกับการประเมินค่าทางเคมีทำให้ เฟกเตอร์ที่ได้จากวิธี PLSR สามารถอธิบายความแปรปรวนของข้อมูลและเกี่ยวข้องกับการประเมินค่าทางเคมี ในเวลา

เดียวกันสมการ calibration ที่ได้จากวิธี PLSR จึงประเมินค่าทางเคมีได้ถูกต้องมากขึ้น[22]

2.7.6 วิธีการทดสอบสมการ

เมื่อได้สมการ calibration แล้วจะต้องนำสมการที่ได้มาทดสอบเพื่อวัดประสิทธิภาพของสมการว่าสามารถใช้ในการประเมินค่าได้แม่นยำมากน้อยเพียงใด ด้วยวิธีการทดสอบสมการ (validation test) ซึ่งวิธีที่นิยมใช้ในเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีมี 3 วิธี คือ

- 1) cross validation วิธีนี้การทดสอบในลักษณะนี้เป็น การทดสอบภายใน (internal validation) มีวิธีทดสอบดังนี้ คือ
 1. ตัดตัวอย่างที่ 1 ออกไปจากกลุ่ม calibration แล้วนำตัวอย่างที่เหลือมาสร้างสมการ calibration เมื่อได้สมการ calibration แล้วก็นำมาประเมินค่าตัวอย่างที่ 1 ที่ตัดไปก่อนหน้า
 2. ตัดตัวอย่างที่ 2 ออกไปนำตัวอย่างที่ 1 กลับเข้ามาในกลุ่ม calibration รวมกับตัวอย่างอื่นๆที่เหลือเพื่อสร้างสมการ calibration เมื่อได้สมการ calibration นำมาประเมินค่าของตัวอย่างที่ 2 ทำซ้ำอย่างนี้ไปเรื่อยๆจนกระทั่งประเมินค่าตัวอย่างครบทุกตัวอย่างซึ่งตัวอย่างแต่ละตัวจะถูกตัดออก 1 ครั้ง เท่ากัน
 การทดสอบภายใน จะวัดผลโดยการดูค่า RMSECV (root mean square error of cross validation) เป็นการวัดค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ได้จากการประเมินโดยใช้สมการ calibration กับค่าที่วิเคราะห์ได้ (measured value or true value)
- 2) test set วิธีนี้มีการทดสอบคล้ายกับวิธี cross validation เพียงแต่จะตัดตัวอย่างที่ละกลุ่ม (ตามแต่กำหนด) เพื่อสร้างสมการ calibration จะวัดผลโดยการดูค่า RMSEP (root mean square error of prediction) เป็นการวัดค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่ได้จากการประเมินโดยใช้สมการ calibration กับค่าที่วิเคราะห์ได้
- 3) การทดสอบตัวอย่างที่ไม่รู้จัก (unknown testing) เป็นการทดสอบโดยนำกลุ่มตัวอย่างชุดใหม่ (external validation) มาประเมินค่าจากสมการ calibration ที่ได้ โดยตัวอย่างชุดใหม่นี้นำมาวิเคราะห์ต้องมีวิธีการเตรียมตัวอย่างการวัดสเปกตรัมสภาวะในการทดลองรวมไปถึงการแปลงข้อมูลสเปกตรัมต้องเหมือนกับกลุ่ม calibration ข้อควรระวัง คือ ตัวอย่างในกลุ่มใหม่จะต้องมีค่าที่ต้องการประเมินอยู่ในช่วงของกลุ่ม calibration การทดสอบลักษณะนี้มีวิธีการ คือ นำตัวอย่างกลุ่มใหม่มาวิเคราะห์หาค่าที่ต้องการ เช่น ค่าโปรตีนโดยใช้วิธีวิเคราะห์แบบ reference

methods แทนด้วยข้อมูลชุด X และนำไปวัดสเปกตรัมด้วยเครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแล้วนำค่าที่ได้ไปแทนค่าในสมการ calibration แทนด้วยข้อมูลชุด Y น้ำผลที่ได้จากทั้งสองวิธีมาพิจารณาเปรียบเทียบ โดยมีค่าทางสถิติที่ใช้วัดคือ SEP (standard error of prediction) หรือ RMSEP (root mean square error of prediction) และ bias ซึ่งค่าสถิติเหล่านี้เป็นค่าที่บ่งบอกถึงประสิทธิภาพของสมการ calibration ถ้าผลการทำนายปริมาณองค์ประกอบทางเคมีใกล้เคียงกับผลที่อ้างอิง และให้ค่าทางสถิติที่ดีแสดงว่าสมการทำนายปริมาณองค์ประกอบทางเคมีนั้นยอมรับได้ และสามารถนำไปใช้ทำนายปริมาณตัวอย่างต่อไปได้อย่างถูกต้อง [22]

2.7.7 สมรรถนะของแบบจำลอง

1) ค่าเฉลี่ย (mean; \bar{x}) [23]

\bar{x} เป็นค่ากลางที่ได้จากการนำข้อมูลแต่ละตัวอย่างมารวมกัน แล้วนำผลรวมที่ได้หารด้วยจำนวนข้อมูลทั้งหมดโดยสามารถหาค่าเฉลี่ยได้จากสมการ

$$\bar{x} = \frac{\sum x_i}{N} \quad (2.4)$$

เมื่อ \bar{x} = ค่าเฉลี่ยของตัวอย่าง

x_i = ค่าของแต่ละตัวอย่าง

N = จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

2) ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (standard deviation; SD) [23]

เป็นค่าเฉลี่ยของความคลาดเคลื่อนของข้อมูลแต่ละตัวอย่างกับค่าเฉลี่ย หมายถึงโดยเฉลี่ยแล้ว ข้อมูลแต่ละตัวมีความแตกต่างจากค่าเฉลี่ยเล็กน้อยเพียงใด หากแตกต่างมากแสดงว่าข้อมูลมีการกระจายมาก หากแตกต่างน้อยแสดงว่าข้อมูลมีการกระจายน้อย โดยสามารถหาค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานได้จากสมการ

$$SD = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N-1}} \quad (2.5)$$

เมื่อ SD = ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน

x_i = ค่าของแต่ละตัวอย่าง

\bar{x} = ค่าเฉลี่ยของตัวอย่าง

N = จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

3) ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา (coefficient of determination; R^2) [24]

R^2 คือ ค่าที่แสดงสัดส่วนของความแปรปรวนในตัวแปรอิสระ (X) ที่สามารถอธิบายความแปรปรวนในตัวแปรตาม (Y) ซึ่งค่าของ R^2 จะเป็นบวกเสมอ และสามารถเปรียบเทียบค่า R^2 ของแบบจำลองที่สร้างจากตารางที่ 2.1 เพื่อพิจารณาสมรรถนะของแบบจำลอง โดยสามารถหาค่า R^2 ได้จากสมการ

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (2.6)$$

เมื่อ R^2 = ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา

y_i = ค่าอ้างอิงของแต่ละตัวอย่าง

\hat{y} = ค่าทำนายของแต่ละตัวอย่าง

\bar{y} = ค่าเฉลี่ยของค่าอ้างอิงของตัวอย่าง

N = จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

ตารางที่ 2.1 การแปลความหมายของค่า R และ R^2 [24]

R	R^2	ความหมาย
0±0.5	<0.25	ไม่สามารถใช้ใน NIR calibration
±0.51-0.70	0.26-0.49	เป็นความสัมพันธ์ที่ไม่ดี ควรหาเหตุผล
±0.71-0.80	0.50-0.64	OK สำหรับการคัดเลือก (แบ่งกลุ่ม) อย่างหย่าบ
±0.81-0.90	0.66-0.81	OK สำหรับการคัดเลือก (แบ่งกลุ่ม) และการประมาณค่าอย่างหย่าบๆ
±0.91-0.95	0.83-0.90	ใช้ด้วยความระมัดระวังในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการวิจัย
±0.96-0.98	0.92-0.96	ใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ
±0.99+	>0.98	ดีเยี่ยม ใช้ได้กับทุกการประยุกต์ใช้

4) ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของแบบจำลอง (root mean squares error of estimation; RMSEE) [24]

RMSEE เป็นค่าที่แสดงสมรรถนะของแบบจำลองสำหรับชุด calibration โดยสามารถหาค่า RMSEE ได้จากสมการ

$$RMSEE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}} \quad (2.7)$$

เมื่อ $RMSEE$ = ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของแบบจำลอง

y_i = ค่าอ้างอิงของแต่ละตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด calibration

\hat{y} = ค่าทำนายของแต่ละตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด calibration

N = จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

- 5) ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้ (root mean squares error of cross validation; RMSECV) [24]

RMSECV เป็นค่าที่แสดงสมรรถนะของแบบจำลองสำหรับชุด validation ที่สร้างด้วยวิธี cross validation โดยสามารถหาค่า RMSECV ได้จากสมการ

$$RMSECV = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}} \quad (2.8)$$

เมื่อ $RMSECV$ = ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้

y_i = ค่าอ้างอิงของแต่ละตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด validation

\hat{y} = ค่าทำนายของแต่ละตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด validation

N = จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

- 6) ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการทำนาย (root mean squares error of prediction; RMSEP) [24]

RMSEP เป็นค่าที่แสดงสมรรถนะของแบบจำลองสำหรับชุด validation ที่สร้างด้วยวิธี test set และ prediction โดยสามารถหาค่า RMSEP ได้จากสมการ

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}} \quad (2.9)$$

เมื่อ $RMSEP$ = ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการทำนาย

y_i = ค่าอ้างอิงของแต่ละตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด validation

\hat{y} = ค่าทำนายของแต่ละตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด validation

N = จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

- 7) ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของความคลาดเคลื่อนสำหรับการทำนาย (standard deviation of error of prediction; SEP) [24]

SEP คือ ค่าความคลาดเคลื่อนมาตรฐานของการทำนาย โดยสามารถหาค่า SEP ได้จากสมการ

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N-1}} \quad (2.10)$$

เมื่อ SEP = ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของความคลาดเคลื่อนสำหรับการทำนาย

y_i = ค่าอ้างอิงของแต่ละตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด prediction

\bar{y} = ค่าเฉลี่ยของค่าอ้างอิงของตัวอย่างสำหรับข้อมูลชุด prediction

N = จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

- 8) อัตราส่วนของพิสัยควอร์ไทล์ต่อค่าความคลาดเคลื่อนก้ำลึงสองเฉลี่ย (ratio of performance to inter-quartile range; RPIQ) [25]

8.1 สำหรับแบบจำลองทำสร้างด้วยวิธี cross validation สามารถหาค่า RPIQ ได้จากสมการ

$$RPIQ = \frac{Q_3 - Q_1}{RMSECV} \quad (2.11)$$

เมื่อ $RPIQ$ = อัตราส่วนของพิสัยควอร์ไทล์ต่อค่าความคลาดเคลื่อนก้ำลึงสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้

Q_3 = ค่าทำนายที่ควอร์ไทล์ที่ 3

Q_1 = ค่าทำนายที่ควอร์ไทล์ที่ 1

$RMSECV$ = ค่าความคลาดเคลื่อนก้ำลึงสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้

8.2 สำหรับแบบจำลองทำสร้างด้วยวิธี test set สามารถหาค่า RPIQ ได้จากสมการ

$$RPIQ = \frac{Q_3 - Q_1}{RMSEP} \quad (2.12)$$

เมื่อ $RPIQ$ = อัตราส่วนของพิสัยควอร์ไทล์ต่อค่าความคลาดเคลื่อนก้ำลึงสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้

Q_3 = ค่าทำนายที่ควอร์ไทล์ที่ 3

Q_1 = ค่าทำนายที่ควอร์ไทล์ที่ 1

$RMSEP$ = ค่าความคลาดเคลื่อนก้ำลึงสองเฉลี่ยของการทำนาย

- 9) ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย (bias) [24]

Bias คือ ค่าเฉลี่ยของความคลาดเคลื่อนระหว่างค่าอ้างอิงและค่าทำนายจากแบบจำลอง โดยสามารถหาค่า bias ได้จากสมการ

$$bias = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)}{N} \quad (2.13)$$

เมื่อ $bias$ = ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย

y_i = ค่าอ้างอิงของแต่ละตัวอย่าง

\hat{y} = ค่าทำนายของแต่ละตัวอย่าง

$N =$ จำนวนตัวอย่างทั้งหมด

2.8 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

จากงานวิจัยเรื่อง Feasibility of monitoring acetic acid process using near-infrared spectroscopy [4] พบว่า กรดอะซิติกสามารถดูดกลืนคลื่นในช่วง 1,800-2,500 nm ซึ่งเป็นช่วงของ hydrogen bonded -OH band ของ carboxylic acid ในช่วงเนียร์อินฟราเรดและมีการดูดซับคลื่นเนียร์อินฟราเรด ที่ความยาวคลื่น 1,680 nm และ 1,724 nm

จากงานวิจัยเรื่อง Monitoring of the cellulosic ethanol fermentation process by near-infrared spectroscopy [5] พบว่าสามารถใช้เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีทำนายปริมาณเอทานอล จาก production of second generation (2G) or cellulosic ethanol ได้

จากงานวิจัยเรื่อง Rapid detecting total acid content and classifying different types of vinegar based on near infrared spectroscopy and least-squares support vector machine. [6] พบว่าสามารถใช้เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีทำนายความเข้มข้นรวม และจำแนกประเภทของ น้ำส้มสายชูได้

จากงานวิจัยเรื่อง Real-time monitoring of process parameters in rice wine fermentation by a portable spectral analytical system combined with multivariate analysis. [7] พบว่าสามารถใช้เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีทำนายความเข้มข้นรวมของน้ำตาล (total sugar content) ความเข้มข้นของแอลกอฮอล์ และ pH ในไวน์ข้าวได้

จากงานวิจัยเรื่อง Comparison of calibrations for the determination of soluble solids content and pH of rice vinegars using visible and short-wave near infrared spectroscopy. [8] พบว่าสามารถใช้เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีทำนายของแข็งทั้งหมดที่ละลายได้ (soluble solids content) และ pH ของน้ำส้มสายชูข้าวได้

จากงานวิจัยเรื่อง Prediction of organic acids and other quality parameters of wine vinegar by near-infrared spectroscopy. [9] พบว่าสามารถใช้เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีทำนายกรดอินทรีย์ และค่าคุณภาพอื่น ๆ ในข้าวส้มสายชูองุ่นได้

จากงานวิจัยเรื่อง Prediction of the concentrations of ethanol and acetic acid in the culture broth of rice vinegar fermentation using near-infrared spectroscopy. [10] พบว่า การวิเคราะห์แบบจำลองด้วยวิธี multiple linear regression (MLR) สามารถทำนายความเข้มข้นของกรดอะซิติกและเอทานอลด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีได้ แต่ตัวอย่างที่ใช้ในการทดลองยังมีน้อยเกินไป

บทที่ 3

วิธีการทดลอง

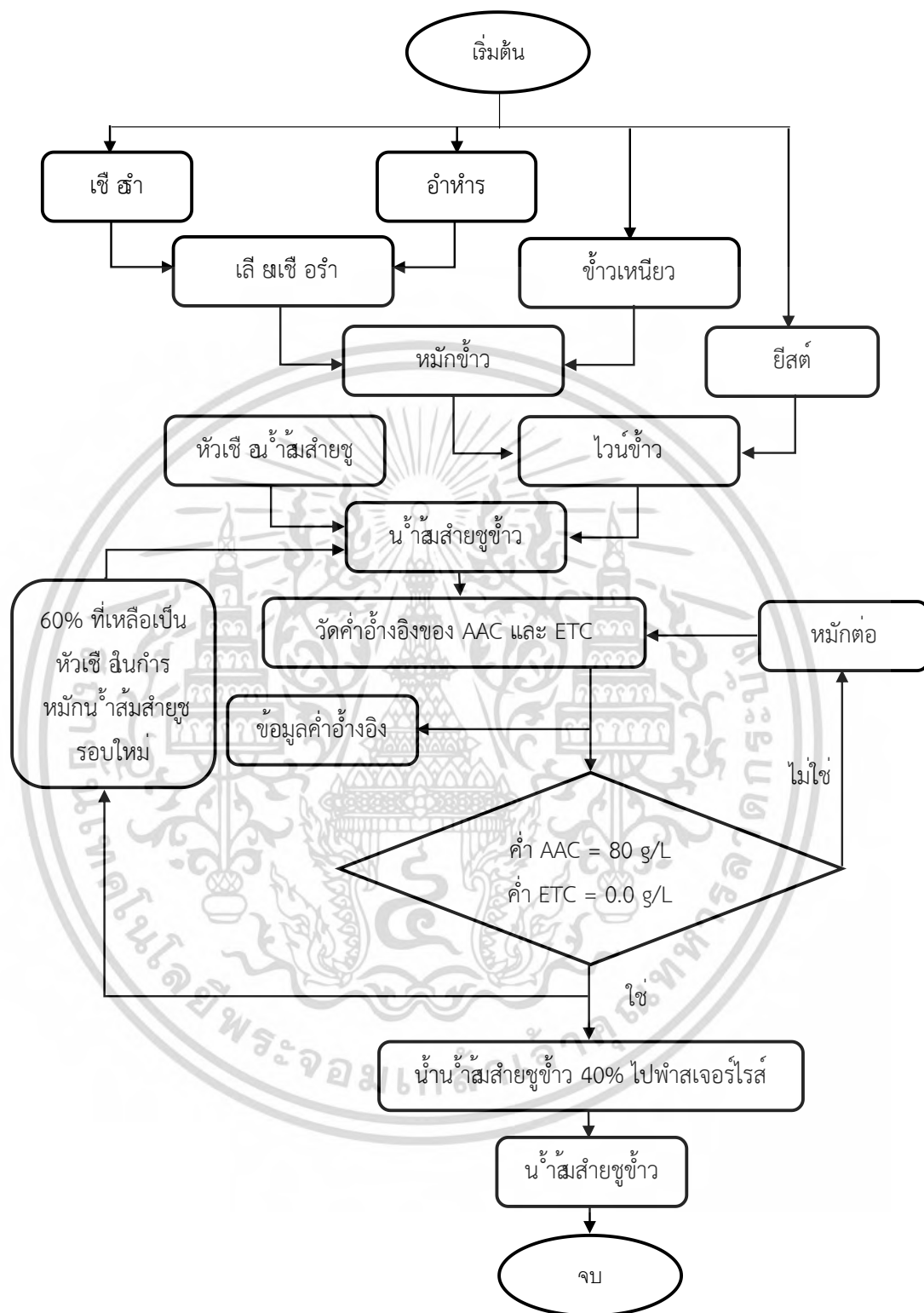
3.1 ตัวอย่าง

น้ำส้มสายชูข้าวหมักจากข้าวเหนียว หมักด้วยถังหมักแบบ Venturi injector bioreactor ที่ห้องปฏิบัติการเทคโนโลยีการหมัก สำนักเทคโนโลยี คณะอุตสาหกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง โดยเริ่มกระบวนการที่ค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) เท่ากับ 45 ± 1 g/L และค่าความเข้มข้นของเอทานอล (ETC) เท่ากับ 35 ± 1 g/L และมีค่าความเข้มข้นรวม (TC) เท่ากับ 80 g/L เมื่อเริ่มต้นกระบวนการหมัก และเปลี่ยนเป็นกรดอะซิติกที่มีค่า AAC เท่ากับ 80 g/L เมื่อจบกระบวนการ ซึ่งหมายความว่าสามารถนำน้ำส้มสายชูไปพาสเจอร์ไรซ์ และนำไปเจือจางเพื่อรับประทาน

การเก็บตัวอย่างทุกวันต้องนำน้ำหมักปริมาณ 100 ml ออกจากถังหมัก แล้วแบ่งเป็นสองส่วน ส่วนแรกเก็บน้ำหมักปริมาณ 10 ml ในขวดสีชาแล้วนำไปแช่น้ำแข็งเพื่อให้มีอุณหภูมิ $0 \pm 1^{\circ}\text{C}$ เป็นก่อนยับยั้งกิจกรรมของแบคทีเรียก่อนนำไปสแกน ส่วนน้ำหมักที่เหลือนำไปทำค่าอ้างอิง



รูปที่ 3.1 น้ำส้มสายชูข้าวเหนียว

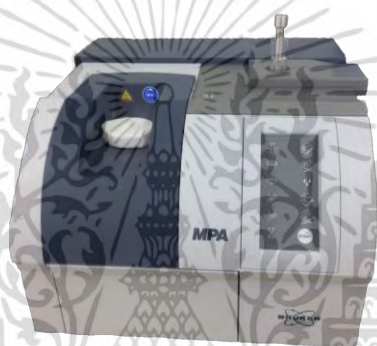


รูปที่ 3.2 การหมักน้ำสลายชูและการเก็บข้อมูลของค่าอ้างอิง

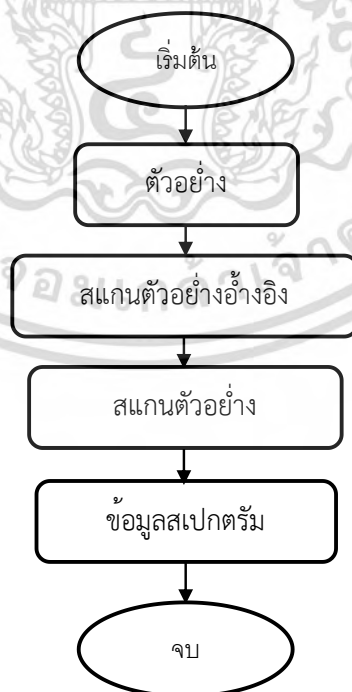
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.2 การสแกนด้วยคลื่นเนียร์อินฟราเรด

ใช้ FT (Fourier transform)-NIR spectrometer (MPA, Bruker, Germany) ในการสแกนตัวอย่าง โดยหยดน้ำส้มสายชูในหลอดแก้ว (ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลาง 22 mm สูง 48 mm) และใส่แท่งอลูมิเนียมที่มีกั้นความลึก 0.1 mm โดยสแกนในช่วงความยาวคลื่น $12,500-4,000\text{ cm}^{-1}$ ($800-2,500\text{ nm}$) สแกนทุกๆ 16 cm^{-1} และสแกน 32 ครั้งต่อ 1 สเปกตรัม ก่อนการสแกนตัวอย่างสแกนแผ่นทองคำซึ่งเป็นวัสดุอ้างอิงทุกครั้ง ทุกตัวอย่างสแกนที่อุณหภูมิ $25\pm 1^{\circ}\text{C}$ และตัวอย่างอุณหภูมิ $0.0^{\circ}\pm 1.0^{\circ}\text{C}$ เพื่อป้องกันไม่ให้แบคทีเรียในน้ำส้มสายชูขั้วเจริญ ได้จำนวนตัวอย่าง 152 ตัวอย่าง และสแกนกรดอะซิติก 99.85% (bp chemical, Malaysia) และเอทานอล 99.50% (merck, Germany) เช่นเดียวกับการสแกนตัวอย่าง



รูปที่ 3.3 FT-NIR spectrometer



รูปที่ 3.4 การเก็บข้อมูลของสเปกตรัม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.3 การวัดค่าอ้างอิง

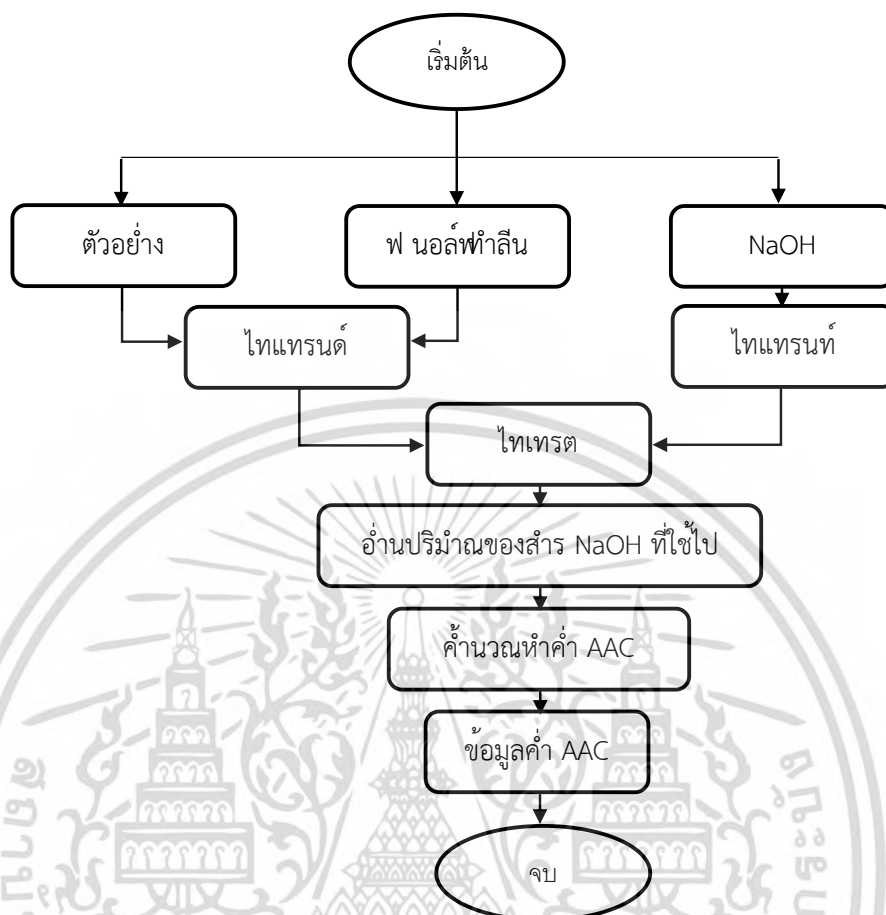
3.3.1 ค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC)

ทำได้จากการไทเทรตกรดเบสด้วย NaOH 0.1 M และใช้ฟีนอล์ฟทาลีนเป็นอินดิเคเตอร์ โดยใส่น้ำส้มสายชูขาวปริมาณ 6 ml ลงในขวดรูปชมพู่ขนาด 50 ml และหยดสารละลายฟีนอล์ฟทาลีนประมาณ 2-3 หยดแล้วเขย่าให้เข้ากัน จากนั้นนำมาไทเทรตกับสารละลาย NaOH 1 N จนเปลี่ยนสีจากสีเหลืองขุ่นเป็นสีชมพูอ่อน แสดงว่าถึงจุดยุติ ปริมาณในหน่วย ml ของสารละลาย NaOH ที่ใช้ตั้งแต่เริ่มต้นจนถึงจุดยุติ แล้วนำไปคำนวณหาค่า AAC



รูปที่ 3.5 การไทเทรต

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



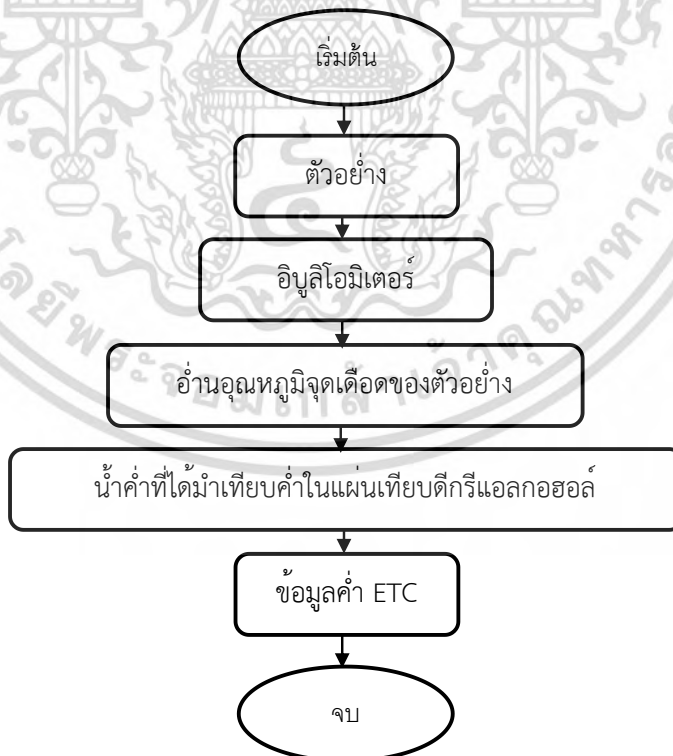
รูปที่ 3.6 การเก็บข้อมูลของค่า AAC

3.3.2 ค่าความเข้มข้นของเอทานอล (ETC)

ทำได้จากเครื่องอีบูลลิโอมิเตอร์ (Ebulliometer) โดยใส่น้ำหมักประมาณ 50 ml และน้ำเย็น ลงในอีบูลลิโอมิเตอร์ ใส่เทอร์โมมิเตอร์ลงในอีบูลลิโอมิเตอร์ จุดตะเกียงแอลกอฮอล์ ต้มจนกระทั่งน้ำหมักเดือดที่อุณหภูมิคงที่ อ่านค่าอุณหภูมิจุดเดือดของน้ำหมักจากเทอร์โมมิเตอร์ แล้วนำค่าที่ได้ไปอ่านในแผ่นเปอร์เซ็นต์แอลกอฮอล์ โดยตั้งจุดเดือดของน้ำให้ตรงกับ 0.0% แล้วอ่านอุณหภูมิจุดเดือดของน้ำส้มสยชู (ดูที่สเกลใน) ที่อยู่ตรงกับเปอร์เซ็นต์แอลกอฮอล์ (ดูสเกลนอก) จากแผ่นเปอร์เซ็นต์แอลกอฮอล์ ค่าที่ได้คือค่า ETC



รูปที่ 3.7 อีบูลิโอมิเตอร์



รูปที่ 3.8 การเก็บข้อมูลของค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

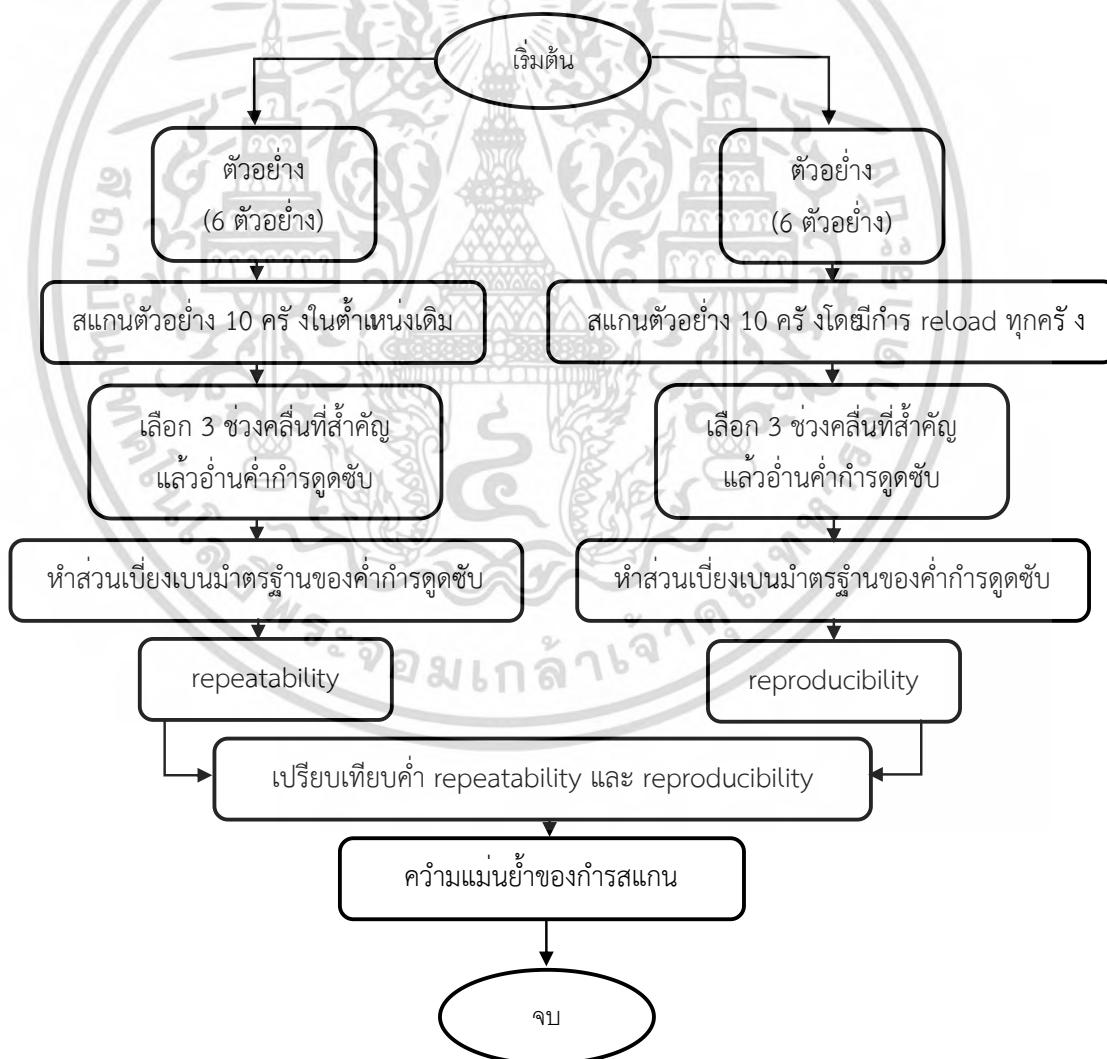
3.4 repeatability, reproducibility และ R^2_{\max}

3.4.1 repeatability ของการสแกน

ทำได้จากการสแกนค่าซ้ำ โดยสแกนตัวอย่าง 10 ครั้ง ที่ตำแหน่งเดียวกัน จากนั้นนำส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) ของการดูดซับของการสแกน โดยเลือกช่วงคลื่น 3 คลื่นน้ำมาวิเคราะห์ ในงานวิจัยนี้เลือกช่วงคลื่นที่ $1,0309.0 \text{ cm}^{-1}$ (970 nm), $6,896.6 \text{ cm}^{-1}$ (1,450 nm) และ $5,154.6 \text{ cm}^{-1}$ (1,940 nm) คลื่นเหล่านี้ เป็นช่วงการสั่นสะเทือนของน้ำซึ่งน้ำเป็นองค์ประกอบที่สำคัญในน้ำส้มสายชู

3.4.2 reproducibility ของการสแกน

ทำได้จากการสแกนค่าซ้ำ โดยสแกนตัวอย่าง 10 ครั้ง แต่ทำการ reload ทุกครั้งก่อนสแกน จากนั้นนำส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน ของการดูดซับของการสแกนโดยเลือกช่วงคลื่น 3 คลื่นน้ำมาวิเคราะห์ เลือกช่วงคลื่นเดียวกับค่า repeatability ของการสแกน



รูปที่ 3.9 การหาค่า repeatability และ reproducibility

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

3.4.3 repeatability ของวิธีอ้างอิง (Rep)

เป็นตัวชี้วัดความสามารถในการทำซ้ำจากการวัดค่าอ้างอิง ทำได้จากค่า ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของผลต่างที่มากที่สุดในการทำซ้ำของตัวอย่างเดียวกันด้วยวิธีอ้างอิงของทุกตัวอย่าง

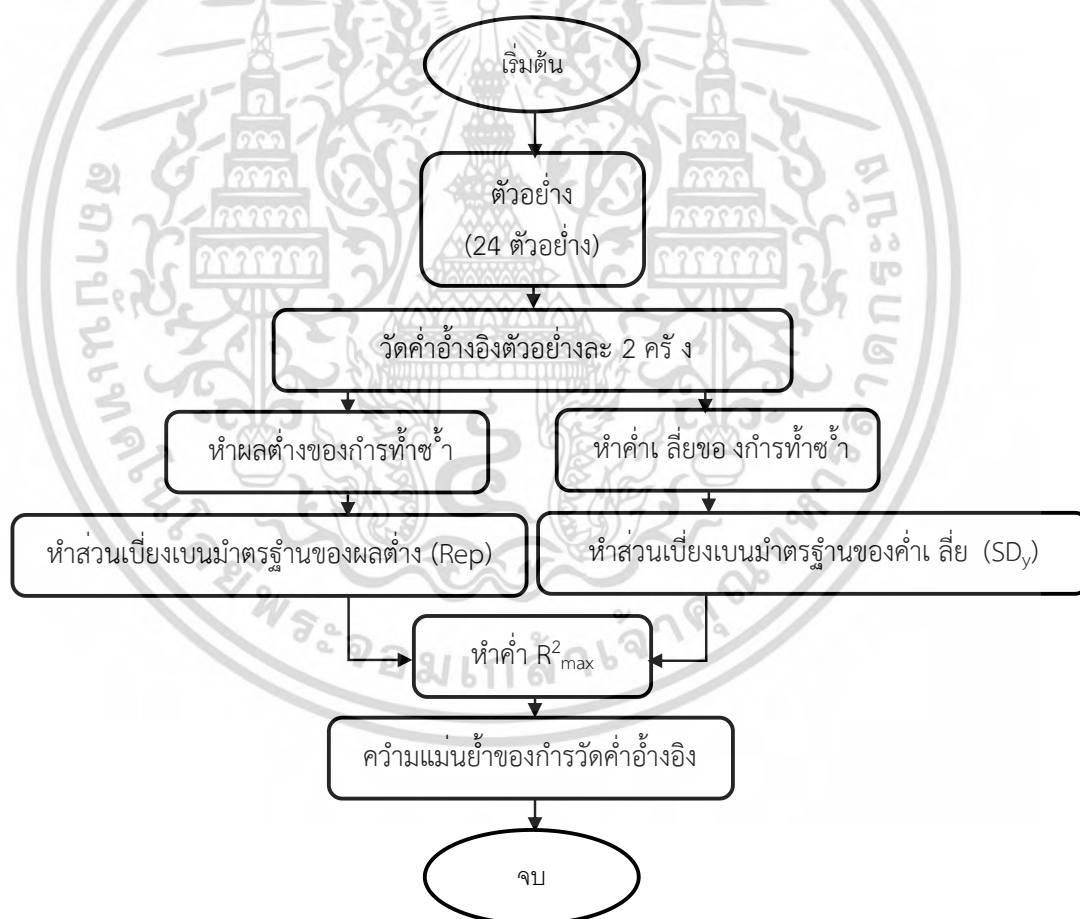
3.4.4 ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณาสูงสุด (R^2_{max})

คือค่าสูงสุดของ R^2 เนื่องจากไม่มีความคลาดเคลื่อนจากเครื่องสเปกโทรมิเตอร์ มีเพียงความคลาดเคลื่อนจากวิธีอ้างอิงเท่านั้น สามารถทำได้จากสมการ [24]

$$R^2_{max} = \frac{SD_y^2 - Rep^2}{SD_y^2} \quad (3.1)$$

เมื่อ SD_y = ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของข้อมูลชุด calibration

Rep = repeatability ของวิธีอ้างอิง



รูปที่ 3.10 การหาค่า R^2_{max}

3.5 การวิเคราะห์ผลการทดลอง

3.5.1 วิเคราะห์ค่านอกกลุ่ม (outlier)

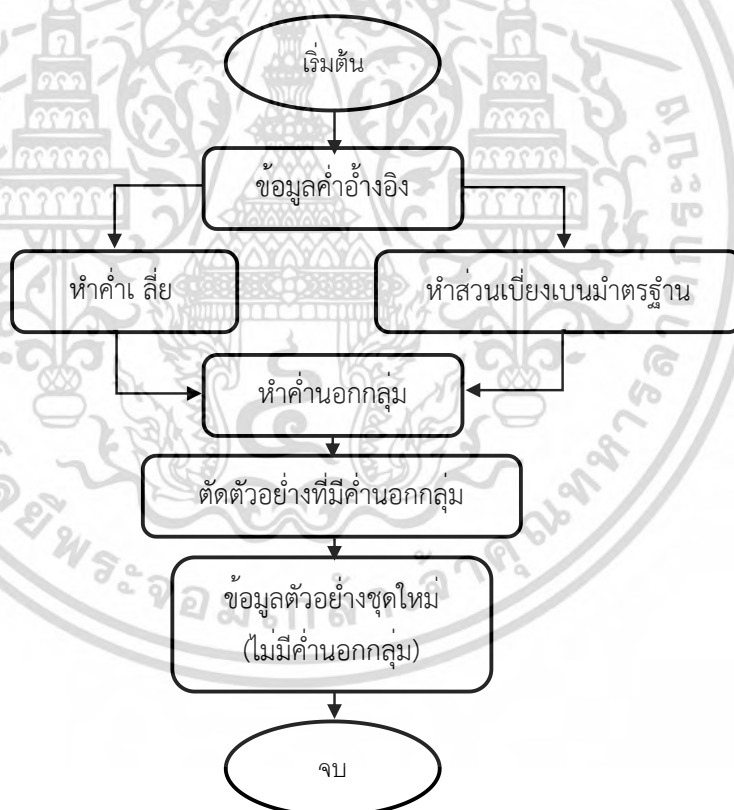
ในการทดลองอาจเกิดความผิดพลาดจากตัวอย่างหรือในกระบวนการทดลอง ทำให้เกิดค่านอกกลุ่ม ซึ่งสามารถทำได้จากสมการ 2.2 โดยค่าที่ได้จากการคำนวณจะต้องมีค่าไม่เกิน ± 3 ถ้าหากข้อมูลใดมีค่าเกินที่กำหนด ค่านี้ จะเป็นค่านอกกลุ่ม จึงจำเป็นต้องตัดข้อมูลนี้ นอกจากการสร้างแบบจำลอง เพื่อให้แบบจำลองมีประสิทธิภาพสูงที่สุด [25]

$$-3 \leq \frac{X_i - \bar{X}}{SD} \leq 3 \quad (3.2)$$

เมื่อ X_i = ค่าที่ได้จากข้อมูลแต่ละตัวอย่าง

\bar{X} = ค่าเฉลี่ยทั้งหมดของข้อมูล

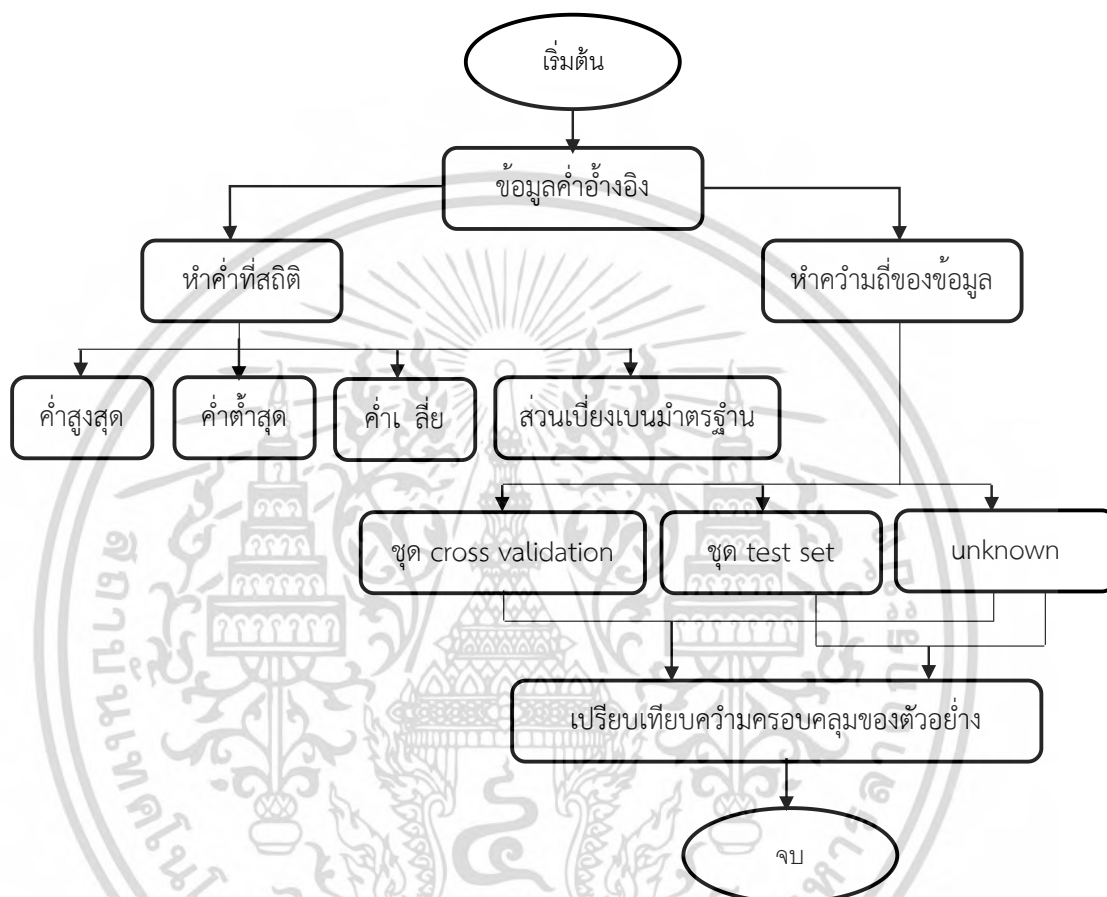
SD = ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของข้อมูลทั้งหมด



รูปที่ 3.11 การตัดข้อมูลที่มีค่านอกกลุ่ม

3.5.2 การวิเคราะห์ผลการทดลองเบื้องต้น

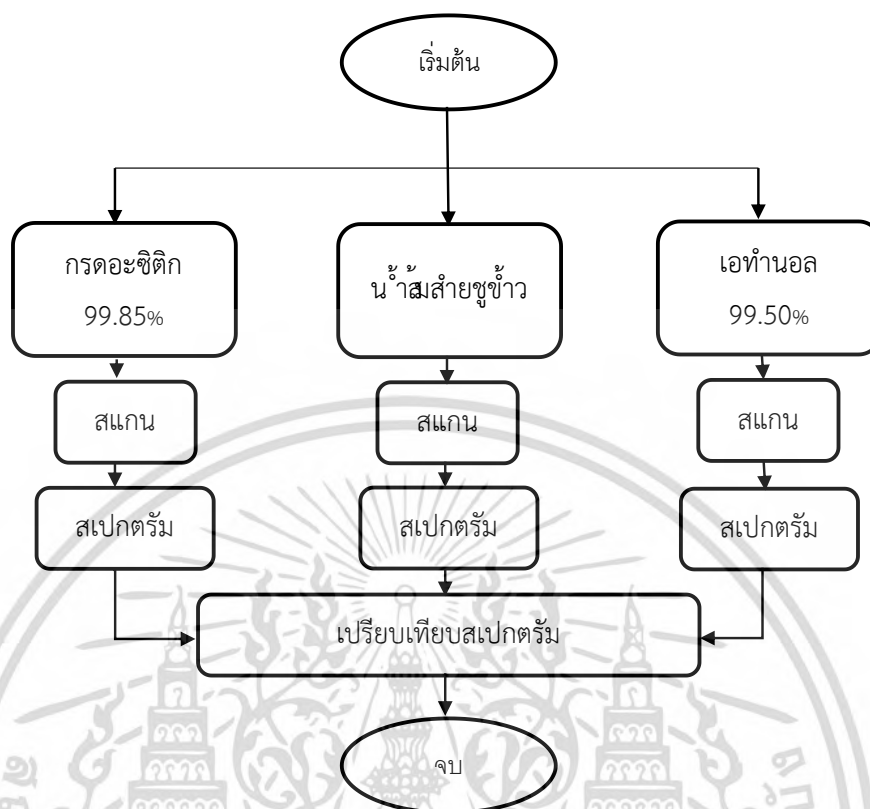
จากกำรวัดค่า AAC และ ETC วิเคราะห์หาค่าสูงสุด ค่าต่ำสุด ค่าเฉลี่ย และส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของข้อมูลที่ทำกำรทดลอง และควมถี่ของข้อมูลที่น่ามำใช้ในการสร้างแบบจำลอง และตัวอย่างที่ไม่รู้จัก



รูปที่ 3.12 กำรวิเคราะห์ผลกำรทดลองเบื้องต้น

3.5.3 การวิเคราะห์ลักษณะของสเปกตรัม

วิเคราะห์สเปกตรัมเฉลี่ยของกรดอะซิติก 99.85% เอทานอล 99.50% และน้ำส้มสายชูข้าว ที่ควมยาวคลื่น 12,500–3,600 cm^{-1} (800–2,778 nm) ด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer แล้วนำมำสร้างกราฟสเปกตรัม เพื่อพิจำรณำลักษณะกำรดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดในน้ำกรดอะซิติกบริสุทธิ์ เอทานอลบริสุทธิ์ และน้ำส้มสายชูข้าว จำกันั้น นำน้ำแต่ละสเปกตรัมมำเปรียบเทียบกัน



รูปที่ 3.13 การวิเคราะห์ลักษณะของสเปกตรัม

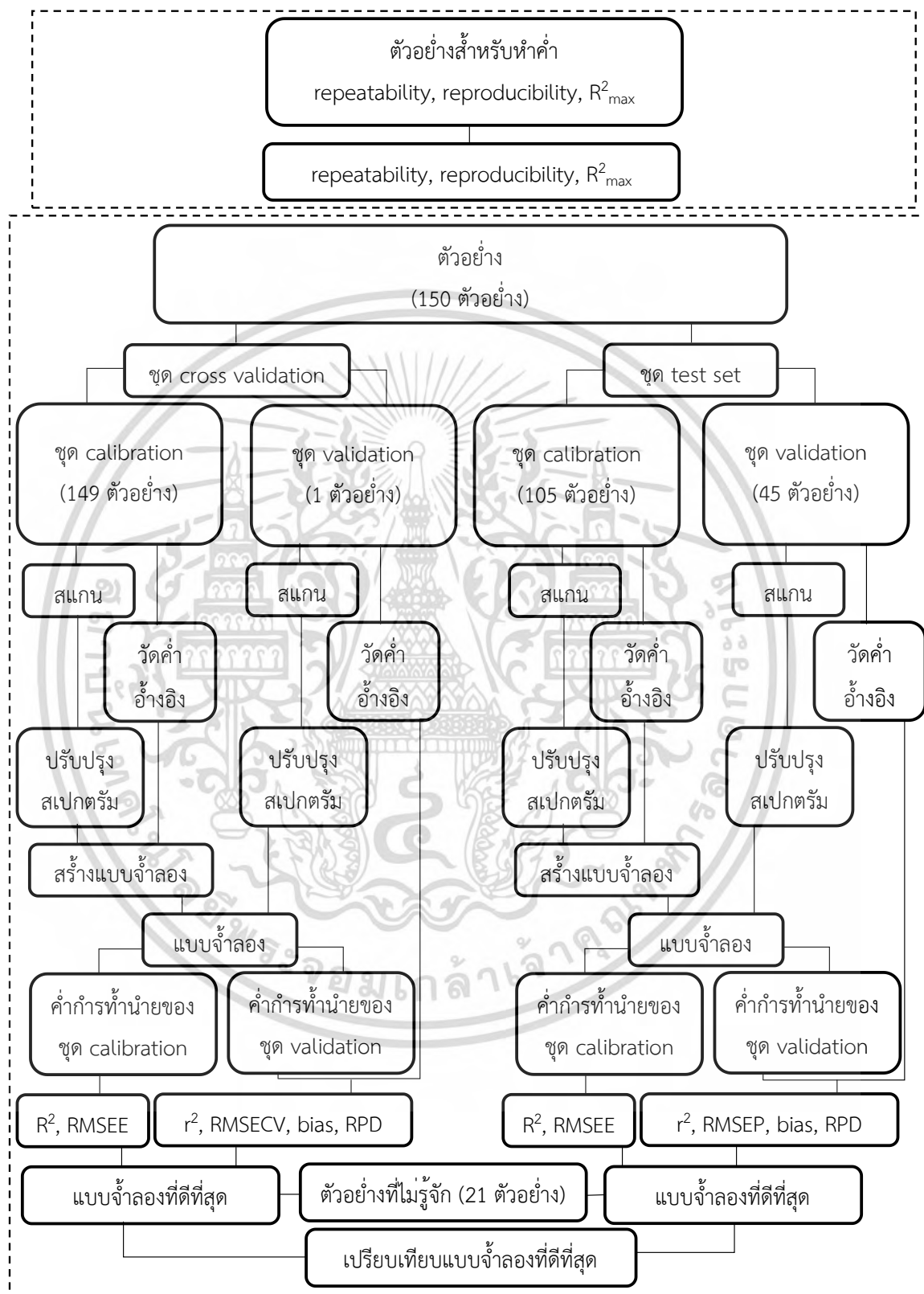
3.6 การสร้างและพิสูจน์แบบจำลอง

แบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายการเกิดกรดอะซิติกและเอทานอลในถังหมักน้ำส้มสายชูสร้างด้วยวิธี PLSR (partial least squares regression) จากการทำวิเคราะห์ด้วยซอฟต์แวร์ multivariate analysis (OPUS, v 7.0.129, Germany) โดยสเปกตรัมที่ใช้จะไม่มีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นและมีการจัดการสเปกตรัมเบื้องต้น ได้แก่ constant offset elimination, straight line subtraction, vector normalization (SNV), min-max normalization, multiplicative scattering correction (MSC), first derivative, second derivative, first derivative + straight line subtraction, first derivative + SNV และ first derivative + MSC โดยมีกำพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation และ test set เมื่อได้แบบจำลองมาแล้วจะพิจารณาคุณสมบัติต่างๆ เพื่อหาแบบจำลองที่ดีที่สุด โดยพิจารณา ดังนี้ ค่าสัมประสิทธิ์การพิจารณา (coefficient of determination; R^2) ควรมีค่าสูง ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของแบบจำลอง (root mean squares error of estimation; RMSEE) ควรมีค่าต่ำ ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการพิสูจน์แบบไขว้ (root mean square error of cross validation; RMSECV) ควรมีค่าต่ำ ค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ยของการทำนาย (root mean squared error of prediction; RMSEP) ควรมีค่าต่ำ อัตราส่วนของพิสัย

ควอร์ไทล์ต่อค่าความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ย (ratio of performance to inter-quartile range; RPIQ) ควรมีค่าสูง ส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานของความคลาดเคลื่อนสำหรับการทำนาย (standard deviation of error of prediction; SEP) ควรมีค่าต่ำ และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ย (bias) ควรมีค่าต่ำ จากนั้นบันทึกค่า และสร้างกราฟ regression coefficient และ x-loading weight แล้วดำเนินการทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จัก (unknown) เพื่อทดสอบใช้แบบจำลอง



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 3.14 การสร้างและพิสูจน์แบบจำลอง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 4

ผลการทดลอง

4.1 repeatability, reproducibility และ R^2_{max}

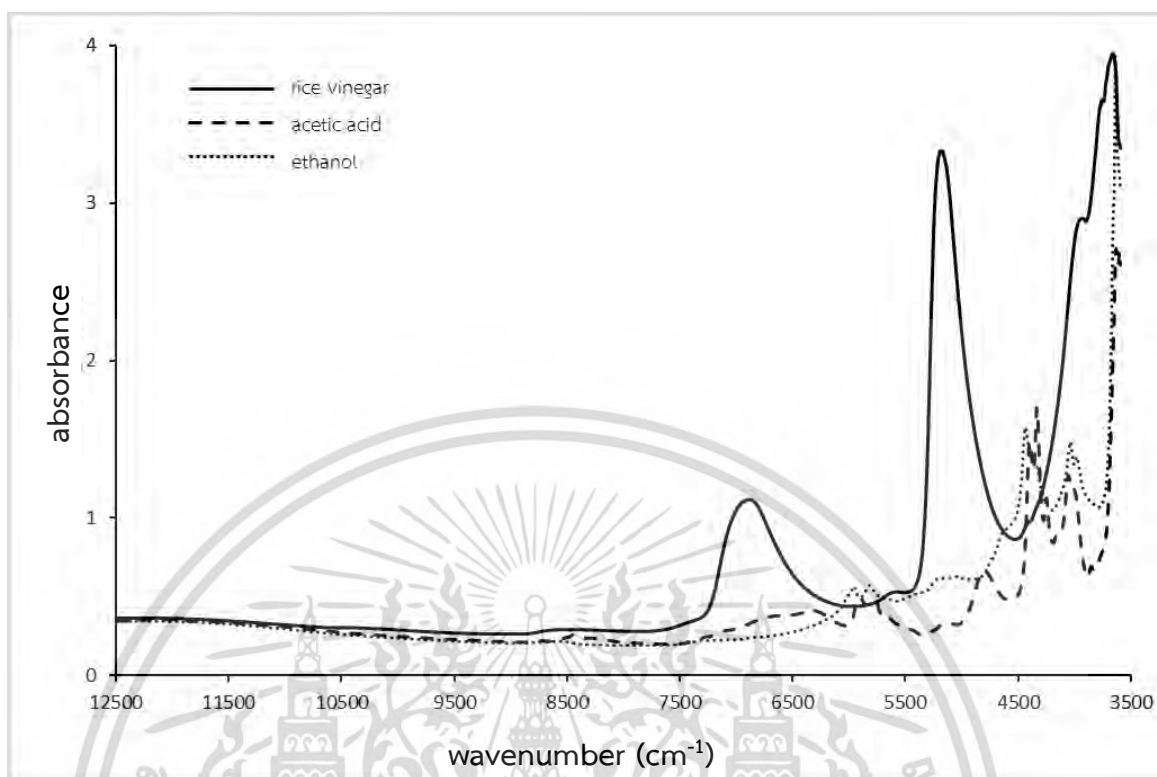
จากตารางที่ 4.1 ในการสแกนตัวอย่างน้ำส้มสายชูพบว่าค่า repeatability มีค่าเท่ากับ 0.0206 และค่า reproducibility มีค่าเท่ากับ 0.1346 และในการวัดค่าด้วยวิธีอ้างอิงสำหรับความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) พบว่าค่า Rep มีค่าเท่ากับ 0.54 และค่า R^2_{max} มีค่าเท่ากับ 0.998 และสำหรับความเข้มข้นของเอทานอล (ETC) พบว่าค่า Rep มีค่าเท่ากับ 0.28 และค่า R^2_{max} มีค่าเท่ากับ 0.999

ตารางที่ 4.1 ค่าทางสถิติของ repeatability, reproducibility และ R^2_{max} สำหรับ NIR scanning และการวิเคราะห์ผลของค่า AAC และ ETC ด้วยวิธีอ้างอิง

	scanning		parameters	reference	
	repeatability	reproducibility		Rep	R^2_{max}
value	0.0206	0.1346	AAC	0.54	0.998
mean	1.6630	1.7483	ETC	0.28	0.999

4.2 การวิเคราะห์สเปกตรัม

จากการวิเคราะห์สเปกตรัมโดยการสแกนของน้ำส้มสายชูขาวที่ความยาวคลื่น 12,500-3,600 cm^{-1} (800-2,778 nm) ด้วยเครื่อง FT-NIR spectrometer แต่มีช่วงคลื่นบางช่วงที่ไม่สามารถนำมาอธิบายได้ ได้แก่ 5293.4-4987.1 cm^{-1} (1,889-2,500 nm) และ 4,097.4-3600.0 cm^{-1} (2,441-2,778 nm) พบว่าน้ำส้มสายชูขาวมีการดูดกลืนคลื่นที่ 6,881 cm^{-1} (1,453 nm) และ 5,176 cm^{-1} (1,931 nm) และจากการสแกนกรดอะซิติก 99.85% พบว่ามีการดูดกลืนคลื่นที่ 5,949 cm^{-1} (1,681 nm) 5,832 cm^{-1} (1,715 nm) 4,435 cm^{-1} (2,255 nm) 4,950 cm^{-1} (2,020 nm) และ 3,965 cm^{-1} (2,522 nm) และจากการสแกนเอทานอล 99.50 % พบว่ามีการดูดกลืนคลื่นที่ 5,909 cm^{-1} (1,692 nm) 5801 cm^{-1} (1,724 nm) 5,785 cm^{-1} (1,729 nm) 4,752 cm^{-1} (2,104 nm) และ 4,327 cm^{-1} (2,311 nm)



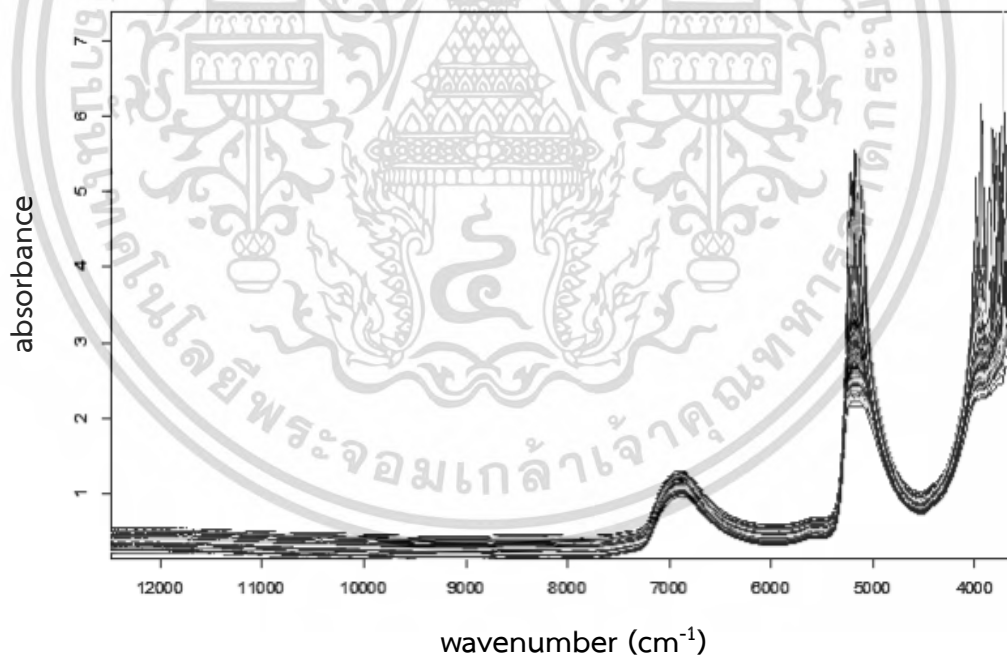
รูปที่ 4.1 สเปกตรัมอินฟราเรดของน้ำส้มสายชู กรดอะซิติกเข้มข้น และเอทานอลเข้มข้น

4.3 แบบจำลอง

ค่าสถิติของข้อมูลที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC แสดงในตารางที่ 4.2 ในการสร้างแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC ใช้ตัวอย่างทั้งหมด 150 ตัวอย่าง โดยข้อมูลที่น่ามาสร้างแบบจำลองสำหรับ AAC มีค่าต่ำสุดที่ 42 g/L ค่าสูงสุดที่ 86 g/L ค่าเฉลี่ย 51.7 g/L และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SD) 11.0 g/L และสำหรับ ETC มีค่าต่ำสุดที่ 0.0 g/L ค่าสูงสุดที่ 38.3 g/L ค่าเฉลี่ย 22.57 g/L และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน 11.14 g/L และในการทำ Test Set สำหรับการทำนาย AAC และ ETC ใช้ตัวอย่าง 105 ตัวอย่างในการสร้างแบบจำลอง และใช้ 45 ตัวอย่างในการทำนายค่า รูปที่ 4.2 แสดงสเปกตรัมที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองทั้งหมด

ตารางที่ 4.2 ค่าสถิติของข้อมูลที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC

parameter	data set	จำนวน	min	max	mean	SD
		ตัวอย่าง	(g/L)	(g/L)	(g/L)	(g/L)
AAC	total samples	150	42	86	52	11
	calibration set	105	42	86	51	10
	validation set	45	42	85	54	12
	unknown	21	42	75	53	8
ETC	total samples	150	0.0	38.3	22.1	10.9
	calibration set	105	0.0	38.3	23.5	10.9
	validation set	45	0.0	38.0	21.1	10.9
	unknown	21	2.0	33.3	19.7	8.7

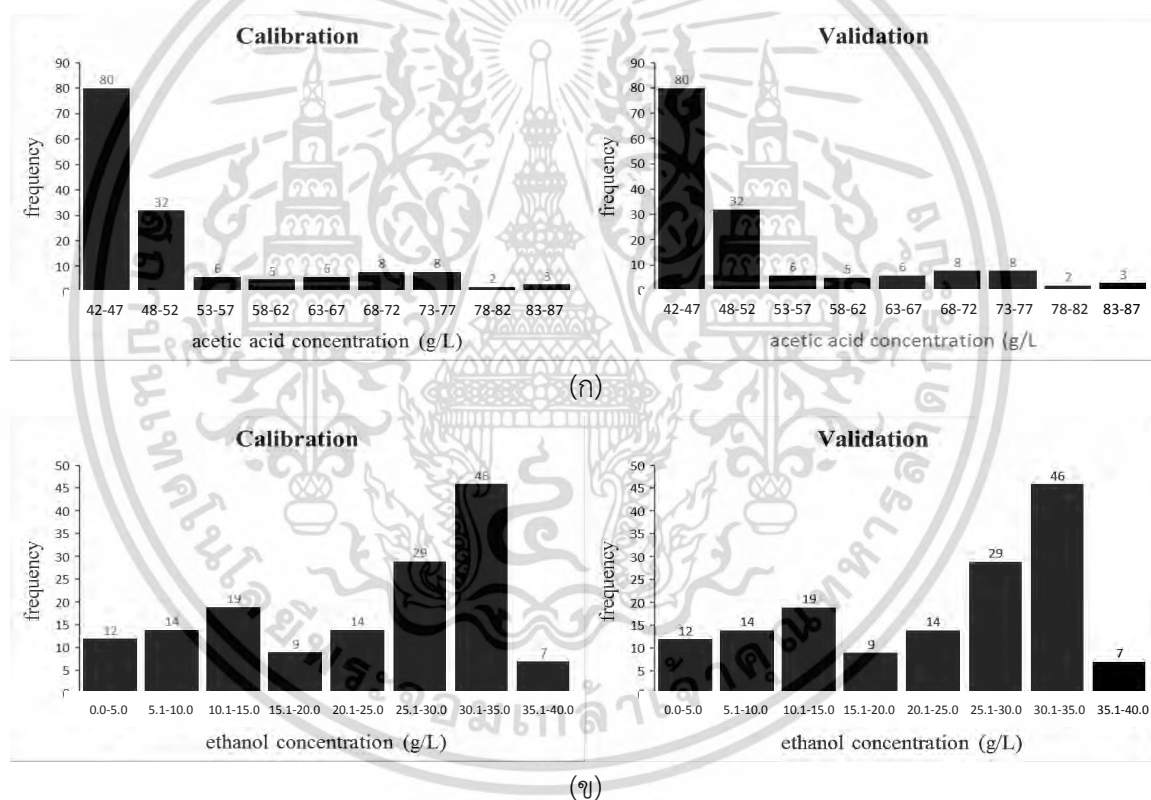


รูปที่ 4.2 สเปกตรัมของน้ำส้มสายชูทั้งหมด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

รูปที่ 4.3 แสดงค่าความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงที่นำมาสร้างแบบจำลองด้วยวิธี cross validation สำหรับค่า AAC (รูปที่ 4.3ก) และ ETC (รูปที่ 4.3ข) รูปที่ 4.4 แสดงค่าความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงที่นำมาสร้างแบบจำลองด้วยวิธี test set สำหรับค่า AAC (รูปที่ 4.4ก) และ ETC (รูปที่ 4.4ข) และรูปที่ 4.5 แสดงค่าความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับค่า AAC (รูปที่ 4.5ก) และ ETC (รูปที่ 4.5ข)

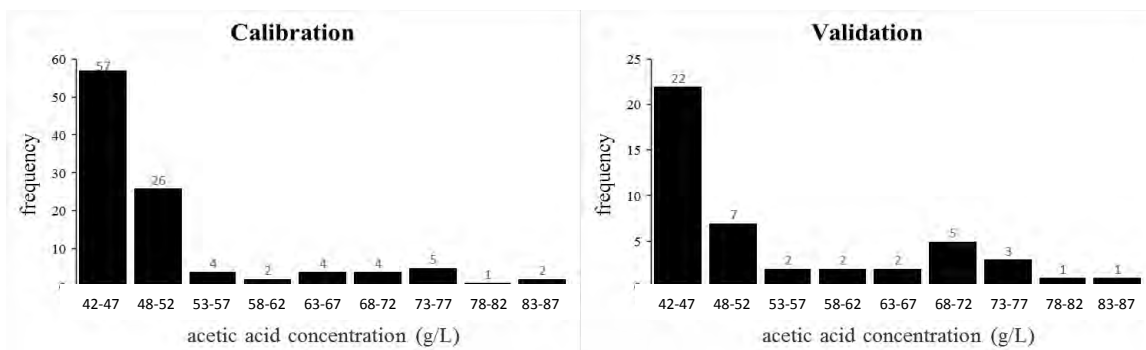
จากกราฟแสดงค่าความถี่ของข้อมูลอ้างอิง พบว่าข้อมูลมีลักษณะการกระจายแบบเบ้ซ้าย-ขวา ซึ่งทำให้ไม่สามารถคำนวณค่าสมรรถนะแบบ RPD ได้ เนื่องจากค่า RPD จะใช้สำหรับคำนวณข้อมูลที่มีการกระจายแบบปกติเท่านั้น ดังนั้นในการหาค่าสมรรถนะจึงใช้ค่า RPIQ แทน เนื่องจากค่า RPIQ เหมาะสำหรับข้อมูลที่มีการกระจายแบบเบ้ซ้าย-ขวา ทำให้ได้ค่าสมรรถนะที่เหมาะสมกับข้อมูลของตัวอย่าง



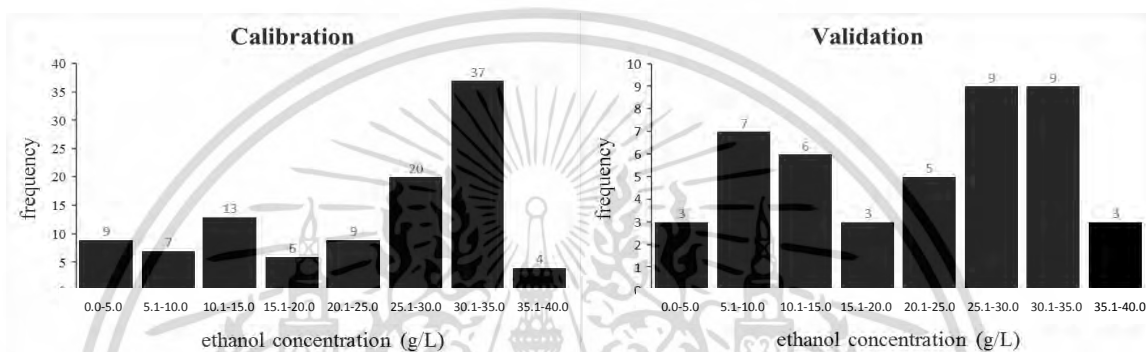
รูปที่ 4.3 ความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงที่นำมาสร้างแบบจำลองด้วยวิธี cross validation

(ก) สำหรับค่า AAC

(ข) สำหรับค่า ETC

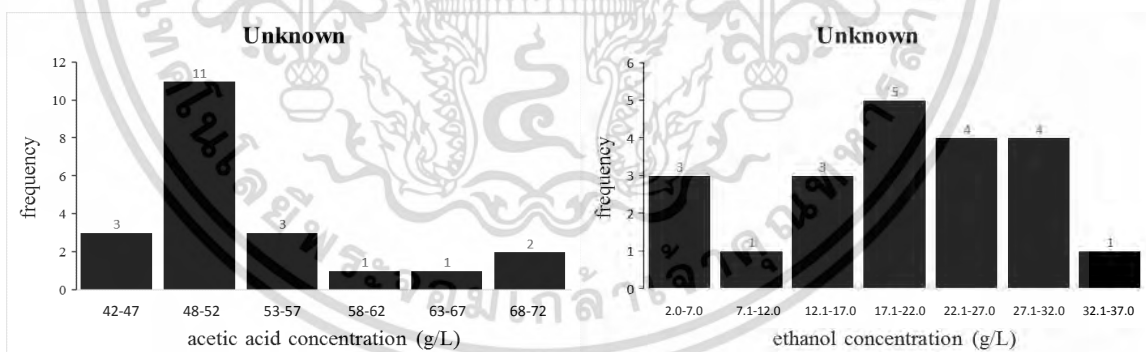


(ก)



(ข)

รูปที่ 4.4 ความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงที่นำมาสร้างแบบจำลองด้วยวิธี test set
(ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC



รูปที่ 4.5 ความถี่ของข้อมูลที่ได้จากวิธีอ้างอิงของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก
(ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC

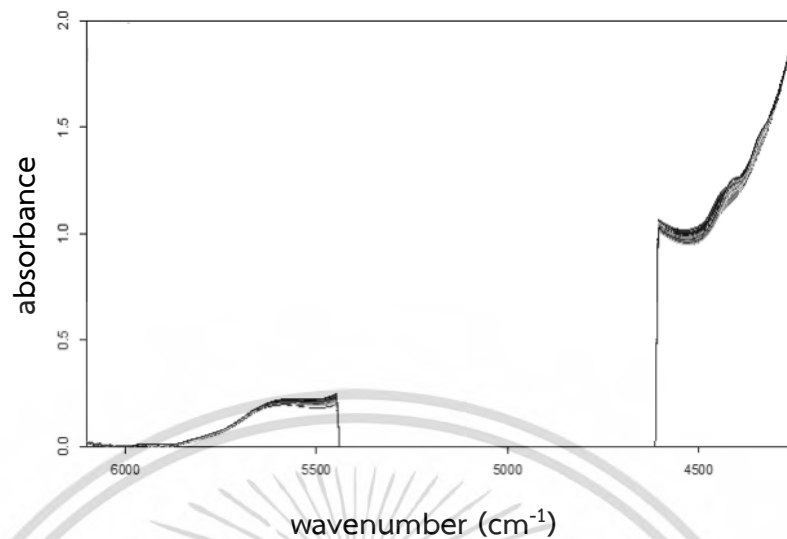
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.3.1 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม

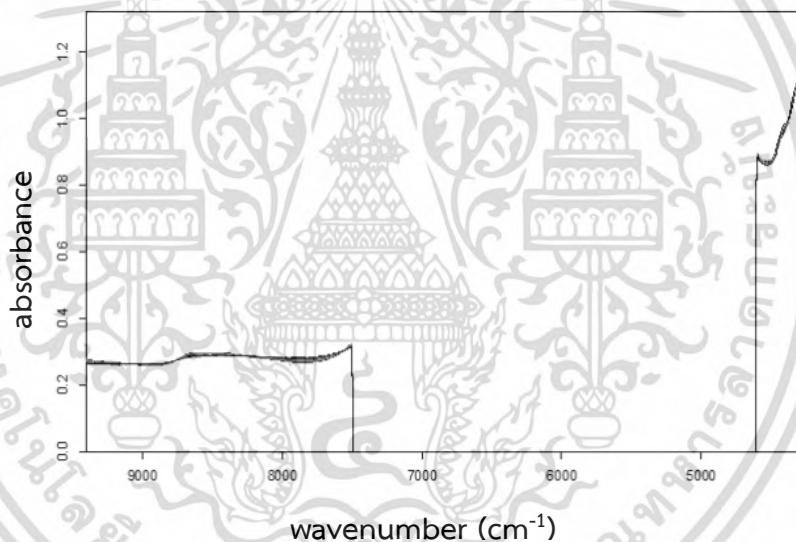
4.3.1.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation

ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัมด้วยวิธี cross validation รูปที่ 4.6 เป็นสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเป็น ๓ ส่วน โดยวิธี min-max normalization สำหรับค่า AAC และวิธี multiplicative scattering correction (MSC) สำหรับค่า ETC รูปที่ 4.7 และ 4.8 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC และ ETC (ตามลำดับ) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีกับค่าที่วัดด้วยวิธีอ้างอิงของชุด calibration (ก) และ ชุด validation (ข) และจากตารางที่ 4.3 พบว่าจากการวิเคราะห์ผลด้วย PLSR ของแบบจำลอง ในการสร้างแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า AAC จะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 6102.0-5446.3 และ 4605.4-4242.9 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี min-max normalization มี PLS factor เท่ากับ 5 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.954 และค่า RMSEE เท่ากับ 2.31 g/L และข้อมูลชุด validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.947 ค่า RMSECV เท่ากับ 2.47 g/L bias เท่ากับ -0.0165 g/L และ RPIQ เท่ากับ 4.92 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ

และในการสร้างแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า ETC จะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 9403.8-7498.3 และ 6102.0-5446.3 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี MSC มี PLS factor เท่ากับ 4 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.935 และค่า RMSEE เท่ากับ 2.85 g/L และข้อมูลชุด validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.926 ค่า RMSECV เท่ากับ 3.01 g/L bias เท่ากับ -0.0272 g/L และ RPIQ เท่ากับ 5.70 เมื่อนำค่าจาก r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ



(ก)



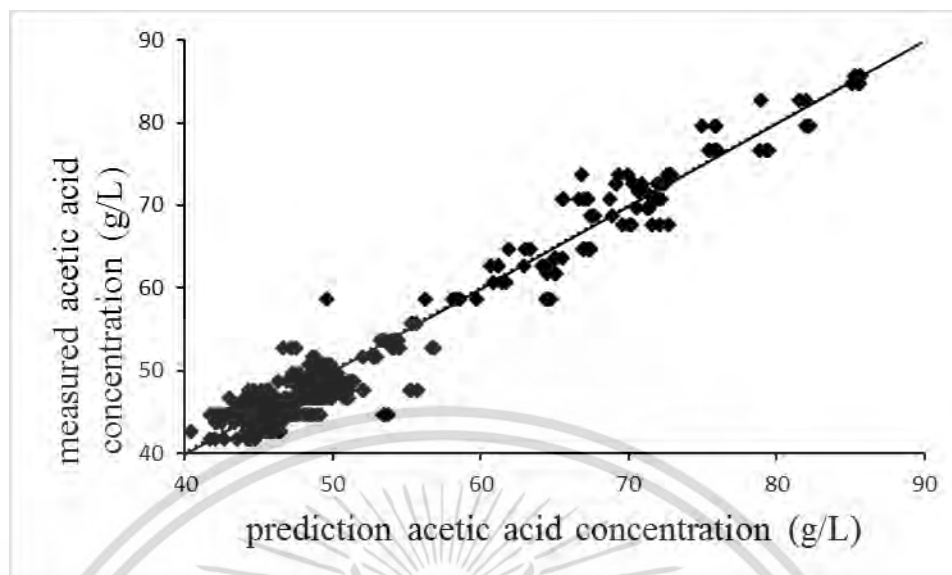
(ข)

รูปที่ 4.6 สเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบ้ องค์กร
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

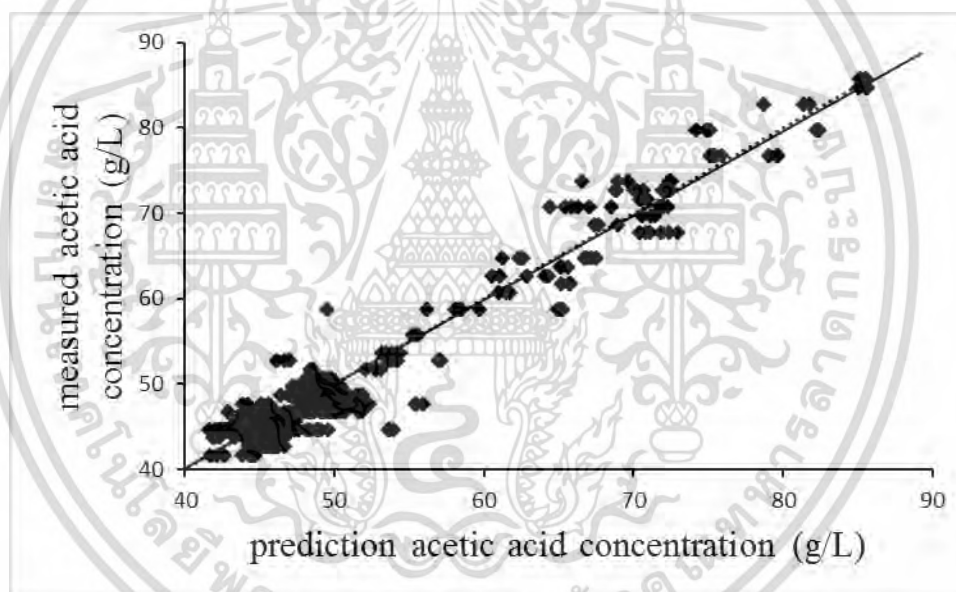
(ก) โดยวิธี min-max normalization สำหรับค่า AAC

(ข) โดยวิธี multiplicative scattering correction สำหรับค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ก)



(ข)

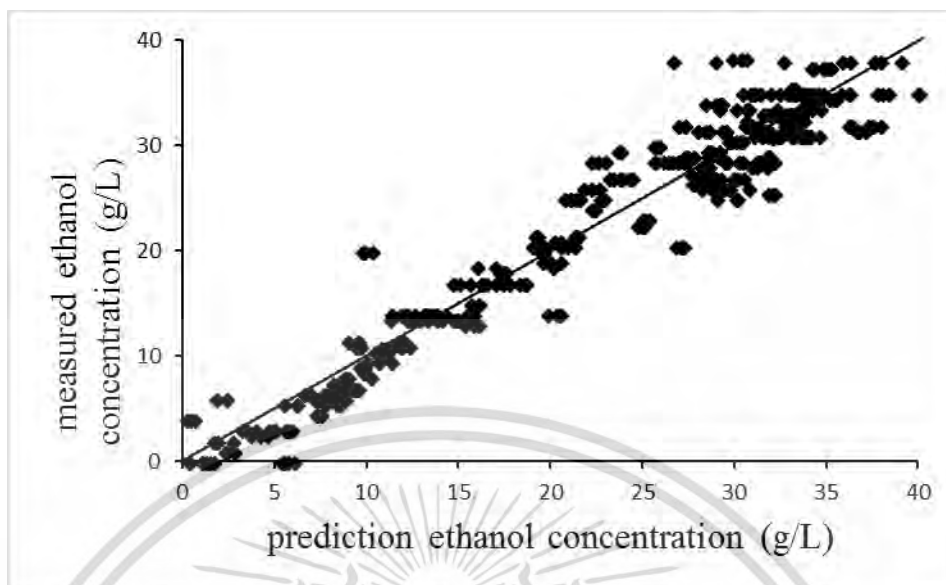
รูปที่ 4.7 กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC

สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

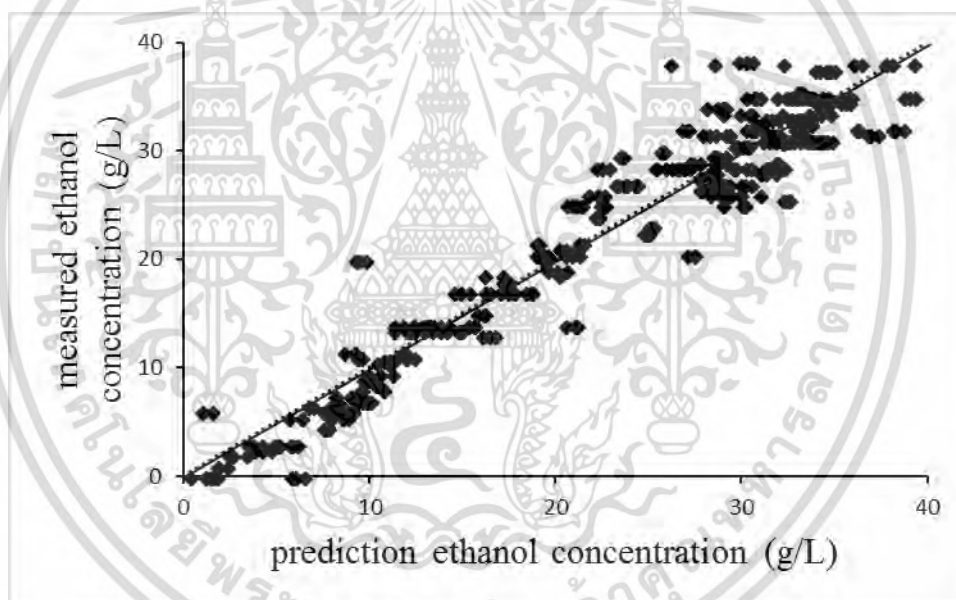
(ก) ชุด calibration

(ข) ชุด validation

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ก)



(ข)

รูปที่ 4.8 กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

(ก) ชุด calibration

(ข) ชุด validation

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.3 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLSR ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

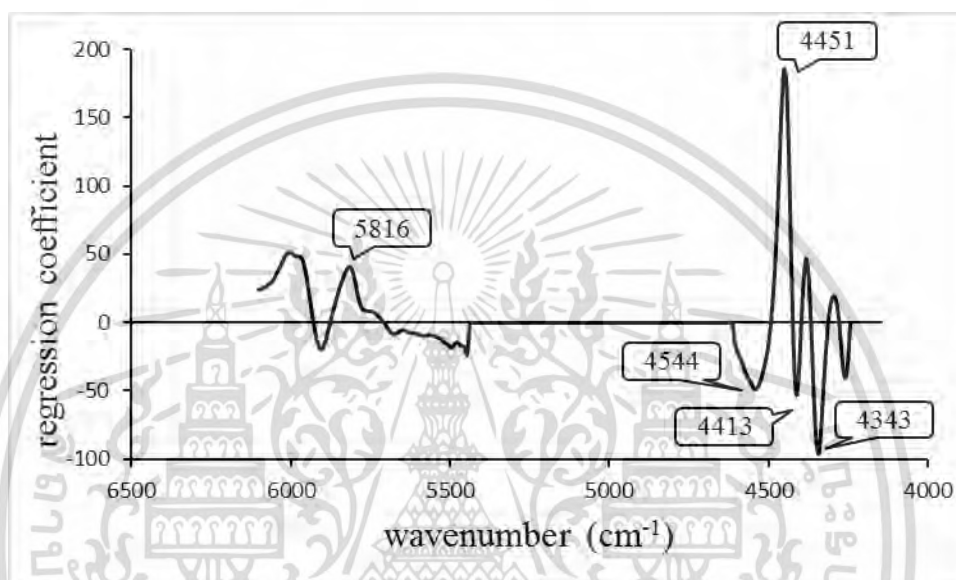
parameter	regions (cm ⁻¹)	pre-processing	PLS factor	calibration		validation			RPIQ
				R ²	RMSEE (g/L)	r ²	RMSECV (g/L)	bias (g/L)	
AAC	6102.0-5446.3	min-max	5	0.954	2.31	0.947	2.47	-0.0165	4.92
	4605.4-4242.9	normalization							
ETC	9403.8-7498.3	MSC	4	0.935	2.85	0.926	3.01	-0.0272	5.70
	6102.0-5446.3								

*หมายเหตุ MSC คือ multiplicative scattering correction

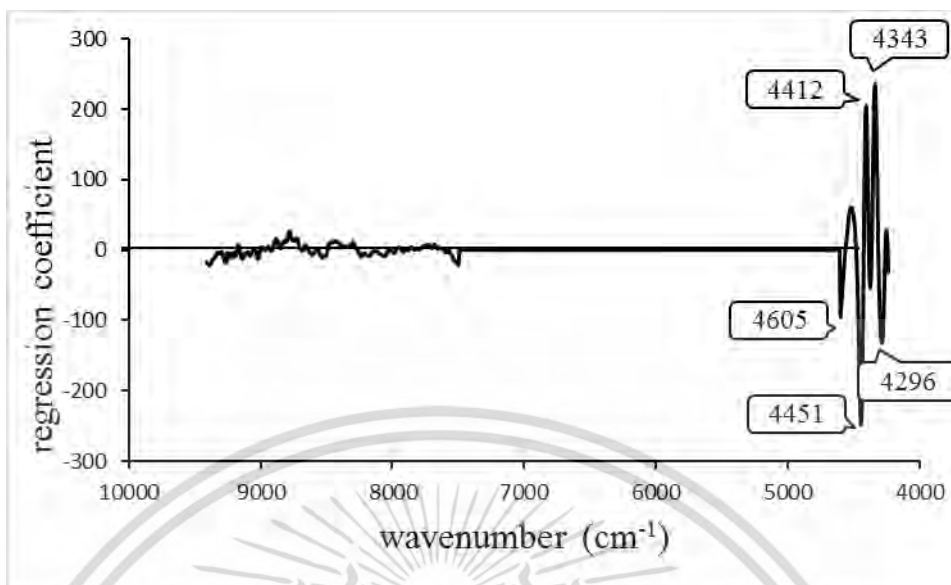
ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัมด้วยวิธี cross validation รูปที่ 4.9 และ 4.10 แสดงค่า regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า AAC (ก) และ EET (ข) และจากตารางที่ 4.4 พบว่าค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า AAC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสั่นสะเทือนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า AAC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 4451 cm⁻¹ เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 4443 cm⁻¹ เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 2 อยู่ที่ wavenumber 4412 cm⁻¹ เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + C-C str. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 4597 cm⁻¹ เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ 2 x amide I + amide III ที่สูงที่สุดของ PLS vector 4 อยู่ที่ wavenumber 4497 cm⁻¹ เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. + C=O str. และที่สูงที่สุดของ PLS vector 5 อยู่ที่ wavenumber 4505 cm⁻¹ เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. + C=O str. จะเห็นได้ว่าการสั่นสะเทือนของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายค่า AAC

และค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า ETC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสั่นสะเทือนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า ETC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 4451 cm⁻¹ เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 4413 cm⁻¹ เป็นการ

สัมพันธ์ของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS Vector 2 อยู่ที่ wavenumber 4458 cm^{-1} เป็นการสัมพันธ์ของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 4451 cm^{-1} เป็นการสัมพันธ์ของพันธะ O-H str. + O-H def. และคลื่นที่สูงที่สุดของ PLS vector 4 อยู่ที่ wavenumber 4343 cm^{-1} เป็นการสัมพันธ์ของพันธะ C-H str. + C-H def. จะเห็นได้ว่าการสัมพันธ์ของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายค่า ETC

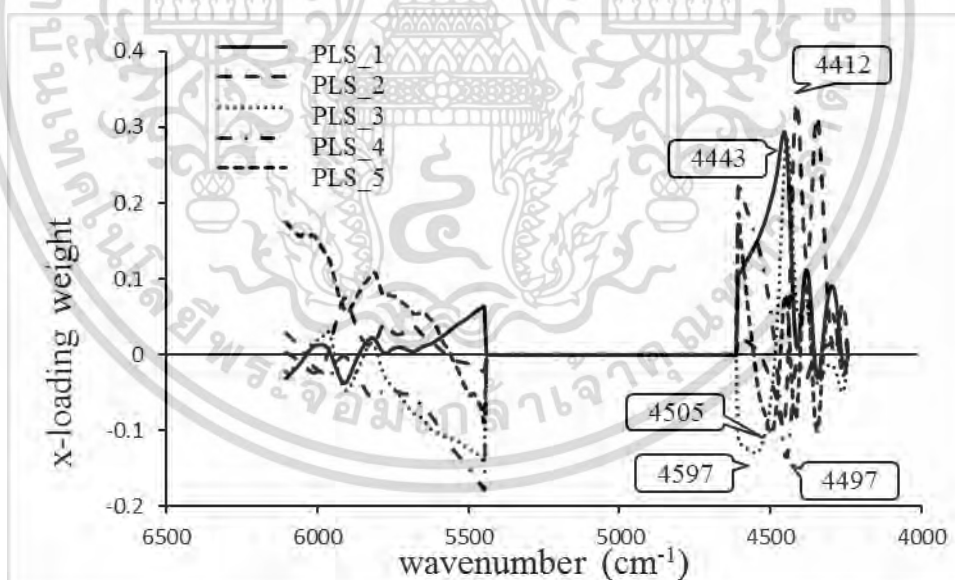


เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



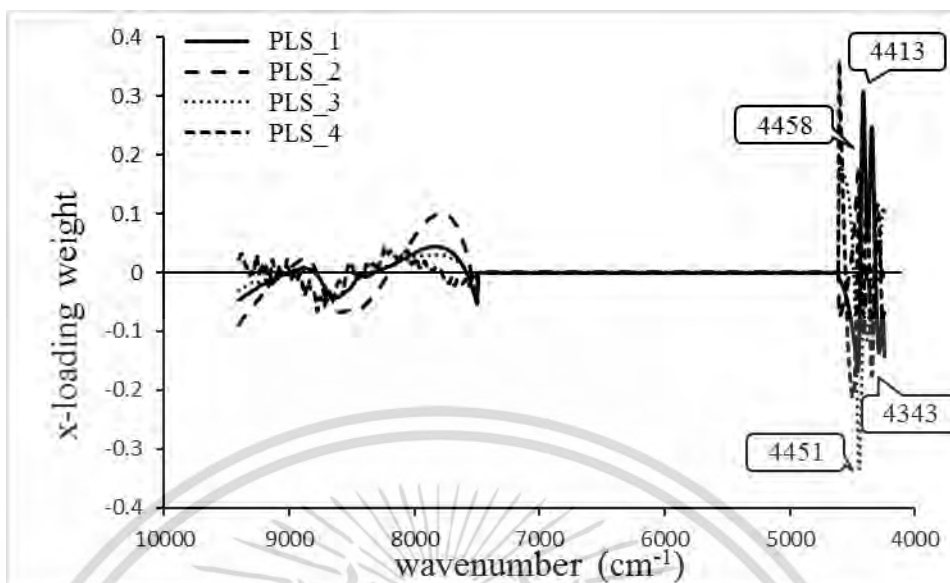
(ข)

รูปที่ 4.9 กราฟ regression coefficient plot
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation
(ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC



(ก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ข)

รูปที่ 4.10 กราฟ x-loading weight plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

(ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC

ตารางที่ 4.4 การสัมพันธ์กันของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

regression coefficient					
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	bond vibration	structure	
AAC 5816	1719	1725	C-H str. First overtone	CH ₂	
4544	2201	2200	C-H str. + C=O str.	-CHO	
4451	2247	2252	O-H str. +O-H def.	starch	
4413	2266	2276	O-H str. + C-C str.	starch	
4343	2303	2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂	

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.4 (ต่อ) การสัมพันธ์ของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

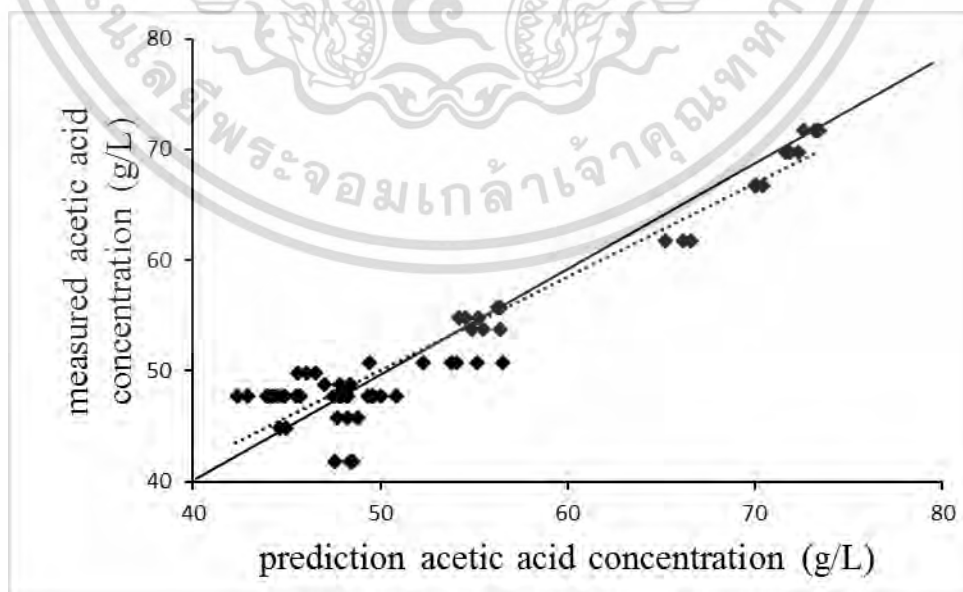
x-loading weight						
	wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	pls latent variable	bond vibration	structure
AAC	4597	2175	2180	3	2 x amide I + amide III	protein
	4505	2219	2200	5	C-H str. + C=O str.	-CHO
	4497	2224	2200	4	C-H str. + C=O str	-CHO
	4443	2251	2252	1	O-H str. +O-H def.	starch
	4412	2267	2252	2	O-H str. +O-H def.	starch
regression coefficient						
	wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]		bond vibration	structure
ETC	4605	2172	2180		2 x amide I + amide III	protein
	4451	2247	2252		O-H str. +O-H def.	starch
	4412	2267	2252		O-H str. +O-H def.	starch
	4343	2303	2310		C-H str. + C-H def.	CH ₂
	4297	2327	2323		C-H str. + C-H def..	CH ₂
x-loading weight						
	wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	pls latent variable	bond vibration	structure
	4458	5543	2252	2	O-H str. +O-H def.	starch
	4451	2247	2252	3	O-H str. +O-H def.	starch

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.4 (ต่อ) การสัมพันธ์ของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

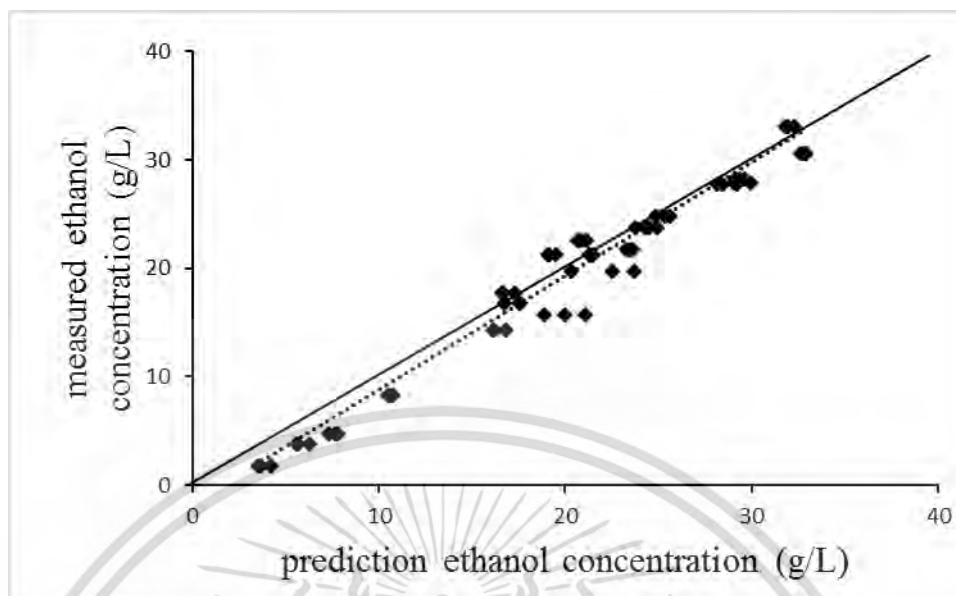
x-loading weight						
ETC	wavenumber	wavelength	wavelength (nm)	pls	bond vibration	structure
	(cm^{-1})	(nm)	referred from reference [2]	latent variable		
	4413	2257	2252	1	O-H str. +O-H def.	starch
	4343	2303	2310	4	C-H str. + C-H def.	CH_2

จากการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัมด้วยวิธี cross validation ในการทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จัก รูปที่ 4.11 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC (รูปที่ 4.11ก) และ ETC (รูปที่ 4.11ข) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีมาตรฐาน และจากตารางที่ 4.5 พบว่าสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า AAC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.911 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.83 g/L SEP เท่ากับ 2.82 g/L bias เท่ากับ -0.4140 g/L และ RPIQ เท่ากับ 3.31 และสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า ETC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.968 ค่า RMSEP เท่ากับ 1.73 g/L SEP เท่ากับ 1.60 g/L bias เท่ากับ -0.6810 g/L และ RPIQ เท่ากับ 5.17



(ก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ข)

รูปที่ 4.11 การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

(ก) ค่า AAC (ข) ค่า ETC

ตารางที่ 4.5 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation

parameter	r^2	RMSEP (g/L)	SEP (g/L)	bias (g/L)	RPIQ
AAC	0.911	2.83	2.82	-0.4140	3.31
ETC	0.968	1.73	1.60	-0.6810	5.17

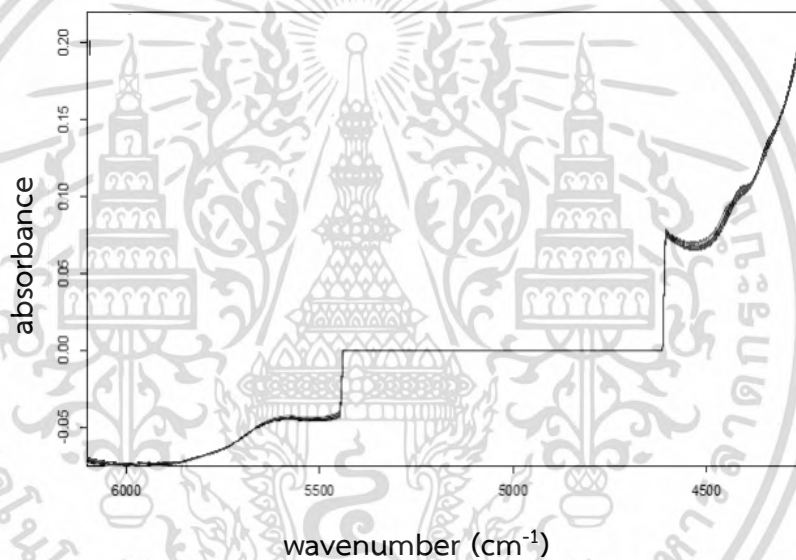
4.3.1.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set

ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัมด้วยวิธี test set รูปที่ 4.12 เป็นสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นแบบ vector normalization (SNV) สำหรับค่า AAC และ ETC รูปที่ 4.13 และ 4.14 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC และ ETC (ตามลำดับ) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีอ้างอิงของชุด calibration (ก) และ ชุด validation (ข) และจากตารางที่ 4.6 พบว่าจากการสร้างแบบจำลองด้วย PLSR สำหรับการทำนายค่า AAC เลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 6102.0-5446.3 และ 4605.4-4242.9 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี SNV มี PLS factor เท่ากับ 4 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.943 และค่า RMSEE เท่ากับ 2.38 g/L และข้อมูลชุด

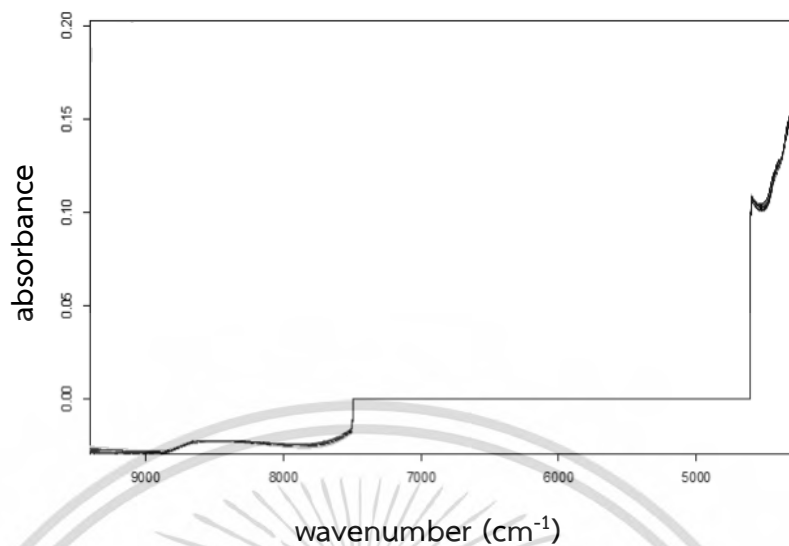
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.957 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.64 g/L bias เท่ากับ 0.6970 g/L และ RPIQ เท่ากับ 8.25 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้ สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ

และในการสร้างแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า ETC จะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 9403.8-6094.3 และ 4605.4-4242.9 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี SNV มี PLS factor เท่ากับ 5 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.934 และค่า RMSEE เท่ากับ 2.83 g/L และข้อมูลชุด validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.933 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.95 g/L bias เท่ากับ -1.4300 g/L และ RPIQ เท่ากับ 7.61 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้ สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ



(ก)

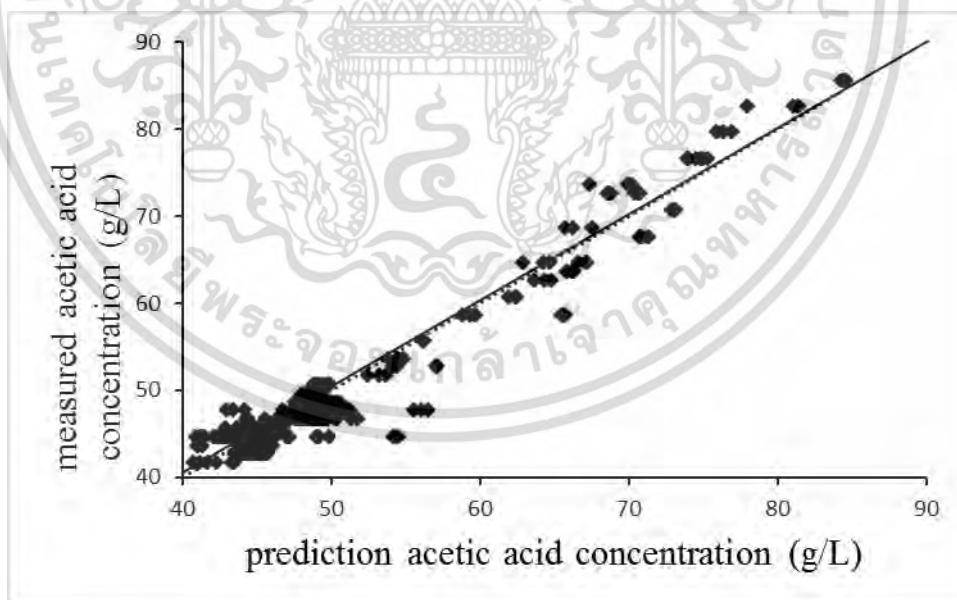


(ข)

รูปที่ 4.12 สเปกตรัมหลังการจัดการสเปกตรัมเป็ orton สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

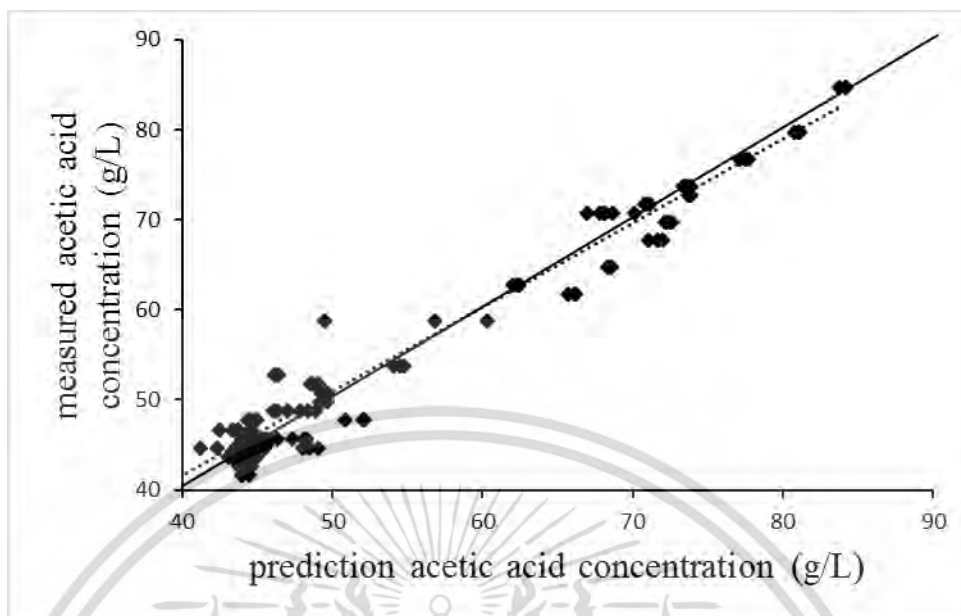
(ก) โดยวิธี vector normalization สำหรับค่า AAC

(ข) โดยวิธี vector normalization สำหรับค่า ETC



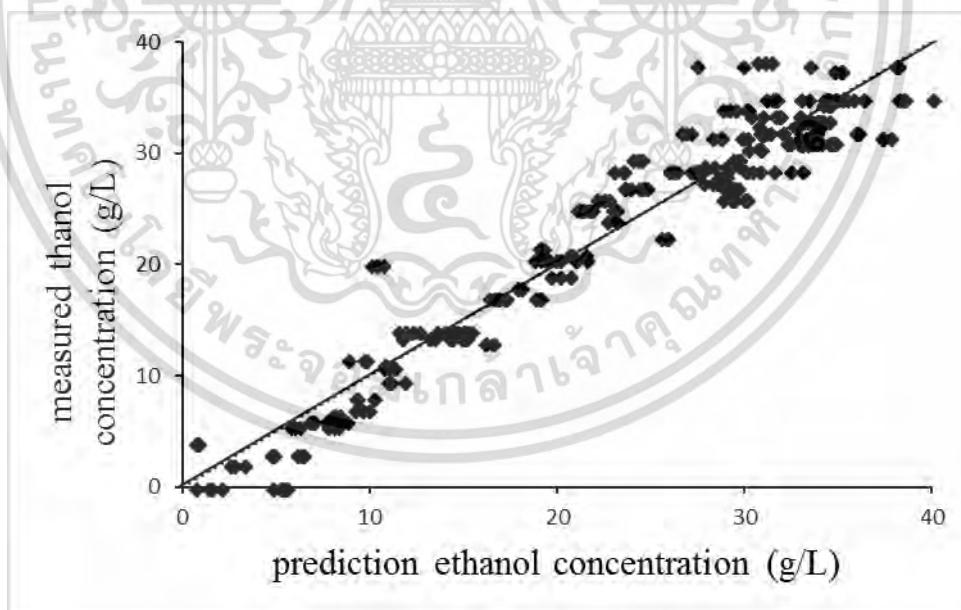
(ก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



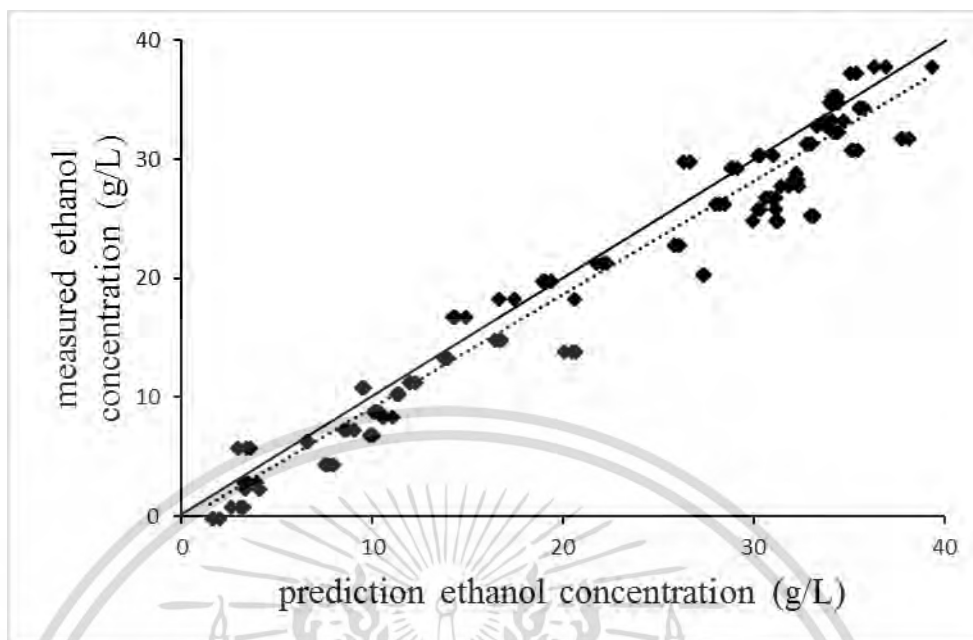
(ข)

รูปที่ 4.13 กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set
(ก) ชุด calibration (ข) ชุด validation



(ก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ข)

รูปที่ 4.14 กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

(ก) ชุด calibration (ข) ชุด validation

ตารางที่ 4.6 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLS ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

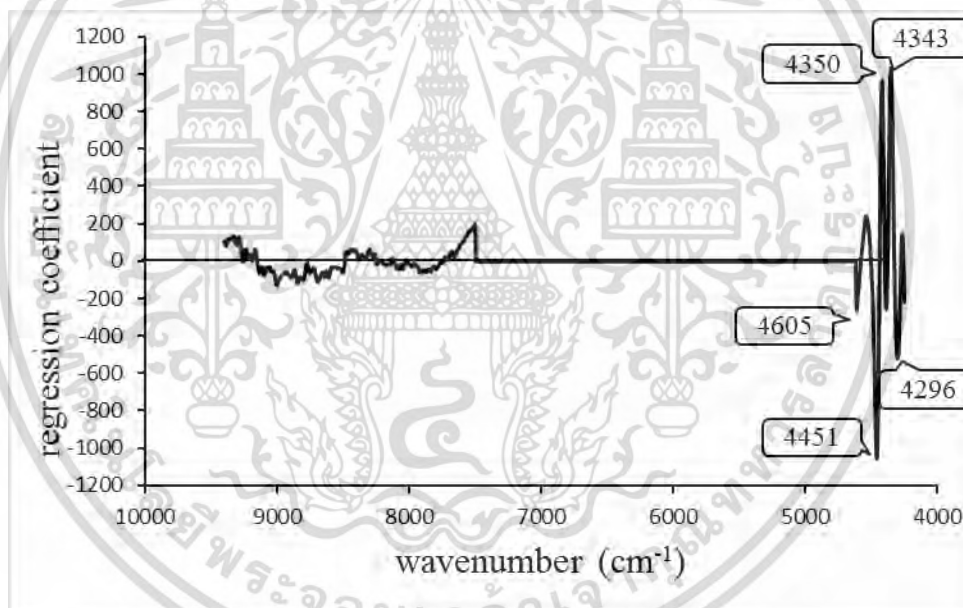
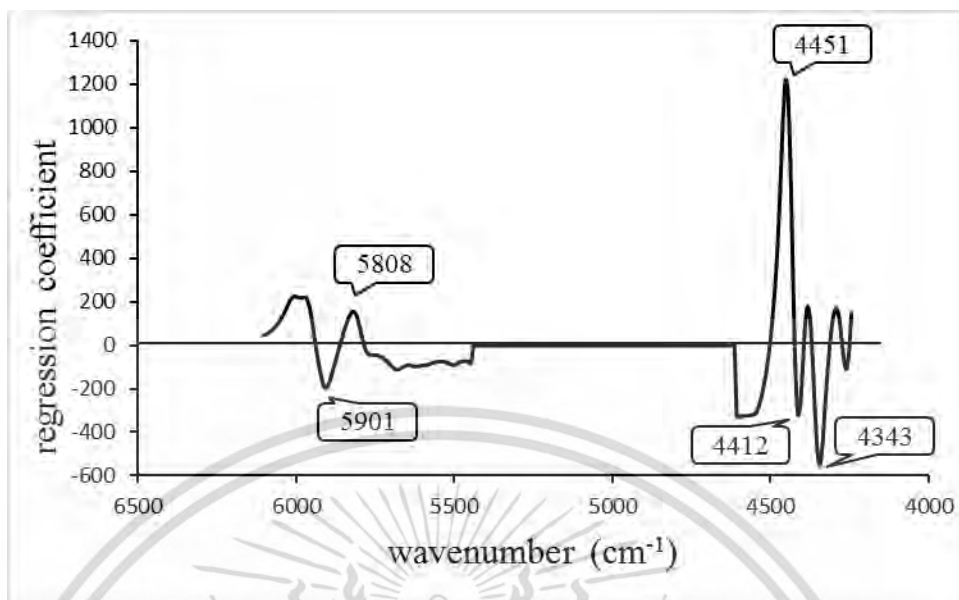
parameter	regions (cm ⁻¹)	pre-processing	PLS factor	calibration		validation			RPIQ
				R ²	RMSEE (g/L)	r ²	RMSEP (g/L)	bias (g/L)	
AAC	6102.0-5446.3	SNV	4	0.943	2.38	0.953	2.64	0.6970	8.25
	4605.4-4242.9								
ETC	9403.8-6094.3	SNV	5	0.934	2.83	0.933	2.95	-1.4300	7.61
	4605.4-4242.9								

*หมายเหตุ SNV คือ vector normalization

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

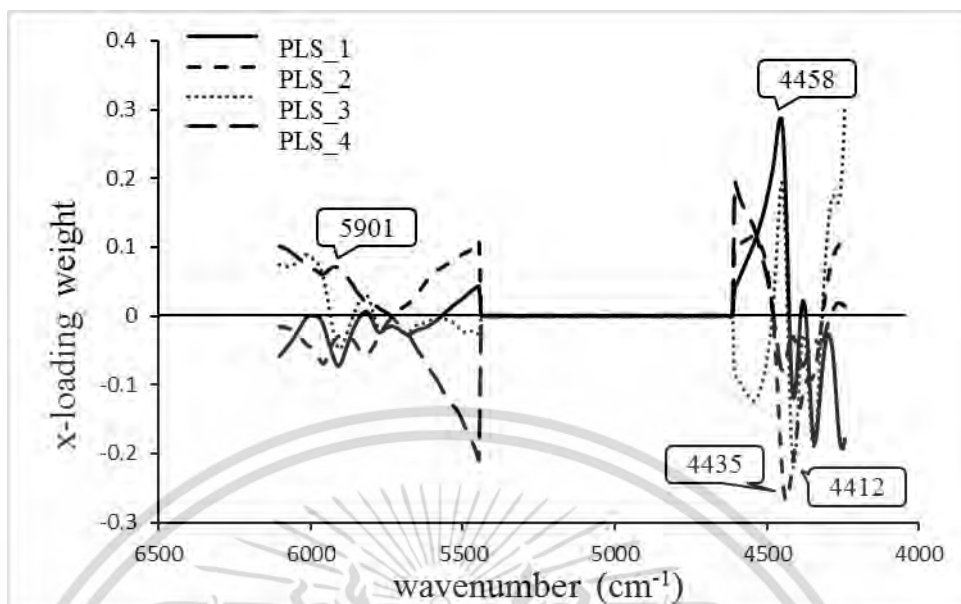
ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัมด้วยวิธี test set รูปที่ 4.15 และ 4.16 แสดงค่า regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า AAC (ก) และ EET (ข) และจากตารางที่ 4.7 พบว่าค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า AAC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสั่นสะเทือนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า AAC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 4451 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 4458 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 2 อยู่ที่ wavenumber 4435 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 4412 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + C-C str. และที่สูงที่สุดของ PLS vector 4 อยู่ที่ wavenumber 5901 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. first overtone จะเห็นได้ว่าการสั่นสะเทือนของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายค่า AAC

และค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า ETC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสั่นสะเทือนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า ETC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 4451 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 4435 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 2 อยู่ที่ wavenumber 4374 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ 2 x amide I + amide III ที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 4428 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 4 อยู่ที่ wavenumber 4451 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. และที่สูงที่สุดของ PLS vector 5 อยู่ที่ wavenumber 4605 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ 2 x amide I + amide III จะเห็นได้ว่าการสั่นสะเทือนของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายค่า ETC

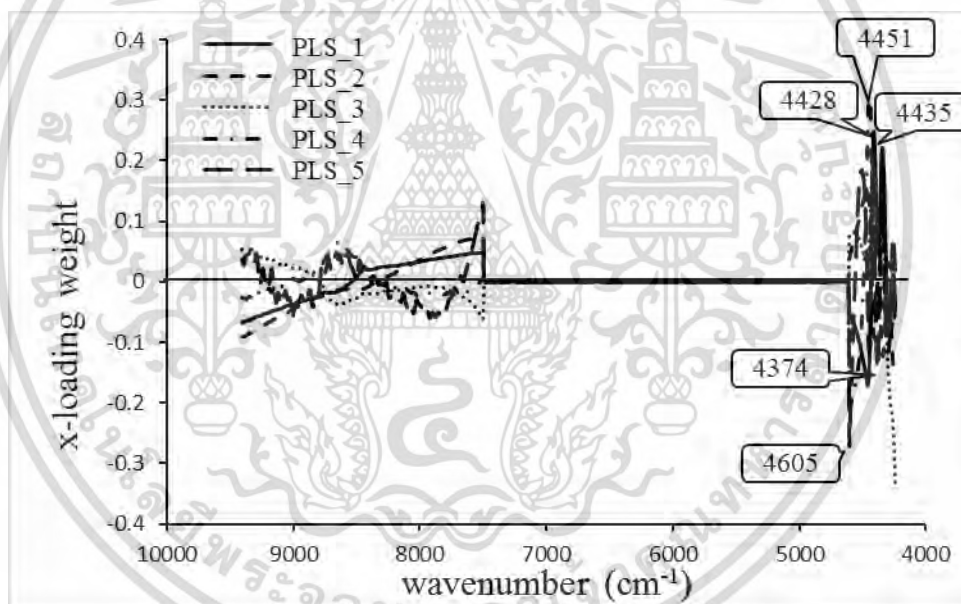


รูปที่ 4.15 กราฟ regression coefficient plot
 สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set
 (ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ก)



(ข)

รูปที่ 4.16 กราฟ x-loading weight plot
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

(ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.7 การสันสเทือนของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

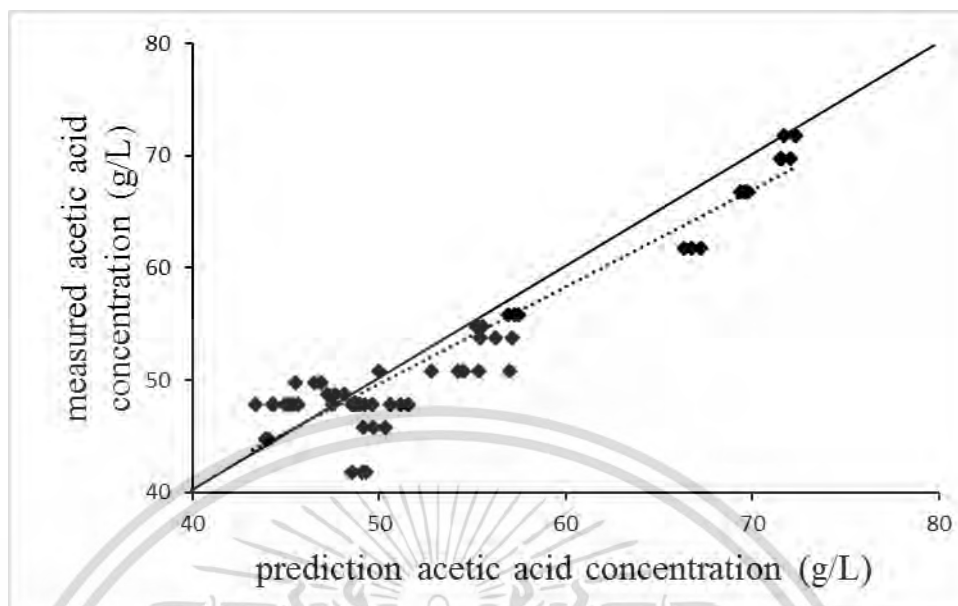
regression coefficient						
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	bond vibration	structure		
5904	1695	1695	C-H str. first overtone	CH ₃		
5808	1722	1725	C-H str. first overtone	CH ₂		
4451	2247	2252	O-H str. + O-H def.	starch		
4412	2267	2276	O-H str. + C-C str.	starch		
4343	2303	2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂		
AAC	x-loading weight					
	wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	PLS latent variable	bond vibration	structure
	5901	1695	1695	4	C-H str. first overtone	CH ₃
	4458	2243	2252	1	O-H str. + O-H def.	starch
	4435	2255	2252	2	O-H str. + O-H def.	starch
4412	2267	2276	3	O-H str. + C-C str.	starch	
ETC	regression coefficient					
	wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	bond vibration	structure	
	4605	2171	2180	2 x amide I +amide III	protein	
	4451	2246	2252	O-H str. + O-H def.	starch	
	4350	2299	2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂	
4343	2303	2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂		

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

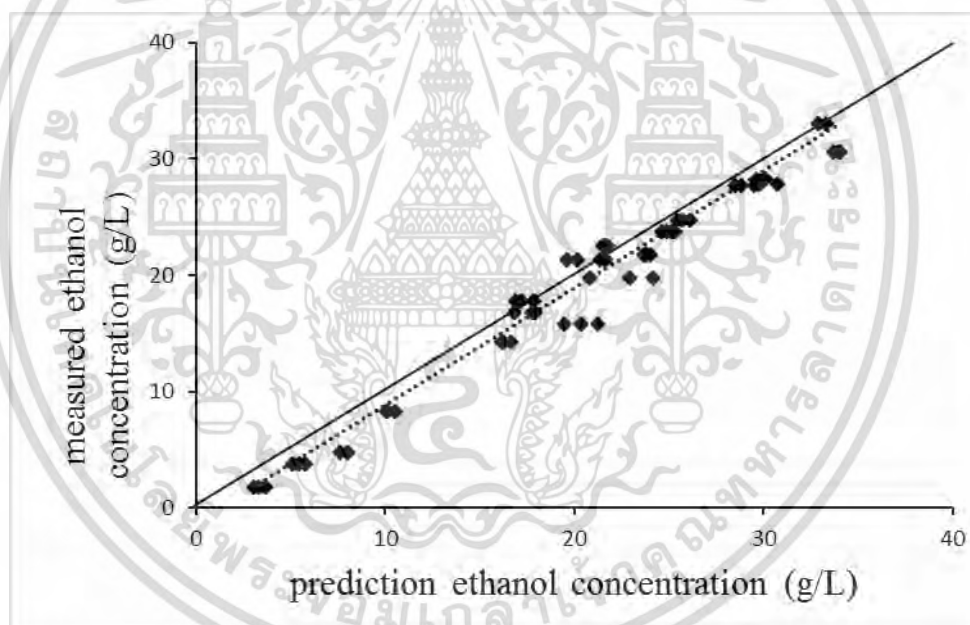
ตารางที่ 4.7 (ต่อ) การสัมพันธ์ของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	bond vibration	structure	
4296	2328	2323	C-H str. + C-H def.	CH ₂	
x-loading weight					
ETC wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	PLS latent variable	bond vibration	structure
4605	2172	2180	5	2 x amide I +amide III	protein
4451	2247	2252	4	O-H str. +O-H def.	starch
4428	2258	2252	3	O-H str. +O-H def.	starch
4374	2286	2280	2	2 x amide I +amide III	protein
4435	2258	2252	1	O-H str. +O-H def.	starch

จากการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัมด้วยวิธี test set ในการทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จัก รูปที่ 4.17 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC (รูปที่ 4.17ก) และ ETC (รูปที่ 4.17ข) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีอ้างอิง และจากตารางที่ 4.8 พบว่าสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า AAC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.898 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.97 g/L SEP เท่ากับ 2.87 g/L bias เท่ากับ -0.8120 g/L และ RPIQ เท่ากับ 3.28 และสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า ETC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.971 ค่า RMSEP เท่ากับ 1.82 g/L SEP เท่ากับ 1.49 g/L bias เท่ากับ -1.0700 g/L และ RPIQ เท่ากับ 5.10



(ก)



(ข)

รูปที่ 4.17 การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

(ก) ค่า AAC

(ข) ค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.8 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี test set

parameter	r^2	RMSEP (g/L)	SEP (g/L)	bias (g/L)	RPIQ
AAC	0.898	2.97	2.87	-0.8120	3.28
ETC	0.971	1.82	1.49	-1.0700	5.10

4.3.1.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง

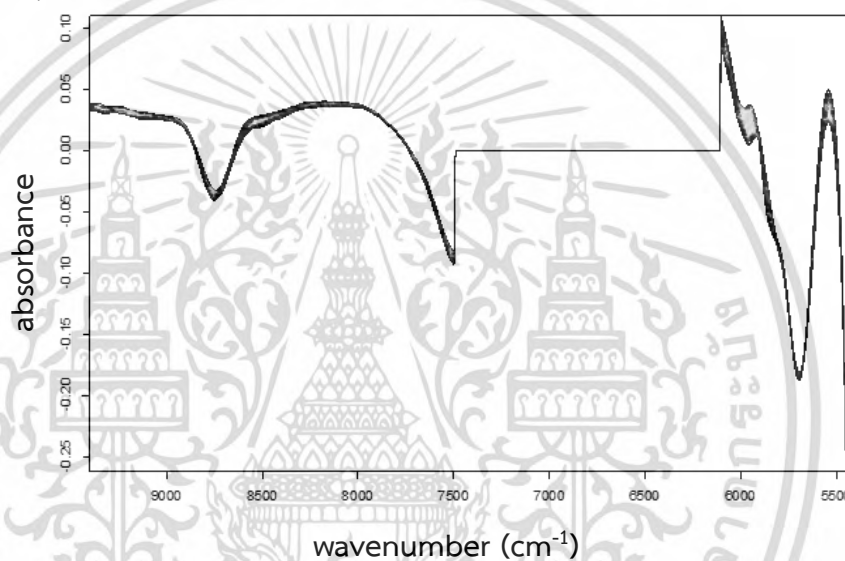
จากการพิสูจน์แบบจำลองที่สร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัมด้วยวิธี cross validation และ test set พบว่าแบบจำลองที่ได้จากวิธี test set ให้ผลการทำนายค่าที่ดีกว่า เนื่องจากมีค่า r^2 ที่สูงกว่าทั้งการทำนายค่า AAC และ ETC แต่เมื่อนำมาเปรียบเทียบกับตารางเปรียบเทียบค่า R และ R^2 (ตาราง 2.1) พบว่าอยู่ในกลุ่มที่สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพเช่นเดียวกัน

4.3.2 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย

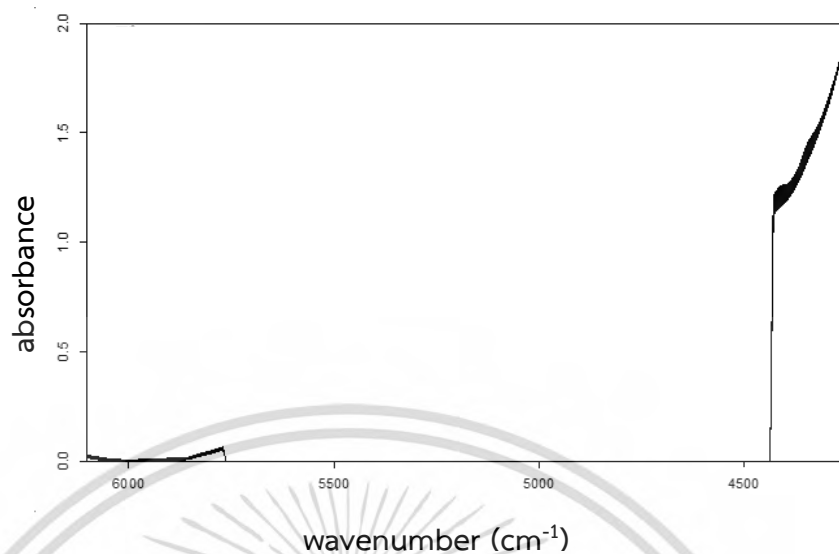
4.3.2.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation

ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี cross validation รูปที่ 4.18 เป็นสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้น โดยวิธี first derivative + vector normalization สำหรับค่า AAC และวิธี min-max normalization สำหรับค่า ETC รูปที่ 4.19 และ 4.20 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC และ ETC (ตามลำดับ) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีอ้างอิงของชุด calibration (ก) และ ชุด validation (ข) และจากตารางที่ 4.9 พบว่าจากการวิเคราะห์ผลด้วย PLSR ของแบบจำลอง ในการสร้างแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า AAC จะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 9403.8-7498.3 และ 6102-5446.3 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี first derivative + SNV มี PLS factor เท่ากับ 3 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.956 และค่า RMSEE เท่ากับ 2.28 g/L และข้อมูลชุด validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.952 ค่า RMSECV เท่ากับ 2.34 g/L bias เท่ากับ -0.0042 g/L และ RPIQ เท่ากับ 4.17 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ

และในการสร้างแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า ETC จะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 6102-5770.3 และ 4428-4242.9 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี min-max normalization มี PLS factor เท่ากับ 3 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.939 และค่า RMSEE เท่ากับ 2.74 g/L และข้อมูลชุด validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.934 ค่า RMSECV เท่ากับ 2.83 g/L bias เท่ากับ -0.0069 g/L และ RPIQ เท่ากับ 6.40 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้ สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

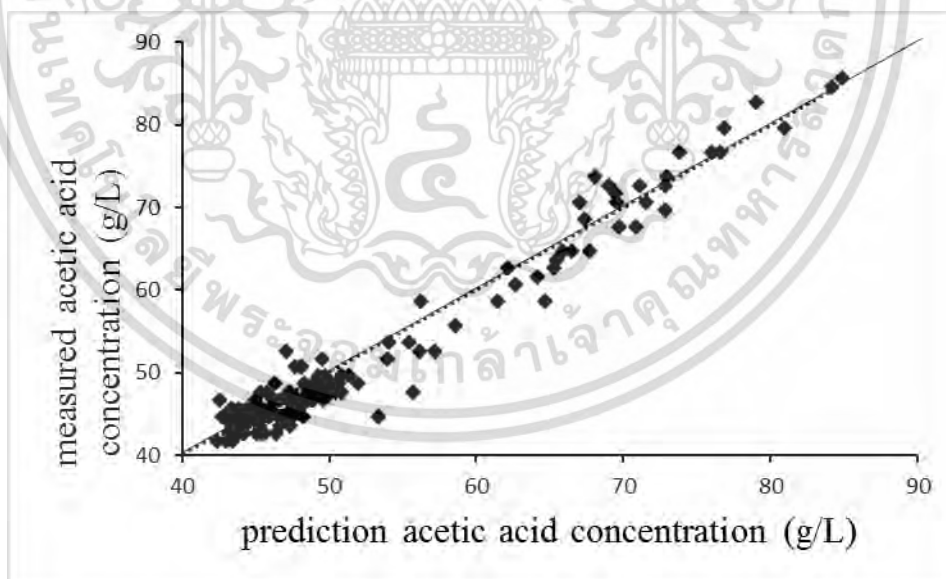


(ข)

รูปที่ 4.18 สเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้น
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

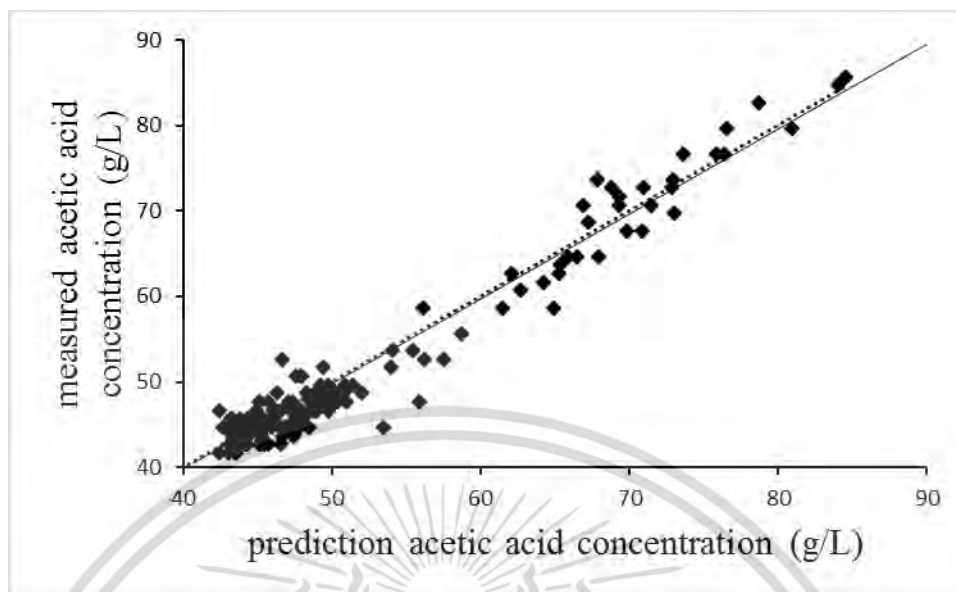
(ก) โดยวิธี first derivative + vector normalization สำหรับค่า AAC

(ข) โดยวิธี min-max normalization สำหรับค่า ETC



(ก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

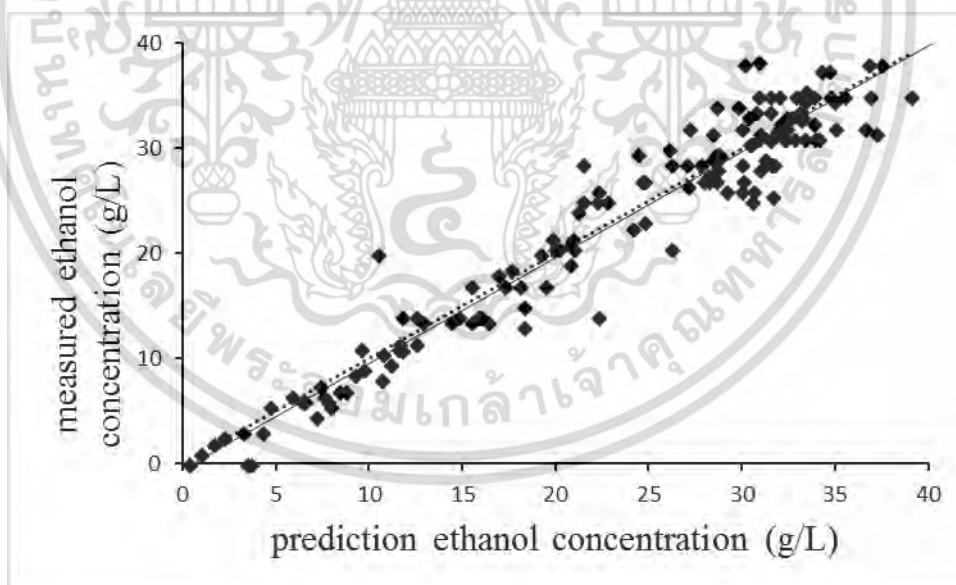


(ข)

รูปที่ 4.19 กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

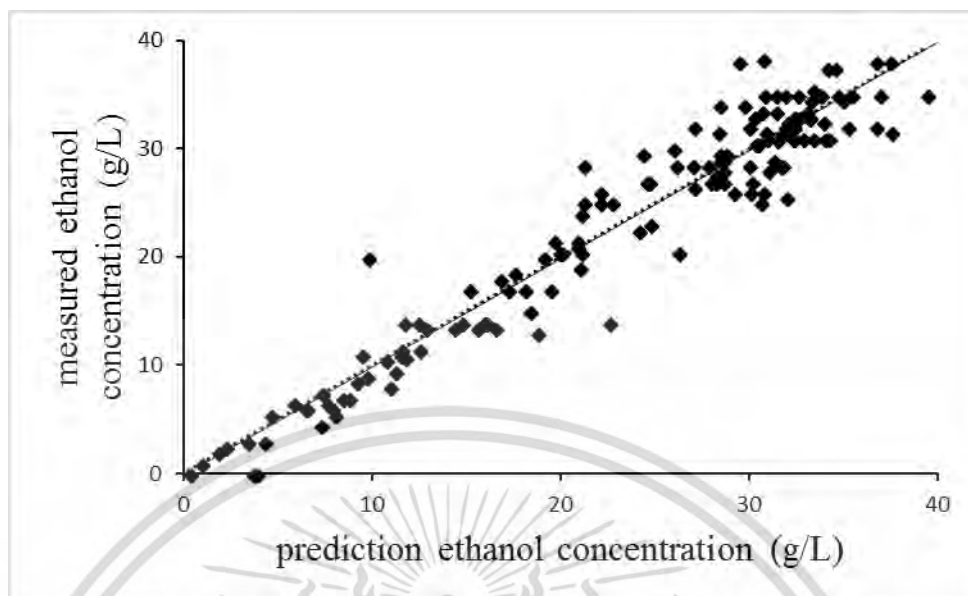
(ก) ชุด calibration

(ข) ชุด validation



(ก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ข)

รูปที่ 4.20 กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

(ก) ชุด calibration

(ข) ชุด validation

ตารางที่ 4.9 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLSR ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

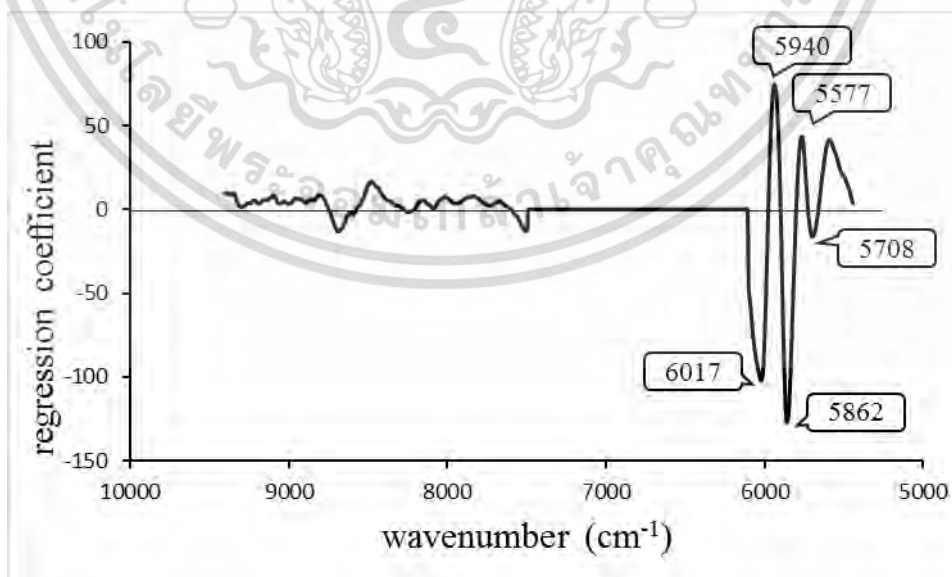
parameter	regions (cm ⁻¹)	pre-processing	PLS factor	calibration		validation			
				R ²	RMSEE (g/L)	r ²	RMSECV (g/L)	bias (g/L)	RPIQ
AAC	9403.8-7498.3	first derivative	3	0.956	2.28	0.952	2.34	-0.0042	4.17
	6102-5446.3	+ SNV							
ETC	6102-5770.3	min-max	3	0.939	2.74	0.934	2.83	-0.0069	6.40
	4428-4242.9	normalization							

*หมายเหตุ SNV คือ vector normalization

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

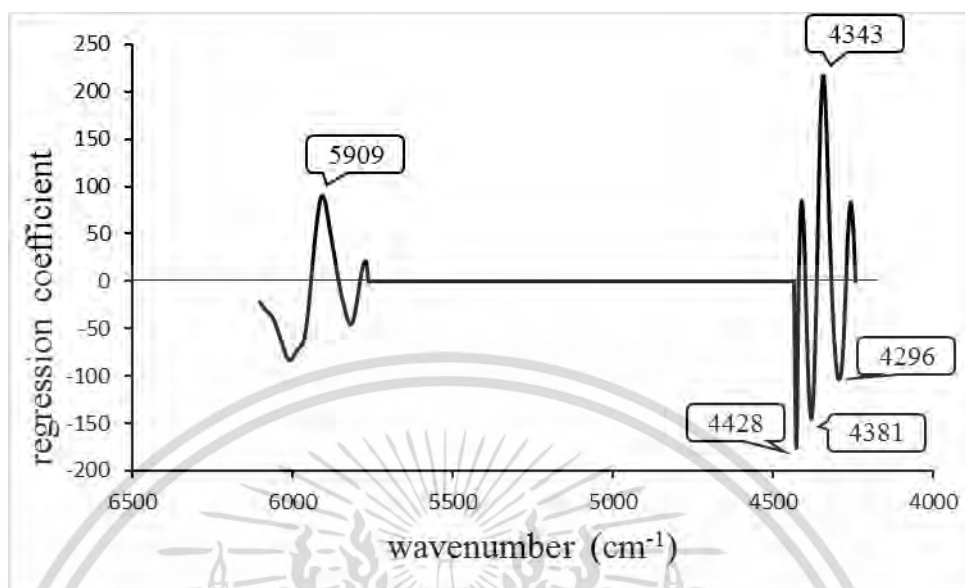
ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี cross validation รูปที่ 4.21 และ 4.22 แสดงค่า regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า AAC (ก) และ EET (ข) และจากตารางที่ 4.10 พบว่าค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า AAC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสั่นสะเทือนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า AAC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 6017 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. first overtone และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 5870 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. first overtone ที่สูงที่สุดของ PLS vector 2 อยู่ที่ wavenumber 5978 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. first overtone และที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 5955 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. first overtone จะเห็นได้ว่าการสั่นสะเทือนของ C-H มีผลต่อการทำนายค่า AAC

และค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า ETC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสั่นสะเทือนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า ETC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 4343 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. + C-H def. และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 4412 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ O-H str. + O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS Vector 2 อยู่ที่ wavenumber 4381 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. + C-H def. และที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 5907 cm^{-1} เป็นการสั่นสะเทือนของพันธะ C-H str. first overtone จะเห็นได้ว่าการสั่นสะเทือนของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายค่า ETC



(ก)

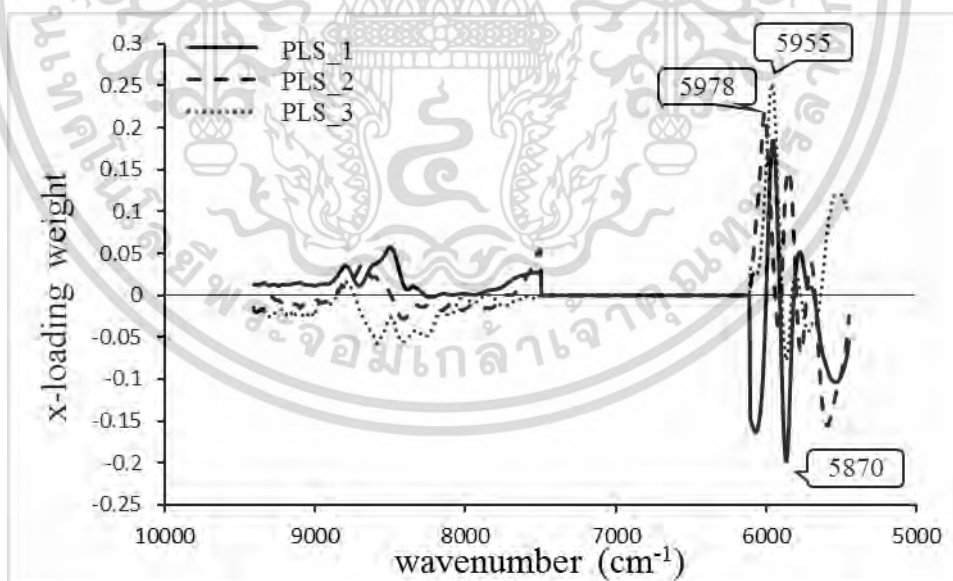
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ข)

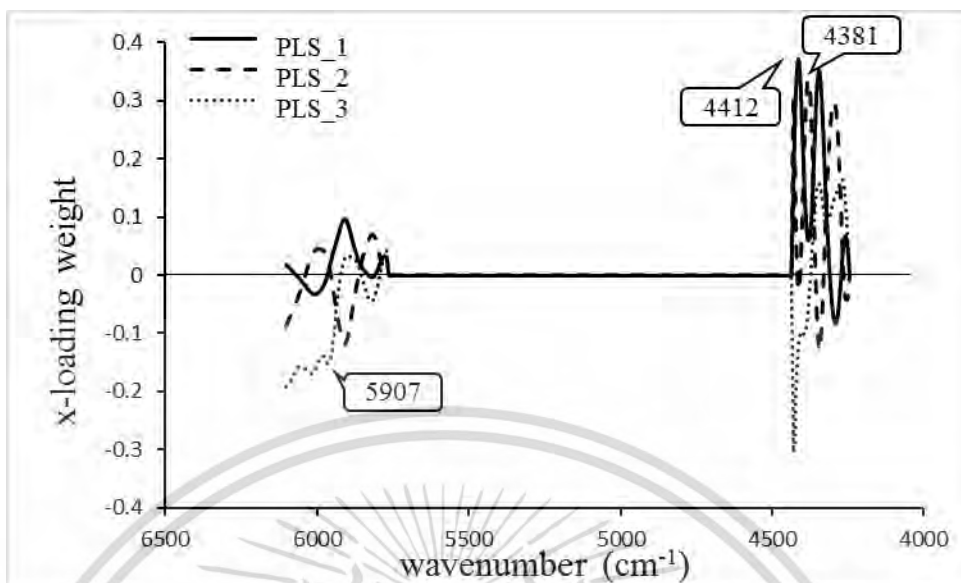
รูปที่ 4.21 กราฟ regression coefficient plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

(ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC



(ก)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ข)

รูปที่ 4.22 กราฟ x-loading weight plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation (ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC

ตารางที่ 4.10 การสัมพันธ์ของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

regression coefficient					
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)		bond vibration	structure
		referred from reference [2]			
AAC 6017	1662	1660		C-H str. first overtone	<i>cis</i> -RCH=CHR ¹
5940	1684	1685		C-H str. first overtone	aromatic
5862	1706	1765		C-H str. first overtone	CH ₂
5708	1752	1765		C-H str. first overtone	CH ₂
5577	1793	1780		C-H str. first overtone	cellulose

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.10 (ต่อ) การสัมพันธ์ของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

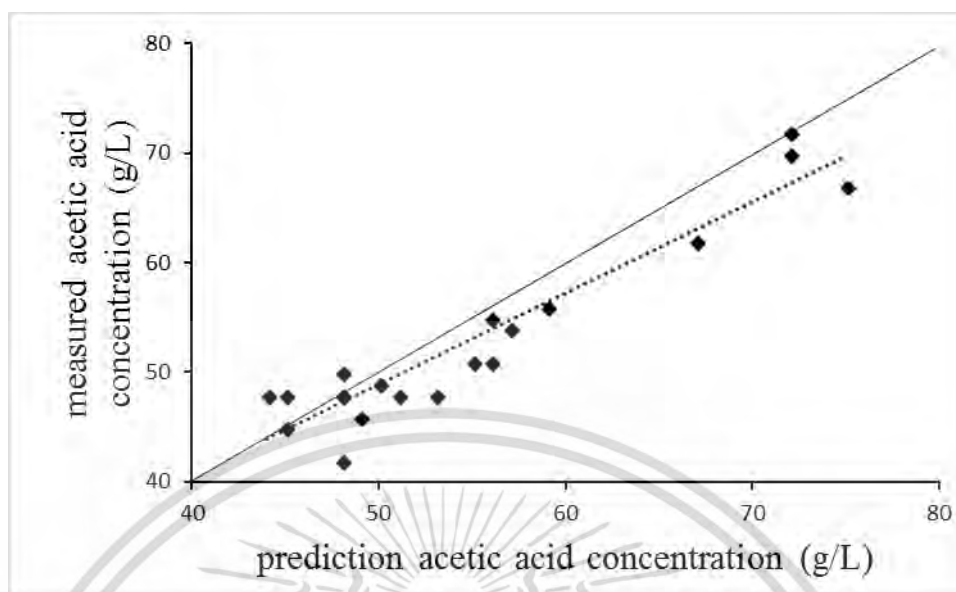
regression coefficient						
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)		bond vibration	structure	
		referred from reference [2]				
AAC	6017	1662	1660	C-H str. first overtone	<i>cis</i> -RCH=CHR ¹	
	5940	1684	1685	C-H str. first overtone	aromatic	
	5862	1706	1765	C-H str. first overtone	CH ₂	
	5708	1752	1765	C-H str. first overtone	CH ₂	
	5577	1793	1780	C-H str. first overtone	cellulose	
x-loading weight						
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)		PLS latent variable	bond vibration	structure
		referred from reference [2]				
AAC	5978	1673	1685	2	C-H str. first overtone	aromatic
	5955	1678	1685	3	C-H str. first overtone	aromatic
	5870	1704	1705	1	C-H str. first overtone	CH ₃
regression coefficient						
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)		bond vibration	structure	
		referred from reference [2]				
ETC	5909	1692	1695	C-H str. first overtone	CH ₃	
	4428	2258	2252	O-H str. +O-H def.	starch	
	4381	2283	2280	C-H str. + C-H def.	CH ₃	

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

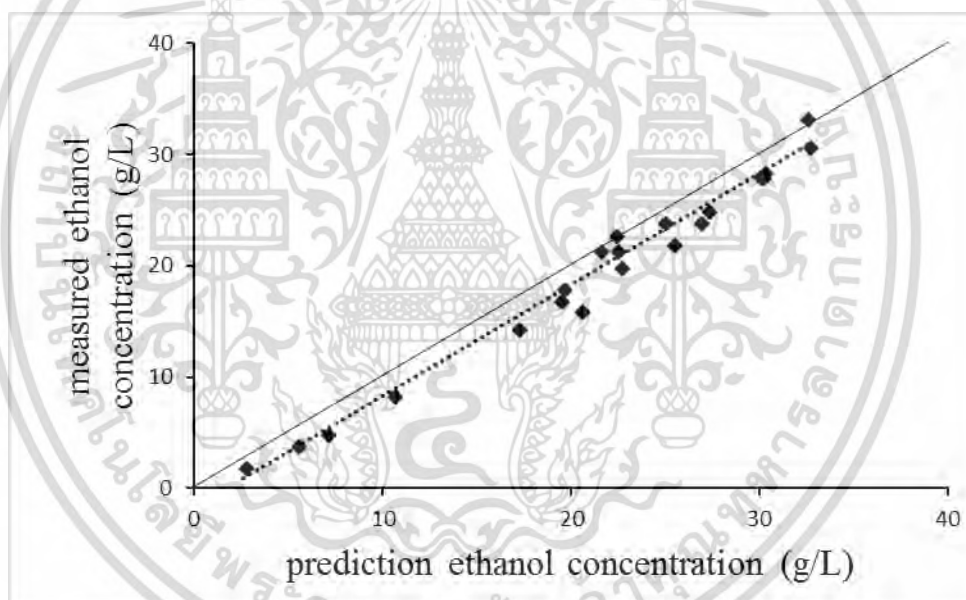
ตารางที่ 4.10 (ต่อ) การสัมพันธ์ของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)			
		referred from reference [2]	bond vibration	structure	
4343	2303	2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂	
4296	2328	2323	C-H str. + C-H def.	CH ₂	
x-loading weight					
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	PLS		structure
			latent variable	bond vibration	
5907	1693	1695	3	C-H str. first overtone	CH ₃
4412	2267	2252	1	O-H str. +O-H def.	starch
4381	2283	2280	2	C-H str. + C-H def.	CH ₃

จากการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี cross validation ในการทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จัก รูปที่ 4.23 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC (รูปที่ 4.23 ก) และ ETC (รูปที่ 4.23 ข) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีมาตรฐาน และจากตารางที่ 4.11 พบว่าสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า AAC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.901 ค่า RMSEP เท่ากับ 3.53 g/L SEP เท่ากับ 3.01 g/L bias เท่ากับ -1.9500 g/L และ RPIQ เท่ากับ 2.83 และสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า ETC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.980 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.10 g/L SEP เท่ากับ 1.25 g/L bias เท่ากับ -1.7100 g/L และ RPIQ เท่ากับ 4.90



(ก)



(ข)

รูปที่ 4.23 การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

(ก) ค่า AAC

(ข) ค่า ETC

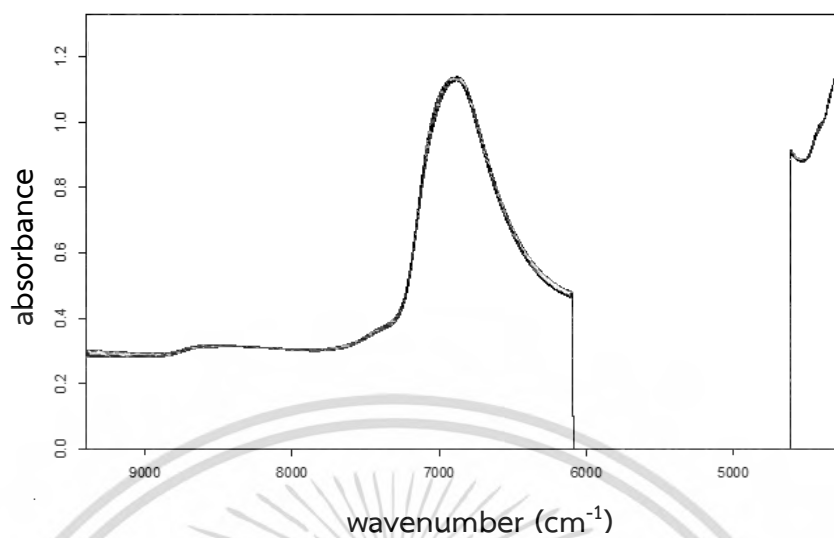
ตารางที่ 4.11 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่าง
ละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation

parameter	r^2	RMSEP (g/L)	SEP (g/L)	bias (g/L)	RPIQ
AAC	0.901	3.53	3.01	-1.9500	2.83
ETC	0.980	2.10	1.25	-1.7100	4.90

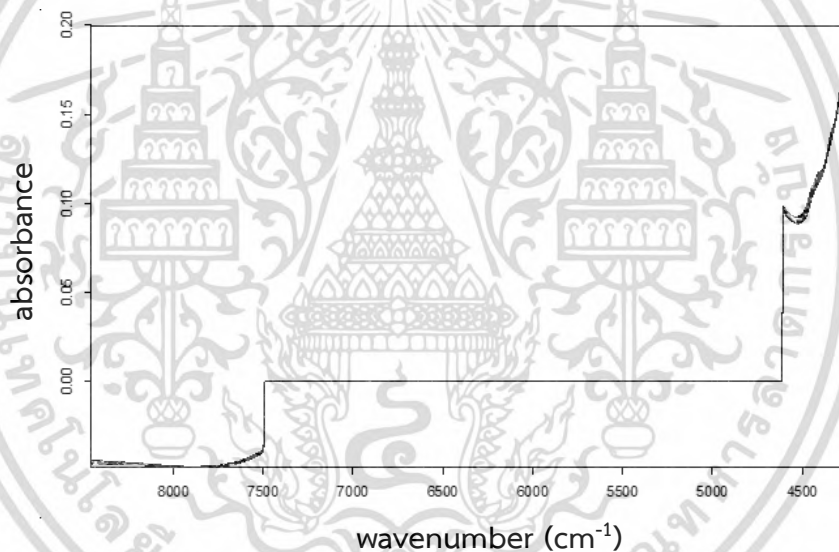
4.3.2.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set

ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี test set รูปที่ 4.24 เป็นสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นแบบ multiplicative scattering correction สำหรับค่า AAC และ vector normalization (SNV) สำหรับ ETC รูปที่ 4.25 และ 4.26 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC และ ETC (ตามลำดับ) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีอ้างอิงของชุด calibration (ก) และ ชุด validation (ข) และจากตารางที่ 4.12 พบว่าจากการสร้างแบบจำลองด้วย PLSR สำหรับการทำนายค่า AAC เลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 9403.8-6094.3 และ 4605.4-4242.9 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี MSC มี PLS factor เท่ากับ 5 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.949 และค่า RMSEE เท่ากับ 2.30 g/L และข้อมูลชุด validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.959 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.44 g/L bias เท่ากับ 1.1100 g/L และ RPIQ เท่ากับ 9.26 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ

และในการสร้างแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า ETC จะเลือกใช้ช่วงคลื่นที่ 8454.9-7498.3 และ 4605.4-4242.9 cm^{-1} จัดการสเปกตรัมด้วยวิธี SNV มี PLS factor เท่ากับ 3 โดยข้อมูลชุด calibration มีค่า R^2 เท่ากับ 0.920 และค่า RMSEE เท่ากับ 3.15 g/L และข้อมูลชุด validation ค่า r^2 เท่ากับ 0.938 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.73 g/L bias เท่ากับ -0.3960 g/L และ RPIQ เท่ากับ 7.49 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกับตารางแปลความหมายของค่า R และ R^2 (ตารางที่ 2.1) พบว่าแบบจำลองนี้สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพ

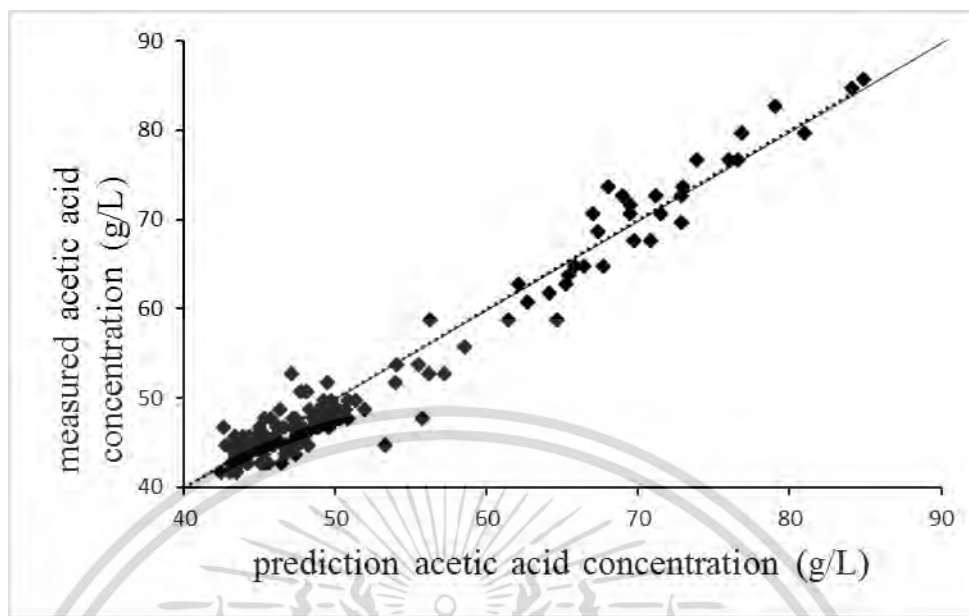


(ก)

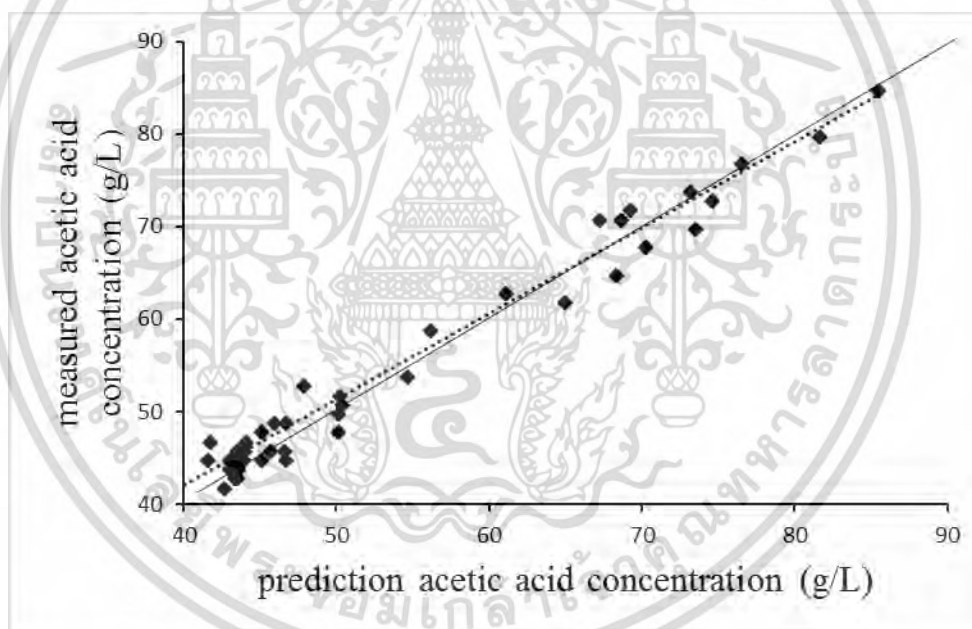


(ข)

รูปที่ 4.24 สเปกตรัมหลังการจัดการสเปกตรัมเป้ อตัน
 สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set
 (ก) โดยวิธี multiplicative scattering correction สำหรับค่า AAC
 (ข) โดยวิธี vector normalization สำหรับค่า ETC



(ก)

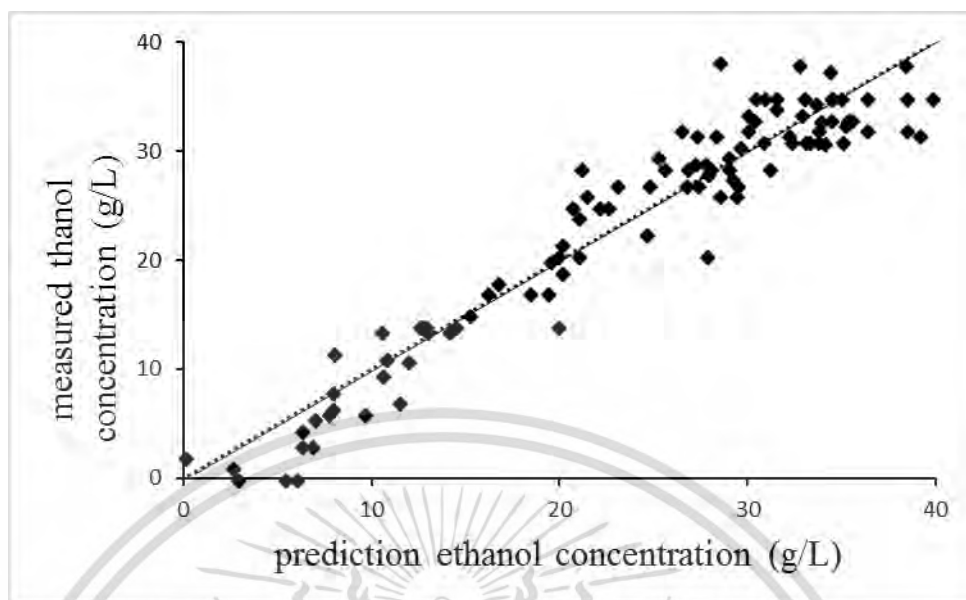


(ข)

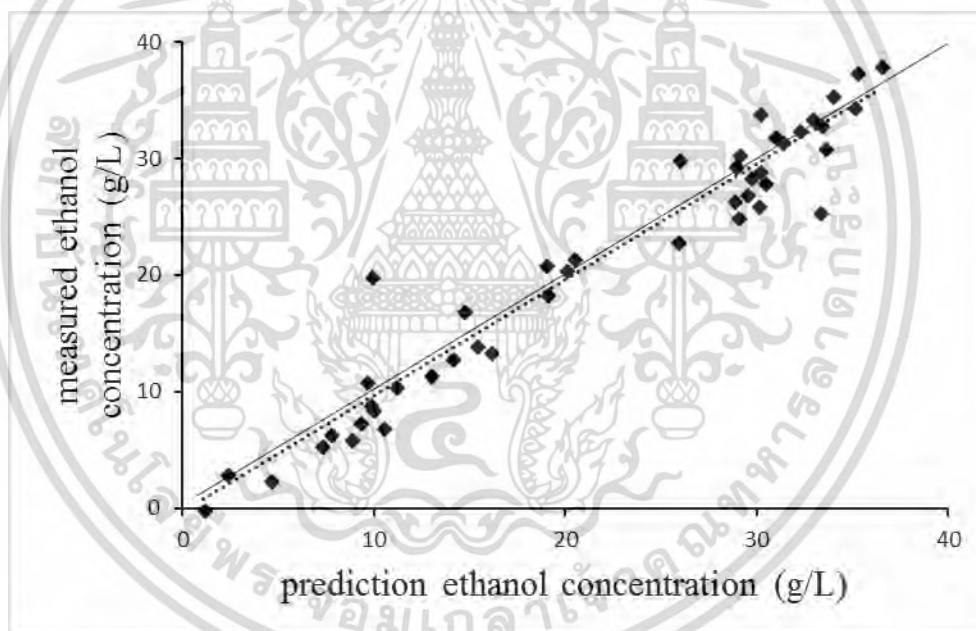
รูปที่ 4.25 กราฟ scatter plot สำหรับค่า AAC
สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

(ก) ชุด calibration (ข) ชุด validation

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



(ก)



(ข)

รูปที่ 4.26 กราฟ scatter plot สำหรับค่า ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

(ก) ชุด calibration (ข) ชุด validation

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.12 ผลการวิเคราะห์ด้วย PLSR ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

parameter	regions (cm ⁻¹)	pre-processing	PLS Factor	calibration		validation			RPIQ
				R ²	RMSEE (g/L)	r ²	RMSEP (g/L)	bias (g/L)	
AAC	9403.8-6094.3	MSC	5	0.949	2.30	0.959	2.44	1.1100	9.26
	4605.4-4242.9								
ETC	8454.9-7498.3	SNV	3	0.920	3.15	0.938	2.73	-0.3960	7.49
	4605.4-4242.9								

*หมายเหตุ MSC คือ multiplicative scattering correction

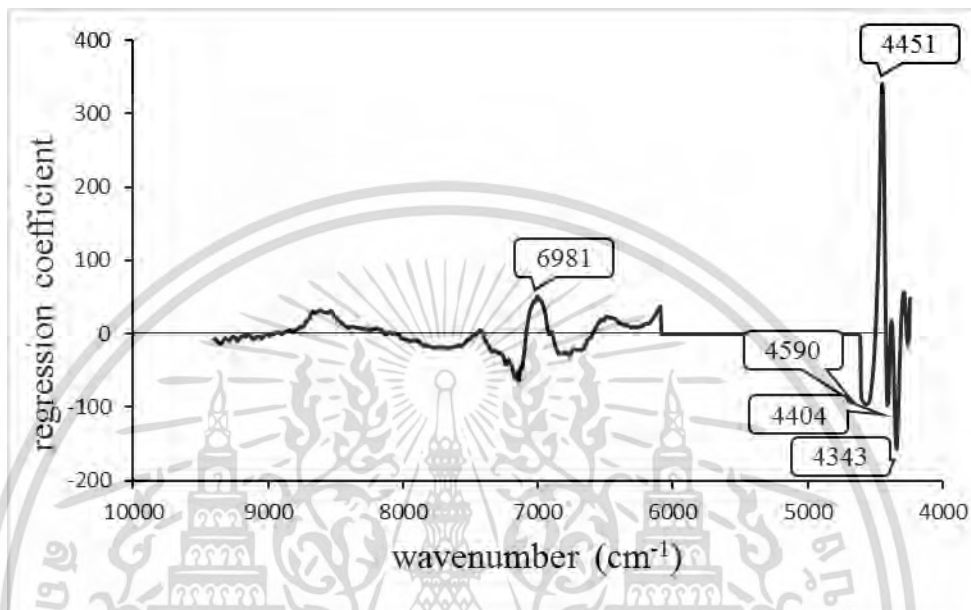
SNV คือ vector normalization

ในการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี test set รูปที่ 4.27 และ 4.28 แสดงค่า regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า AAC (ก) และ EET (ข) และจากตารางที่ 4.7 พบว่าค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า AAC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสันสะท้อนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า AAC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 4451 cm⁻¹ เป็นการสันสะท้อนของพันธะ O-H str. + O-H def. และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 4466 cm⁻¹ เป็นการสันสะท้อนของพันธะ C-H str. + C=O str. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 2 อยู่ที่ wavenumber 4397 cm⁻¹ เป็นการสันสะท้อนของพันธะ C-H str. + C-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 4474 cm⁻¹ เป็นการสันสะท้อนของพันธะ C-H str. + C=O str. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 4 อยู่ที่ wavenumber 4412 cm⁻¹ เป็นการสันสะท้อนของพันธะ C-H str. + C-H def. และที่สูงที่สุดของ PLS vector 5 อยู่ที่ wavenumber 4451 cm⁻¹ เป็นการสันสะท้อนของพันธะ O-H str. + O-H def. จะเห็นได้ว่าการสันสะท้อนของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายค่า AAC

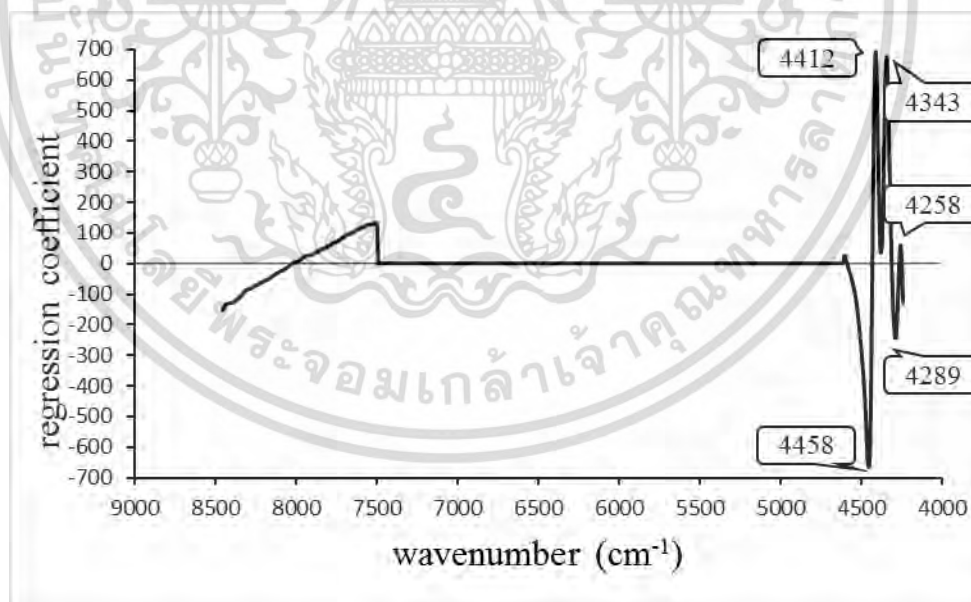
และค่า regression coefficient และ x-loading weight สำหรับการทำนายค่า ETC ที่มีค่าสูงที่สุดจะเป็นการสันสะท้อนของพันธะที่มีผลต่อการทำนายค่า ETC มากที่สุด โดยค่า regression coefficient ที่สูงที่สุดอยู่ที่ wavenumber 4412 cm⁻¹ เป็นการสันสะท้อนของพันธะ O-H str. + O-H def. และค่า x-loading weight ที่สูงที่สุดของ PLS vector 1 อยู่ที่ wavenumber 4412 cm⁻¹ เป็นการ

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สัมพันธ์ของพันธะ O-H str. +O-H def. ที่สูงที่สุดของ PLS vector 2 อยู่ที่ wavenumber 4242 cm^{-1} เป็นการสัมพันธ์ของพันธะ C-H def. second overtone และที่สูงที่สุดของ PLS vector 3 อยู่ที่ wavenumber 4474 cm^{-1} เป็นการสัมพันธ์ของพันธะ O-H str. +O-H def. จะเห็นได้ว่าการสัมพันธ์ของ C-H และ O-H มีผลต่อการทำนายค่า ETC



(ก)



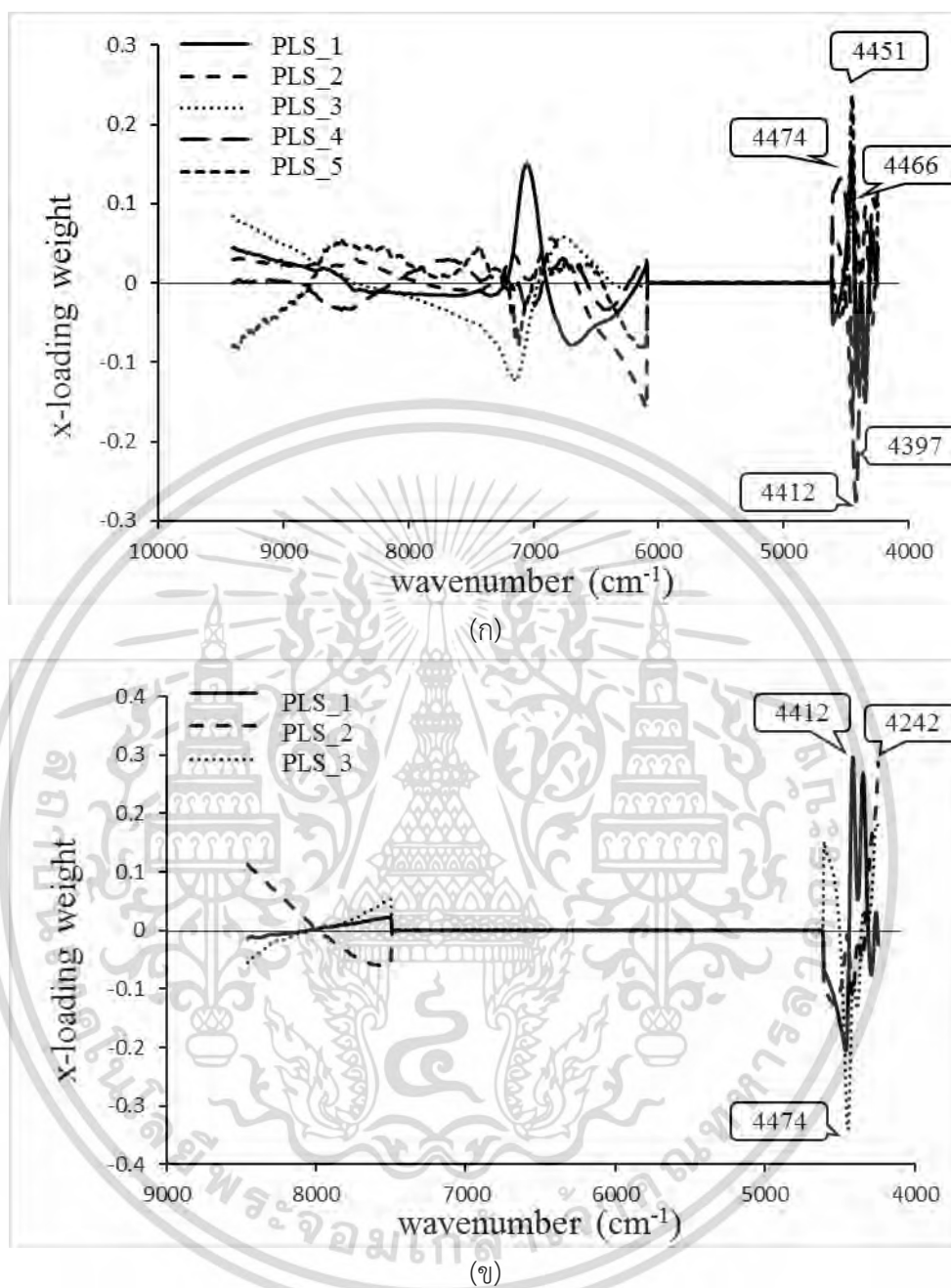
(ข)

รูปที่ 4.27 กราฟ regression coefficient plot

สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

(ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.28 กราฟ x-loading weight plot สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set (ก) สำหรับค่า AAC (ข) สำหรับค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.13 การสันเสเทียบของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

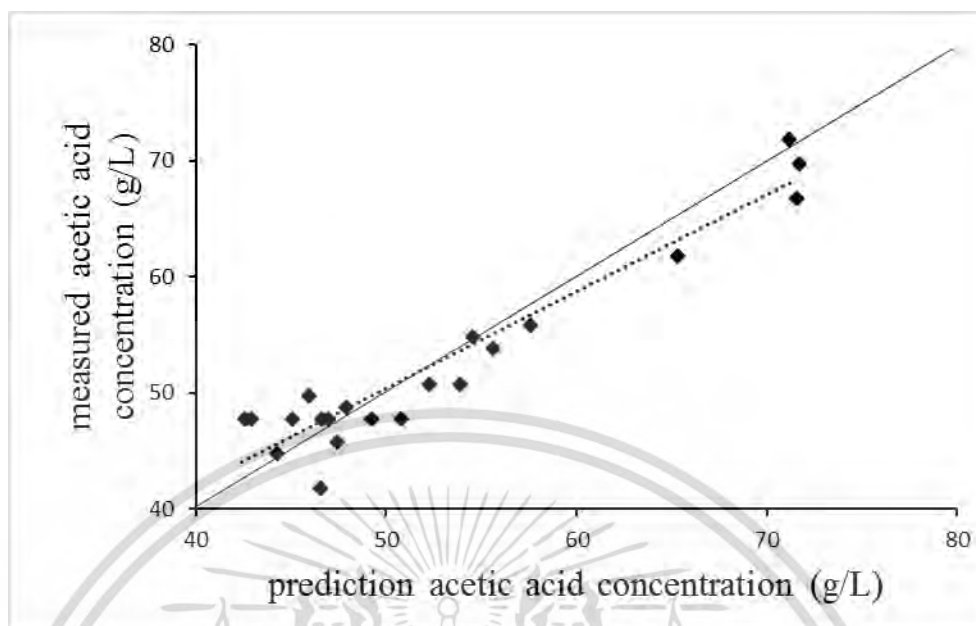
regression coefficient						
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)		bond vibration	structure	
		referred from reference [2]				
AAC	6981	1432	1440	O-H str. first overtone 2 x C-H str. + 2 x C-H def.	starch CH	
	4590	2179	2280	C-H str. + C-H def.	CH ₃	
	4451	2247	2252	O-H str. + O-H def.	starch	
	4404	2271	2280	C-H str. + C-H def.	CH ₃	
	4343	2271	2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂	
x-loading weight						
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)		PLS latent variable	bond vibration	structure
		referred from reference [2]				
4474	2235	2200	2200	3	C-H str. + C=O str.	-CHO
4466	2239	2200	2200	1	C-H str. + C=O str.	-CHO
4451	2247	2252	2252	5	O-H str. + O-H def.	starch
4412	2267	2280	2280	4	C-H str. + C-H def.	CH ₃
4397	2274	2280	2280	2	C-H str. + C-H def.	CH ₃
regression coefficient						
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm)		bond vibration	structure	
		referred from reference [2]				
ETC	4458	2243	2252	O-H str. + O-H def.	starch	
	4412	2267	2252	O-H str. + O-H def.	starch	

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

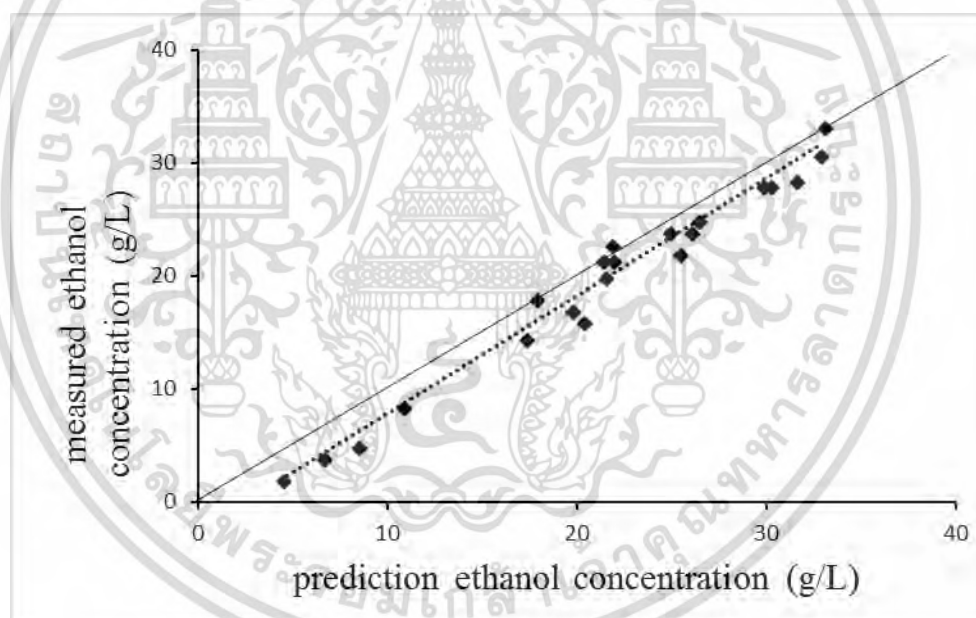
ตารางที่ 4.13 (ต่อ) การสัมพันธ์ของพันธะ สำหรับ regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

regression coefficient					
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	bond vibration	structure	
4343	2303	2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂	
4289	2332	2336	C-H str. + C-H def.	cellulose	
4258	2348	2352	C-H def. second overtone	cellulose	
ETC					
x-loading weight					
wavenumber (cm ⁻¹)	wavelength (nm)	wavelength (nm) referred from reference [2]	PLS latent variable	bond vibration	structure
4474	2235	2252	3	O-H str. + O-H def.	starch
4412	2266	2252	1	O-H str. + O-H def.	starch
4242	2357	2352	2	C-H def. second overtone	cellulose

จากการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี test set ในการทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จัก รูปที่ 4.29 แสดงการเปรียบเทียบค่า AAC (รูปที่ 4.29 ก) และ ETC (รูปที่ 4.29 ข) ที่ทำนายโดยแบบจำลองของเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี กับค่าที่วัดด้วยวิธีอ้างอิง และจากตารางที่ 4.14 พบว่าสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า AAC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.913 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.83 g/L SEP เท่ากับ 2.90 g/L bias เท่ากับ -0.0510 g/L และ RPIQ เท่ากับ 3.67 และสำหรับแบบจำลองการทำนายค่า ETC มีค่า r^2 เท่ากับ 0.976 ค่า RMSEP เท่ากับ 2.22 g/L SEP เท่ากับ 1.40 g/L bias เท่ากับ -1.7500 g/L และ RPIQ เท่ากับ 4.77



(ก)



(ข)

รูปที่ 4.29 การทำนายตัวอย่างที่ไม่รู้จักด้วยเนียร์อินพราเรดสเปกโทรสโกปี สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

(ก) ค่า AAC

(ข) ค่า ETC

ตารางที่ 4.14 ผลการวิเคราะห์ของตัวอย่างที่ไม่รู้จัก สำหรับแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set

parameter	r^2	RMSEP (g/L)	SEP (g/L)	bias (g/L)	RPIQ
AAC	0.913	2.83	2.90	-0.0510	3.67
ETC	0.976	2.22	1.40	-1.7500	4.77

4.3.2.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง

จากการพิสูจน์แบบจำลองที่สร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี cross validation และ test set พบว่าแบบจำลองที่ได้จากวิธี test set ให้ผลการทำนายค่าที่ดีกว่าเนื่องจากมีค่า r^2 ที่สูงกว่าทั้งการทำนายค่า AAC และ ETC แต่เมื่อนำมาเปรียบเทียบกับตารางเปรียบเทียบค่า R และ R^2 (ตาราง 2.1) พบว่าอยู่ในกลุ่มที่สามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพเช่นเดียวกัน

4.4 การเปรียบเทียบแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม กับ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย

จากการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม และ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย จากตารางที่ 4.15 เมื่อนำค่า r^2 มาเปรียบเทียบกัน พบว่าทุกแบบจำลองสามารถใช้ในการประยุกต์ใช้ส่วนใหญ่ รวมถึงการประกันคุณภาพเช่นเดียวกัน ทั้งแบบจำลองสำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC

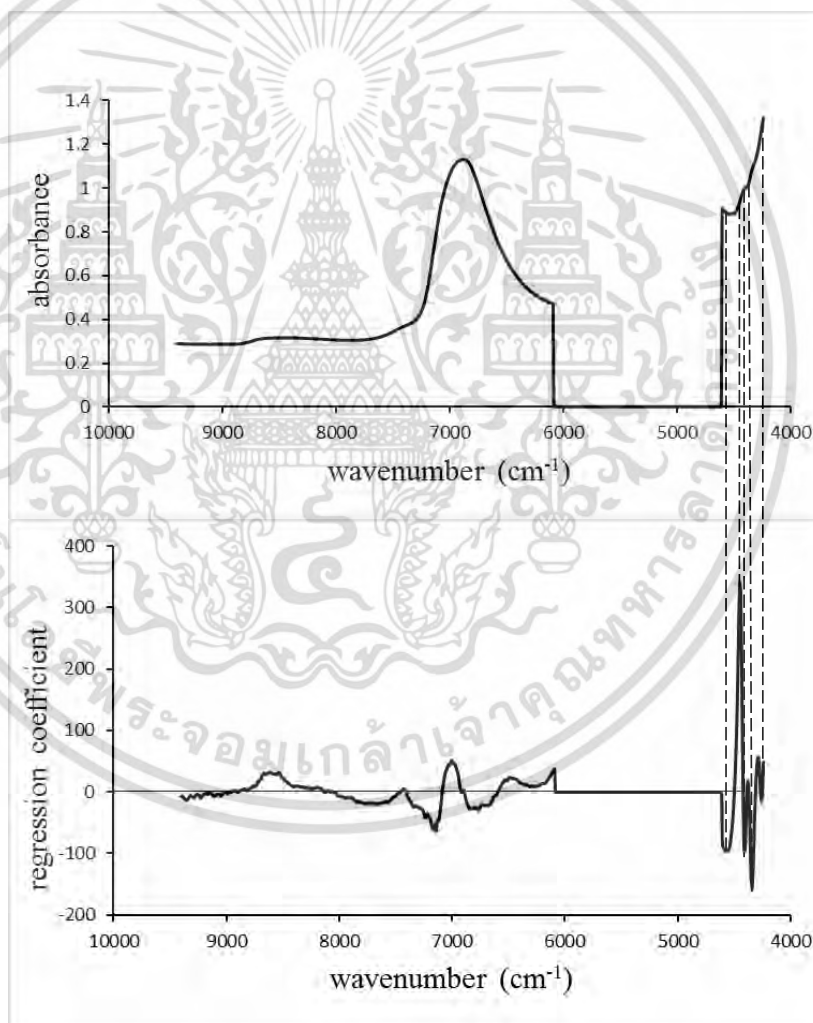
ตารางที่ 4.15 การเปรียบเทียบค่า r^2

parameter	การสร้างแบบจำลอง	วิธีการสร้าง	r^2
AAC	3 สเปกตรัม	cross validation	0.947
		test set	0.953
	1 สเปกตรัม	cross validation	0.952
		test set	0.959
ETC	3 สเปกตรัม	cross validation	0.926
		test set	0.934
	1 สเปกตรัม	cross validation	0.934
		test set	0.938

4.5 ผลคูณของค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นกับ regression coefficient

4.5.1 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก

จากแบบจำลองที่ดีที่สุดสำหรับการทำนายค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (แบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี test set) พบว่าที่ wavenumber 4451 cm^{-1} มีผลต่อแบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติกมากที่สุด เนื่องจากมีผลคูณของค่าการดูดกลืนแสง (absorbance) ของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นกับค่า regression coefficient สูงที่สุด ซึ่งเป็นการสันนิษฐานของพันธะ O-H str. + O-H def.

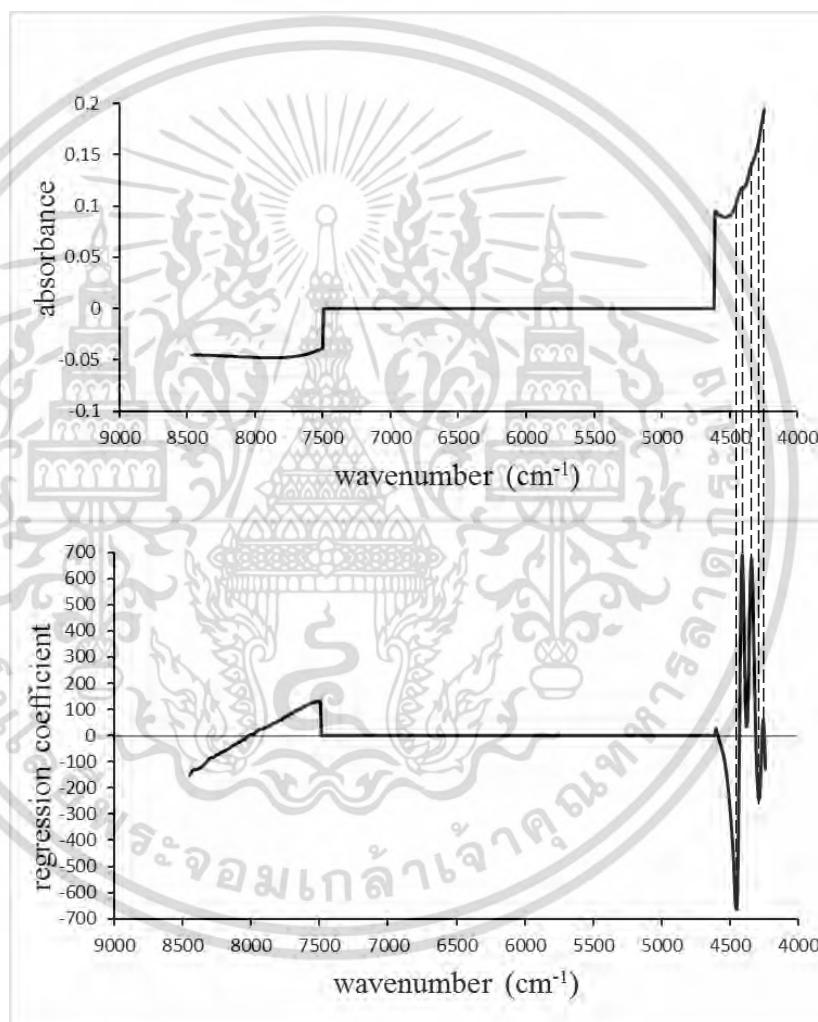


รูปที่ 4.30 การคูณของค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นกับ regression coefficient สำหรับค่า AAC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.5.2 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของเอทานอล

จากแบบจำลองที่ดีที่สุดสำหรับการทำนายค่าความเข้มข้นของเอทานอล (แบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ยด้วยวิธี test set) พบว่าที่ wavenumber 4343 cm^{-1} มีผลต่อแบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติกมากที่สุด เนื่องจากมีผลคูณของค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเป็น สัมพันธ์กับค่า regression coefficient สูงที่สุด ซึ่งเป็นการสัมพันธ์ของพันธะ C-H str. + C-H def.

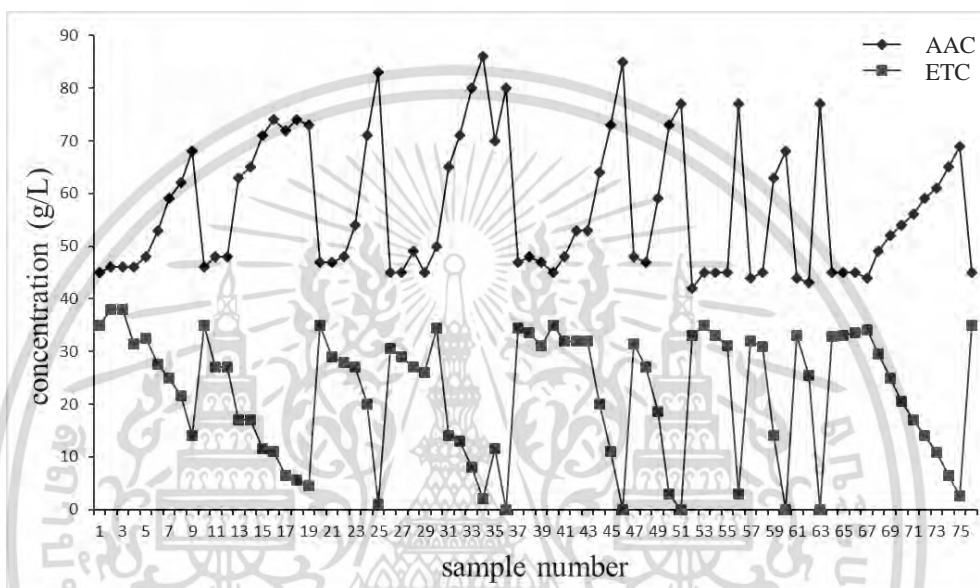


รูปที่ 4.31 การคูณของค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเป็น สัมพันธ์กับ regression coefficient สำหรับค่า ETC

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4.6 พฤติกรรมการเปลี่ยนแปลงค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติคติกและเอทานอล

จากรูปที่ 4.32 พบว่าในกระบวนการหมักน้ำส้มสายชูข้าว ค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติคติกจะมีค่าเพิ่มขึ้นระหว่างการหมัก แต่ค่าความเข้มข้นของเอทานอลจะมีค่าลดลง และเมื่อเปลี่ยนวัฏจักรของการหมักใหม่ พฤติกรรมการเปลี่ยนแปลงค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติคติกและเอทานอลยังคงเป็นเช่นเดิม โดยวัฏจักรของกระบวนการหมักน้ำส้มสายชูใช้ระยะเวลาประมาณ 8-11 วันต่อวัฏจักร



รูปที่ 4.32 พฤติกรรมการเปลี่ยนแปลงค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติคติกและเอทานอล

บทที่ 5

สรุปผลการทดลอง

5.1 repeatability, reproducibility และ R^2_{max}

จากผลการทดลองพบว่าค่า repeatability และ reproducibility ในการสแกนมีค่าต่ำ แสดงว่า น้ำส้มสายชูขาวสามารถสแกนได้อย่างแม่นยำ และค่า R^2_{max} ในการวัดค่าด้วยวิธีอ้างอิงมีค่าสูง แสดงว่าค่าอ้างอิงที่วัดได้มีความแม่นยำสูง ดังนั้นจึงมีความเป็นไปได้ในการสร้างแบบจำลองเพื่อทำนายค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) และค่าความเข้มข้นของเอทานอล (ETC)

5.2 การวิเคราะห์สเปกตรัม

จากผลการวิเคราะห์สเปกตรัมพบว่าน้ำส้มสายชูขาวมีการดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี มีช่วงคลื่นที่ปรากฏอย่างชัดเจน แม้ช่วงคลื่นเหล่านั้นอาจจะไม่ตรงกับช่วงคลื่นที่ปรากฏของกรดอะซิติกและเอทานอลบริสุทธิ์ เนื่องจากในน้ำส้มสายชูขาวอาจจะมีองค์ประกอบอื่นนอกจากกรดอะซิติกและเอทานอล แต่ก็สามารถนำน้ำส้มสายชูมาสร้างแบบจำลองได้

5.3 แบบจำลอง

จากการเก็บข้อมูลสถิติของตัวอย่างน้ำส้มสายชูขาวพบว่าจำนวนตัวอย่างเพียงพอต่อการสร้างแบบจำลองการทำนายค่า AAC และ ETC และข้อมูลที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองมีค่า AAC และ ETC ที่ครอบคลุมต่อการหมักน้ำส้มสายชูขาวที่ต้องการให้ค่าความเข้มข้นของสารละลายรวม (TC) เท่ากับ 80 g/L ตั้งแต่เริ่มจนจบกระบวนการหมัก และข้อมูลของตัวอย่างที่ไม่รู้จักมีค่า AAC และ ETC อยู่ในช่วงที่แบบจำลองยังครอบคลุม

5.3.1 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม

5.3.1.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation

จากแบบจำลองการทำนายค่า AAC และ ETC พบว่าแบบจำลองทั้งสองสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้ เนื่องจากมีค่า r^2 สูง และเมื่อนำแบบจำลองไปทดสอบกับตัวอย่างที่ไม่รู้จัก พบว่าได้ค่า r^2 เท่ากับ 0.911 สำหรับการทำนายค่า AAC และ 0.911 สำหรับการทำนายค่า ETC

5.3.1.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set

จากแบบจำลองการทำนายค่า AAC และ ETC พบว่าแบบจำลองทั้งสองสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้ เนื่องจากมีค่า r^2 สูง และเมื่อนำแบบจำลองไปทดสอบกับตัวอย่างที่ไม่รู้จัก พบว่าได้ค่า r^2 เท่ากับ 0.898 สำหรับการทำนายค่า AAC และ 0.971 สำหรับการทำนายค่า ETC

5.3.1.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง

จากการพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation และ test set พบว่าแบบจำลองที่ได้จากวิธี test set ให้ผลการทำนายค่าที่ ดีกว่า เนื่องจากมีค่า r^2 ที่ สูงกว่าที่ งครทำนายค่า AAC และ ETC ดังนั้น หากต้องการทำนายค่า AAC และ ETC ในน าสัมสยชชวครควรเลือกใช้แบบจำลองที่ ส้างด้วยวิธี test set

5.3.2 การสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย

5.3.2.1 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation

จากแบบจำลองการทำนายค่า AAC และ ETC พบว่าแบบจำลองทั้งสองสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้ เนื่องจากมีค่า r^2 สูง และเมื่อนำแบบจำลองไปทดสอบกับตัวอย่างที่ไม่รู้จัก พบว่าได้ค่า r^2 เท่ากับ 0.901 สำหรับการทำนายค่า AAC และ 0.980 สำหรับการทำนายค่า ETC

5.3.2.2 การพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี test set

จากแบบจำลองการทำนายค่า AAC และ ETC พบว่าแบบจำลองทั้งสองสามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้ เนื่องจากมีค่า r^2 สูง และเมื่อนำแบบจำลองไปทดสอบกับตัวอย่างที่ไม่รู้จัก พบว่าได้ค่า r^2 เท่ากับ 0.913 สำหรับการทำนายค่า AAC และ 0.976 สำหรับการทำนายค่า ETC

5.3.2.3 การเปรียบเทียบแบบจำลอง

จากการพิสูจน์แบบจำลองด้วยวิธี cross validation และ test set พบว่าแบบจำลองที่ได้จากวิธี test set ให้ผลการทำนายค่าที่ ดีกว่า เนื่องจากมีค่า r^2 ที่ สูงกว่าที่ งครทำนายค่า AAC และ ETC ดังนั้น หากต้องการทำนายค่า AAC และ ETC ในน าสัมสยชชวครควรเลือกใช้แบบจำลองที่ ส้างด้วยวิธี test set

5.4 การเปรียบเทียบแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม กับ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย

จากการสร้างแบบจำลองโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม และ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย พบว่าแบบจำลองที่ได้ทั้งสำหรับทำนายค่า AAC และ ETC ของทั้ง 2 วิธีมีสมรรถนะของแบบจำลองที่ใกล้เคียงกัน สามารถใช้แบบใดก็ได้

5.5 สรุปผลจาก regression coefficient และ x-loading weight

จาก regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 3 สเปกตรัม ด้วยวิธี cross validation และ test set สำหรับการทำนายค่า AAC พบการสับสนเหมือนของ O-H str. + O-H def. มีผลต่อการทำนายค่าที่ สุดและสำหรับการทำนายค่า ETC พบการสับสนเหมือนของ C-H str. + C-H def. มีผลต่อการทำนายค่าที่ สุด

จาก regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี cross validation สำหรับการทำนายค่า AAC พบการสับสนเหมือนของ C-H str. first overtone มีผลต่อการทำนายค่าที่ สุด และสำหรับการทำนายค่า ETC พบการสับสนเหมือนของ C-H str. + C-H def. มีผลต่อการทำนายค่าที่ สุด

จาก regression coefficient และ x-loading weight ของแบบจำลองที่สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set สำหรับการทำนายค่า AAC และ ETC พบการสับสนเหมือนของ O-H str. + O-H def. มีผลต่อการทำนายค่าที่ สุด

5.6 ผลคูณของค่าการดูดกลืนแสงของสเปกตรัมหลังจัดการสเปกตรัมเบื้องต้นกับ regression coefficient

5.6.1 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติค

จากแบบจำลองที่ดีที่สุดสำหรับการทำนายค่า AAC (แบบจำลองที่ สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set) พบว่าการสับสนเหมือนของพันธะ O-H str. + O-H def. มีผลต่อการทำนายค่า AAC มากที่สุด

5.6.2 แบบจำลองทำนายค่าความเข้มข้นของเอทานอล

จากแบบจำลองที่ดีที่สุดสำหรับการทำนายค่า ETC (แบบจำลองที่ สร้างโดยใช้สเปกตรัมตัวอย่างละ 1 สเปกตรัมเฉลี่ย ด้วยวิธี test set) พบว่าการสับสนเหมือนของพันธะ C-H str. + C-H def. มีผลต่อการทำนายค่า ETC มากที่สุด

5.7 พฤติกรรมการเปลี่ยนแปลงค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติคติกและเอทานอล

พฤติกรรมการเปลี่ยนแปลงค่า AAC และ ETC เป็นไปตามกระบวนการหมักน้ำตาลสับสายชู คือค่า AAC ในตอนเริ่มกระบวนการจะมีค่าเท่ากับ 45 g/L และในระหว่างกระบวนการหมักจะมีค่าเพิ่ม นขึ้นจนสิ้นสุดกระบวนการจะมีค่าประมาณ 80 g/L ในส่วนของค่า ETC ในตอนเริ่มกระบวนการจะมีค่าเท่ากับ 35 g/L และในระหว่างกระบวนการหมักจะมีค่าลดลง จนสิ้นสุดกระบวนการจะมีค่าประมาณ 0 g/L แม้เริ่มวัฏจักรใหม่พฤติกรรมการเปลี่ยนแปลงค่า AAC และ ETC ยังคงเป็นเช่นเดิม เนื่องจากแบคทีเรียที่ใช้ในการหมัก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่นิยมนำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จะเปลี่ยนแอลกอฮอล์ให้กลายเป็นกรดอะซิติก ค่า AAC จึงเพิ่มขึ้น ในขณะที่ค่า ETC จะลดลงจนหมดไป โดยในกระบวนการหมักใช้ระยะเวลาประมาณ 8-11 วันต่อหนึ่ง วัฏจักร

5.8 ข้อเสนอแนะ

ในการประยุกต์ใช้แบบจำลองการทำนายค่า AAC และ ETC ก่อนจะสแกนทุกครั้งควรนำขวดแก้ว สีชาที่บรรจุน้ำส้มสายชูขาวไว้ไปแช่น้ำแข็ง เพื่อให้หน้าสัมผัสยามีอุณหภูมิ 0°C จึงจะทำให้การทำนายค่า AAC และ ETC เกิดความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุด เนื่องจากในการสร้างแบบจำลอง น้ำส้มสายชูขาวที่นำมา สแกนมีอุณหภูมิ 0°C ดังนั้นจึงจำเป็นที่จะต้องควบคุมอุณหภูมิให้เท่ากัน เพื่อลดปัญหาการเลื่อนของ สเปกตรัม



เอกสารอ้างอิง

- [1] Krusong, W., Yaiyen, S. and Pornpukdeewatana, S.. 2014. “Impact of high initial concentrations of acetic acid and ethanol on acetification rate in an internal Venturi injector bioreactor.” **Journal of Applied Microbiology ISSN 1364-5072**. 2014 : 629-640.
- [2] Osborne, B.G., Fearn, T. and Hindle, P.H.. 1993. **Advantages and limitations of NIR. Practical NIR spectroscopy with applications in food and beverage analysis**. England : Longman Group UK.
- [3] Jung, T.. “สารเคมีในห้องครัว : น้ำส้มสายชู.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <https://touchzy-sci.blogspot.com>. 2558.
- [4] Chunga, H. and Kub, MS.. 2003. “Feasibility of monitoring acetic acid process using near-infrared spectroscopy.” **Vibrational Spectroscopy**. 2003(31) : 125–131.
- [5] Ariane, S.S., Pinto, A., Sandra, C., Pereira, B., Marcelo, P.A., Ribeiro c and Cristiane, S.F. 2016. “Monitoring of the cellulosic ethanol fermentation process by near-infrared spectroscopy.” **Bioresource Technology**. 2016(203) : 334–340.
- [6] Ji-yong, S., Xiao-bo, Z., Xiao-wei, H., Jie-wen Z., Yanxiao, L., Limin, H. and Jianchun, Z.. 2013. “Rapid detecting total acid content and classifying different types of vinegar based on near infrared spectroscopy and least-squares support vector machine.” **Food Chemistry**. 2013(138) : 192–199.
- [7] Ouyang, Q., Jiewen, Z., Wenxiu, P. and Quansheng, C.. 2016. “Real-time monitoring of process parameters in rice wine fermentation by a portable spectral analytical system combined with multivariate analysis.” **Food Chemistry**. 2016(190) : 135–141.
- [8] Liu, F., He, Y. and Wang, L.. 2008. “Comparison of calibrations for the determination of soluble solids content and pH of rice vinegars using visible and short-wave near infrared spectroscopy.” **analytica chimica acta**. 2008(610) : 196–204.

- [9] Saiz-Abajo, M.J., González-Saiz, J.M. and Pizarro, C.. 2005. “Prediction of organic acids and other quality parameters of wine vinegar by near-infrared spectroscopy. A feasibility study.” **Food Chemistry**. 2006(99) : 615–621.
- [10] Yano, T., Aimi, T., Nakano, Y. and Tamaf, M.. 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 bioengineerwpg**. 1997(84) : 461-465.
- [11] วรารุณี ครุสง และรุ่งนภา พงศ์สวัสดิ์มานิต. 2532. เทคโนโลยีการหมักในอุตสาหกรรม. กรุงเทพฯ : โอ.เอส.พรีนติ้ง เฮาส์.
- [12] ผศ.ดร.พิมพ์เพ็ญ พรเฉลิมพงศ์ และศาสตราจารย์เกียรติคุณ ดร.นิธิยา รัตนานนท์. “Sake / สาเก.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.foodnetworksolution.com>. 2556.
- [13] Bell E.. “MYTH BUSTED: SAKE ISN'T WINE.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <https://vinepair.com>. 2558.
- [14] ปวีรบรรต เมฆโหรา, ไหมไทย ส่งเกิด และสไบทิพย์ เกษประดิษฐ์. 2560. “การศึกษาผลของ แคลเซียมคลอไรด์ที่มีผลต่อเชื้อ Acetobacter acetic WK ในสภาวะการหมักน้ำส้มไวน์ข้าวที่ อุณหภูมิสูงและอุณหภูมิห้อง.” ปรินญาวิทยาศาสตร์บัณฑิต. สาขาวิชาเทคโนโลยีการหมักใน อุตสาหกรรม คณะอุตสาหกรรมเกษตร. สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหาร ลาดกระบัง.
- [15] Radhakrishnan, M. “9 Amazing Health Benefits And Uses Of Rice Vinegar.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.stylecraze.com>. 2559
- [16] วรารุณี ครุสง. “ระบบผลิตน้ำส้มสายชูหมักด้วยตัวผสมน้ำหมักเข้ากับอากาศภายในถังหมัก (Internal Venturi Ejector System).” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <https://www.ipthailand.go.th>. 2560
- [17] Amprohealth. “กรดอะซิติกคืออะไรและมีประโยชน์อย่างไร.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://amprohealth.com>. 2561
- [18] สยามเคมี. “เอทานอล/เอทิลแอลกอฮอล์.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.siamchemi.com>. 2559.
- [19] ณปภัช พิมพ์ดี. “การไทเทรต (Titration).” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.scimath.org>. 2560.
- [20] Vigo Ltd. “Ebulliometer.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.vigoltd.com>. 2561.

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

- [21] กรมพัฒนาพลังงานทดแทนและอนุรักษ์พลังงาน กระทรวงพลังงาน. 2559. **หลักสูตรภาคปฏิบัติด้านพลังงานทดแทน (เอทานอลและก๊าซชีวภาพ)**. กรุงเทพฯ.
- [22] ศูนย์วิจัยเนียร์อินฟราเรดสเปกโตรสโกปีสำหรับผลผลิตทางการเกษตรและอาหาร. “เทคโนโลยีเนียร์อินฟราเรดสเปกโตรสโกปีสำหรับผลผลิตเกษตรและอาหาร.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : <http://www.nirsresearch.com>. 2556.
- [23] ดร.สุทิน ชนะบุญ. “สถิติและการวิเคราะห์ข้อมูลในงานวิจัยด้านสุขภาพเบื้องต้น.” [Online]. เข้าถึงได้จาก : www.kkpho.go.th. 2560.
- [24] นิพนธ์ ตั้งคณานุรักษ์. 2545. **หลักพื้นฐานของเทคนิคอินฟราเรดย่านใกล้สเปกโตรสโกปี**. กรุงเทพฯ : สถาบันค้นคว้าและพัฒนาผลผลิตทางการเกษตรและอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์.
- [25] Pinheiro, E., Ceddia, M., Clingensmith, C., Grunwald, S. and Vasques, G.. 2017. “Prediction of soil physical and chemical properties by visible and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy in the central amazon.” **MDPI**. 2017(9) : 292-314.
- [26] Posom, J., Shrestha, A., Saechua, W. and Sirisomboon, P.. 2016. “Rapid non-destructive evaluation of moisture content and higher heating value of *Leucaena leucocephala* pellets using near infrared spectroscopy.” **Energy**. 2016(107) : 464-472.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก1 ค่าอ้างอิงสำหรับค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) และเอทานอล (ETC)

วันที่	AAC (g/L)		ETC (g/L)	
	ถังที่ 1	ถังที่ 2	ถังที่ 1	ถังที่ 2
6/5/2560	43	46	38.0	38.0
7/5/2560	43	46	37.5	38.0
8/5/2560	45	46	37.5	31.5
9/5/2560	45	48	35.0	32.5
10/5/2560	43	53	31.0	27.5
11/5/2560	43	59	31.0	25.0
12/5/2560	43	62	31.0	21.5
13/5/2560	43	68	32.5	14.0
14/5/2560	42	76	31.0	8.5
15/5/2560	42	89	35.5	6.0
16/5/2560	46	89	31.5	4.0
17/5/2560	47	46	31.0	35.0
18/5/2560	45	48	28.5	27.0
19/5/2560	45	48	28.5	27.0
20/5/2560	45	63	29.5	17.0
21/5/2560	44	65	33.0	17.0
22/5/2560	45	71	33.5	11.5
23/5/2560	45	74	32.0	11.0
24/5/2560	44	-	35.0	-
25/5/2560	44	72	38.3	6.5
26/5/2560	46	74	26.0	5.5
27/5/2560	45	73	25.0	4.5
28/5/2560	45	47	26.0	35.0
29/5/2560	45	47	26.0	29.0

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก1 (ต่อ) ค่าอ้างอิงสำหรับค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) และเอทานอล (ETC)

วันที่	AAC (g/L)		ETC (g/L)	
	ถังที่ 1	ถังที่ 2	ถังที่ 1	ถังที่ 2
30/5/2560	45	48	27.0	28.0
31/5/2560	46	54	29.0	27.0
1/6/2560	45	71	28.0	20.0
2/6/2560	-	83	28.5	1.0
3/6/2560	-	45	27.5	35.0
4/6/2560	45	46	27.0	25.0
6/6/2560	48	45	31.5	30.5
7/6/2560	45	45	30.5	29.0
8/6/2560	-	49	-	57.0
17/6/2560	46	50	17.0	34.5
19/6/2560	50	65	15.0	14.0
20/6/2560	49	71	14.0	13.0
21/6/2560	47	80	14.0	8.0
22/6/2560	49	86	13.5	2.0
29/6/2560	47	70	9.5	11.5
3/7/2560	47	80	9.0	0.0
5/7/2560	47	47	8.5	34.5
6/7/2560	47	48	7.0	33.5
7/7/2560	47	47	7.0	31.0
14/7/2560	45	45	35.0	35.0
15/7/2560	43	48	32.0	32.0
16/7/2560	43	45	34.0	34.0
17/7/2560	43	53	31.5	32.0

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก1 (ต่อ) ค่าอ้างอิงสำหรับค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) และเอทานอล (ETC)

วันที่	AAC (g/L)		ETC (g/L)	
	ถังที่ 1	ถังที่ 2	ถังที่ 1	ถังที่ 2
18/7/2560	44	64	26.5	20.0
19/7/2560	45	73	20.5	11.0
21/7/2560	46	48	22.5	31.5
22/7/2560	43	47	28.5	27.0
23/7/2560	45	59	24.0	18.5
24/7/2560	46	73	21.5	3.0
25/7/2560	46	77	20.5	0.0
27/7/2560	45	42	18.0	33.0
22/8/2560	51	77	29.5	3.0
23/8/2560	51	-	28.5	-
24/8/2560	52	44	28.5	32.0
25/8/2560	51	45	28.5	30.9
28/8/2560	49	63	25.0	14.0
29/8/2560	47	68	21.0	0.0
30/8/2560	48	45	20.5	35.0
31/8/2560	45	44	19.0	33.0
1/9/2560	-	43	-	25.5
11/9/2560	48	77	13.5	0.0
12/9/2560	50	45	13.5	32.8
13/9/2560	50	45	13.5	33.0
14/9/2560	48	45	14.0	33.5
15/9/2560	48	44	10.5	34.0
18/9/2560	49	49	7.5	29.5

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก1 (ต่อ) ค่าอ้างอิงสำหรับค่าความเข้มข้นของกรดอะซิติก (AAC) และเอทานอล (ETC)

วันที่	AAC (g/L)		ETC (g/L)	
	ถังที่ 1	ถังที่ 2	ถังที่ 1	ถังที่ 2
19/9/2560	49	52	6.0	25.0
20/9/2560	48	54	6.0	20.5
21/9/2560	49	56	6.0	17.0
22/9/2560	49	59	5.5	14.0
23/9/2560	49	61	3.0	10.8
25/9/2560	-	65	-	6.5
26/9/2560	-	69	-	2.5
30/9/2560	-	45	-	35.0
2/10/2560	-	48	-	33.3
3/10/2560	-	49	-	28.5
5/10/2560	-	51	-	24.0
6/10/2560	-	55	-	21.5
9/10/2560	42	62	28.0	8.5
10/10/2560	48	67	25.0	5.0
11/10/2560	48	70	14.0	4.0
12/10/2560	48	72	22.0	2.0
13/10/2560	48	45	21.5	30.8
15/10/2560	48	48	18.0	28.1
16/10/2560	48	50	17.0	22.8
17/10/2560	46	51	17.0	20.0
18/10/2560	-	54	-	16.0
19/10/2560	-	56	-	14.5

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาคผนวก ข

**การสันเสทือนของพันธะเมื่อคุณกลืน
คลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ**

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [2]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
713	C-H str. fourth overtone	benzene
738	O-H str. third overtone	ROH
740	C-H str. fourth overtone	CH ₃
746	C-H str. fourth overtone	CH ₂
747	O-H str. third overtone	ArOH
760	O-H str. third overtone	H ₂ O
762	C-H str. fourth overtone	CH ₂
779	N-H str. third overtone	RNH ₂
790	N-H str. third overtone	ArNH ₂
806	N-H str. third overtone	RNH ₂
808	2 x N-H str. 2 x N-H def.+ 2 x C-N str.	RNHR'
815	N-H str. third overtone	RNHR'
832	2 x N-H str. 2 x N-H def.+ 2 x C-N str.	RNHR'
840	3 x C-H str. + 2 x C-C str.	benzene
874	C-H str. third overtone	benzene
880	C-H str. third overtone	CHCl ₃
900	C-H str. third overtone	CH ₃
910	C-H str. third overtone	protein
913	C-H str. third overtone	CH ₂
928	C-H str. third overtone	Oil
938	C-H str. third overtone	CH ₂
970	O-H str. second overtone	ROH, H ₂ O
990	O-H str. second overtone	starch
1000	O-H str. second overtone	ArOH
1015	2 x C-H str. + 3 x C-H def.	CH ₃
1020	2 x N-H str. + 2 x amide I	protein
1020	N-H str. second overtone	ArNH ₂
1030	N-H str. second overtone	RNH ₂

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [2]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
1037	2 x C-H str. +2 x C-H def. + (CH ₂) _n	oil
1053	2 x C-H str. +2 x C-H def. + (CH ₂) _n	CH ₂₀
1060	N-H str. second overtone	RNH ₂
1080	2 x C-H str. + 2 x C-C str.	benzene
1097	2 x C-H str. + 2 x C-C str.	cyclopropane
1143	C-H str. second overtone	aromatic
1152	C-H str. second overtone	CH ₃
1170	C-H str. second overtone	HC=CH
1195	C-H str. second overtone	CH ₃
1215	C-H str. second overtone	CH ₂
1225	C-H str. second overtone	CH
1360	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH ₃
1395	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH ₂
1410	O-H str. first overtone	ROH
1415	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH ₂
1417	2 x C-H str. +2 x C-H def.	aromatic
1420	O-H str. first overtone	ArOH
1430	N-H str. first overtone	CONH ₂
1440	O-H str. first overtone	sucrose, starch
1440	2 x C-H str. +2 x C-H def.	CH
1446	2 x C-H str. +2 x C-H def.	aromatic
1450	O-H str. first overtone	starch, H ₂ O
1460	N-H str. first overtone	CONH ₂
1471	N-H str. first overtone	CONHR
1480	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	glucose
1483	N-H str. first overtone	CONH ₂
1490	N-H str. first overtone	CONHR
1490	N-H str. first overtone (intramol. H-bond)	CONH ₂

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [2]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
1490	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	cellulose
1492	N-H str. first overtone	ArNH ₂
1500	N-H str. first overtone	NH
1510	N-H str. first overtone	protein
1520	O-H str. first overtone	CONH ₂
1520	N-H str. first overtone (intramol. H-bond)	ROH
1528	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	starch
1530	N-H str. first overtone	RNH ₂
1533	C-H str. first overtone	C=H
1540	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	starch
1570	N-H str. first overtone	-CONH-
1580	O-H str. first overtone (intramol. H-bond)	starch, glucose
1620	C-H str. first overtone	=CH ₂
1645	C-H str. first overtone	R-CH-CH $\begin{array}{c} \diagup \\ \text{O} \end{array}$
1660	C-H str. first overtone	<i>cis</i> -RCH=CHR ¹
1685	C-H str. first overtone	aromatic
1695	C-H str. first overtone	CH ₃
1705	C-H str. first overtone	CH ₃
1725	C-H str. first overtone	CH ₂
1740	S-H str. first overtone	-SH
1765	C-H str. first overtone	CH ₂
1780	C-H str. first overtone	cellulose
1820	O-H str. + 2 x C-O str.	cellulose
1900	O-H str. + 2 x C-O str.	starch
1900	C=O str. second overtone	-CO ₂ H
1908	O-H str. first overtone	POH
1920	C=O str. second overtone	CONH

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [2]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
1940	O-H str. +O-H def.	H ₂ O
1950	C=O str. second overtone	-CO ₂ R
1960	N-H sym. str. +amide II	CONH ₂
1980	N-H sym. str. +amide II	protein
2000	2 x O-H def. +C-O def.	starch
2000	N-H sym. str. +amide II	CONH ₂ , CONHR
2030	C+O str. second overtone	CONH ₂
2050	N-H sym. str. +amide II	protein
2050	N-H asym. str. +amide III	CONH ₂
2080	O-H str. +O-H def.	ROH, sucrose,
2100	2 x O-H def. +2 x C-O str.	starch
2110	N-H sym. str. +amide III	CONH ₂ , CONHR
2132	N-H str. +C=O str.	amino acid
2140	=C-H str. + C=C str.	HC=CH
2150	2 x amide I +amide III	CONH ₂
2160	2 x amide I +amide III	CONHR
2180	2 x amide I +amide III	protein
2190	CH ₂ asym. str. +C=O str.	HC=CH
2200	C-H str. +C=O str.	-CHO
2242	N-H str. +NH; def	amino acid
2252	O-H str. +O-H def.	starch
2276	O-H str. + C-C str.	starch
2280	C-H str. + C-H def.	CH ₃
2294	N-H str. +C=O str.	amino acid
2310	C-H str. + C-H def.	CH ₂
2323	C-H str. + C-H def.	CH ₂
2336	C-H str. + C-H def.	Cellulose
2347	CH ₂ sym. str. += CH ₂ def.	HC=CHCH ₂

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ข1 (ต่อ) การสั่นสะเทือนของพันธะเมื่อดูดกลืนคลื่นเนียร์อินฟราเรดที่ความยาวคลื่นต่างๆ [2]

wavelength (nm)	bond vibration	structure
2352	C-H def. second overtone	cellulose
2380	O-H def. second overtone	ROH
2461	C-H str. +C-C str.	starch
2488	C-H str. + C-C str.	starch
2500	C-H str. + C-C str.	starch




เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาคผนวก ค
ผลงานที่ได้รับการเผยแพร่

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



Thitima Phanomsophon and Panmanas Sirisomboon. 2017,
“Precision Test for Monitoring of Acetification Process in Vinegar
Fermented bioreactor using Near-Infrared Spectroscopy” in The 10th TSAE
International Conference (TSAE 2017), impact exhibition & convention
center, Nonthaburi, 7-9 September 2017

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



The image is a poster for the TSAE 2017 conference. At the top, the word "TSAE" is written in large, light blue, serif capital letters, with "2017" in a smaller font below it. The background features a large, stylized gear with a traditional Thai temple design in the center. The Thai text "การประชุมวิชาการ สมาคมวิศวกรรมเกษตรแห่งประเทศไทย ระดับชาติ ครั้งที่ 18 และระดับนานาชาติ ครั้งที่ 10 ประจำปี 2560" is prominently displayed. Below this, the English text "The 18th TSAE National Conference and The 10th TSAE International Conference (TSAE 2017)" is written. Further down, the location "ณ ฮิลล์ เบริงทองซาป กรุงเทพมหานคร" and dates "7-9 กันยายน 2560" are listed. The bottom of the poster features a row of logos, including the TSAE logo, the Thai Engineering Society logo, and various university logos.

TSAE

2017

การประชุมวิชาการ
สมาคมวิศวกรรมเกษตรแห่งประเทศไทย
ระดับชาติ ครั้งที่ 18 และระดับนานาชาติ ครั้งที่ 10
ประจำปี 2560

The 18th TSAE National Conference and
The 10th TSAE International Conference
(TSAE 2017)

ณ ฮิลล์ เบริงทองซาป
กรุงเทพมหานคร
7-9 กันยายน 2560

จัดโดย สถาบันวิศวกรรมเกษตรแห่งประเทศไทย
ร่วมกับ คณะกรรมการเกษตร

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหา และต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



The 10th TSAE International Conference

7-9 September 2017

Available online at www.tsaе.asia/2017conf/

Precision Test for Monitoring of Acetification Process in Vinegar Fermented bioreactor using Near-Infrared Spectroscopy

Thitima Phanomsophon^{1*}, Panmanas Sirisomboon¹

¹Curriculum of Agricultural Engineering, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok 10520, Thailand

*Corresponding author., Tel: +66-91-862-8484, +66-2-329-8000 ext: 5120 E-mail: thitimap.june@gmail.com

Abstract

Near infrared (NIR) spectroscopy is known as a fast and reliable technique to analyse physical and chemical properties of different analyte. The main objective of this paper is to test for the precision of NIR spectrometer by evaluating scanning repeatability and reproducibility for measuring acetic acid (AAi) and ethanol (ETi) on acetification rate (ETA) of rice vinegar and its corresponding reference method using acid-base titration with NaOH and gas chromatography, respectively. Results show that the repeatability and reproducibility of NIR scanning spectrometer is 0.0206 and 0.1346. The repeatability of reference method for AAi and ETi were 0.01 and 0.04, respectively. The maximum co-efficient of determination (R^2_{MAX}) were 0.996 and 0.998, respectively.

Keywords: Acetic acid, Ethanol, Acetification rate, Vinegar, Precision.



The 10th TSAE International Conference

7-9 September 2017

Available online at www.tsaе.asia/2017conf/

Precision Test for Monitoring of Acetification Process in Vinegar Fermented Bioreactor using Near-Infrared Spectroscopy

Thitima Phanomsophon^{1*}, Panmanas Sirisomboon¹

¹Department of Agricultural Engineering, Faculty of Engineering, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok 10520, Thailand

* Corresponding author: , Tel: + 66- 91- 862- 8484, + 6 6 - 2 - 3 2 9 - 8000 ext: 5120 E- mail: thitimajune@gmail.com

Abstract

Near infrared (NIR) spectroscopy is known as a fast and reliable technique to analyse physical and chemical properties of different analyte. The main objective of this paper is to test for the precision of NIR spectrometer by evaluating scanning repeatability and reproducibility for measuring acetic acid (AA) and ethanol (ET) on acetification rate (ETA) of rice vinegar and its corresponding reference method using acid-base titration with NaOH and Ebullionmeter, respectively. Results show that the repeatability and reproducibility of NIR scanning spectrometer is 0.0206 and 0.1346. The repeatability of reference method for AA and ET were 0.01 and 0.04, respectively. The maximum co-efficient of determination (R^2_{MAX}) were 0.996 and 0.998, respectively.

Keywords: Acetic acid, Ethanol, Acetification rate, Vinegar, Precision.

Introduction

Vinegar is a popular seasoning that adds taste in the food. Vinegar is fermented from rice, corn, fruit or sugar. (Pornchaloempong and Rattanapanon, 2014) Fermented sugar becomes alcohol by yeast and fermented alcohol become acetic acid by aerobic bacteria to get acid of sour taste known as Vinegar.

Rice vinegar (Foster, 2016) made by fermenting the sugars in rice first into alcohol, and then into acid. Compared to white distilled vinegar, rice vinegar is less acitic with a delicate, mild, and somewhat sweet flavor. Rice vinegar is ranged in different color, from clear to different shades of white and red; each variety has a slightly different taste. White rice vinegar (Wan, 2016) is slightly yellow in color, with higher acetic acid than other Chinese vinegar, is

less acitic and milder in flavor than Western vinegar. Brown rice vinegar (Han, 2013) is slightly light to dark brown in color. It is made from unpolished brown rice, this version of rice vinegar are supposed to have higher nutrients. Black rice vinegar is deeper in color and flavor, it has somewhat smoky- taste. Vinegar is made from black glutinous rice and other grains like wheat, millet, and sorghum. It is often used in Chinese stir fries, dipping sauces, and as a condiment. Red rice vinegar is made from red yeast rice (fermented rice) and sometimes barley and sorghum, it is sweet and salty. Seasoned rice vinegar is white rice vinegar with added sugar and salt.

Acetic acid (Garcia, 2016), also known as ethanoic acid and methane carboxylic acid, is a colorless liquid that has a strong and distinct pungent and sour smell. It is an organic compound. Each year, a million tons of acetic acid is produced. Acetic acid is used in vinegar in large amount. It is very important chemical that is used in many industrial processes.

Ethanol (Garcia, 2016) is a chemical compound that is present in many things that we use on a daily basis, from perfumes to alcoholic beverages. Ethanol is a simple chemical compound, but it has so several uses. It is used as antiseptics, household cleaning products and even in varnishes.

In the process of fermenting rice vinegar by Acetic Acid Bacteria (AAB) in tank, we measure the impact of concentration of acetic acid (AA) and of Ethanol (ET) on acetification

rate (ETA) everyday. AA is determine by acid-base titration with NaOH using phenolphthalein as indicator and ET is analyze by Ebullionmeter.

Near Infrared (NIR) Spectroscopy is a rapid technique for non destructive testing. The NIR spectroscopy emit radiation on the sample and molecules of sample absorb energy from radiation that cause vibration in overtone and combination mode. The spectra obtained from NIR scanning pre- treated with mathematic methods to erase the unwanted disturbance. The relationship with constituent data by chemical methods or other reference method is developed using Chemometrics.

Robust NIR model can be developed when there is minimal error during the process of scanning and reference method. So, the precision of the instrument is measured by the value of repeatability and reproducibility. Maximum coefficient of determination (R^2_{max}) can indicate whether the model should be further developed or not. We, therefore need to determine repeatability, reproducibility and R^2_{max} of NIR scanning instrument and method used to obtain reference value

Materials and Methods

Materials

Rice vinegar was prepared from sticky rice in the Laboratory of Fermentation Technology, Faculty of Agro- Industry. King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok, Thailand, and used as the raw materials for acetification in the internal Venturi

injector bioreactor (Krusong, Yaiyen and Pornpukdeewatana, 2014). The ET and AA in rice wine were $110 \pm 1.5 \text{ g l}^{-1}$ and $2.5 \pm 0.4 \text{ g l}^{-1}$, respectively, while AA content in the vinegar was $80 \pm 0.8 \text{ g l}^{-1}$. This was standardized by adjusting the ET and AA contents to give a target total solute concentration (TC) such as $35 \pm 1 \text{ g l}^{-1}$ ET and $45 \pm 1 \text{ g l}^{-1}$ AA for a TC of 80 g l^{-1} .

NIR scanning of rice vinegar

FT (Fourier transform) - NIR spectrometer (Bruker Ltd., Germany) was used for scanning. Each sample was transferred into a glass vial of 22.0 mm diameter and 48.0 mm height, as a measurement cell. Covered with a transfection plate made from aluminum which provided an optical path length of 0.1 mm and scanned between wavenumber of $12,500 - 4000 \text{ cm}^{-1}$ (800 - 2500 nm) with a resolution of 16 cm^{-1} . The scanning was completed 32 times per one average spectrum. Before each sample scanning, the gold used as a reference material was scanned for background. All scanning was conducted at air conditioning room temperature ($25.0 \pm 2.0 \text{ }^{\circ}\text{C}$) but sample at $0.0^{\circ} \pm 1.0 \text{ }^{\circ}\text{C}$.

Analytical method

The acidity (% v/v) of the finished product after acetification was determined by acid-base titration with 0.1 mol^{-1} NaOH using phenolphthalein as an indicator. ET was analysed by Ebullionmeter.

Repeatability, Reproducibility and Maximum coefficient of determination

Repeatability of NIR scanning was determined by scanning the same sample 10 times in the same position, then finding standard deviation (SD) value of the absorbance of the scanning. We selected 3 wavelength from overall spectrum and SD of absorbance in each wavelength give the repeatability of scanning instrument. We selected wavenumber at 10309.0 cm^{-1} (970 nm), 6896.6 cm^{-1} (1450 nm) and 5154.6 cm^{-1} (1940 nm) which were the vibration bands of water. Water is important element in vinegar.

Reproducibility of NIR scanning was determined by scanning the same sample 10 times but re-load sample every time. SD of absorption in selected wavelength give reproducibility of the scanning. We selected same wavelengths as for repeatability.

Repeatability of reference method (*Rep*) is for standard measurement. This can be determined by SD value of the maximum difference in repetition of the same sample for all samples.

Maximum coefficient of determination (R^2_{max}) is the highest possible R^2 for the experiment. This is possible when there is no error in NIR spectrometer. There is only error from the reference test. And R^2_{max} calculated by the following formula

$$R^2_{\text{Max}} = \frac{SD_y^2 - Rep^2}{SD_y^2} \quad (1)$$

where SD_y is the standard deviation of the calibration set data.

Results and Discussion

The repeatability and reproducibility of NIR scanning spectrometer is 0.0206 and 0.1346. The repeatability of reference method for AA and ET were 0.01 and 0.04, respectively. The maximum co-efficient of determination (R^2_{MAX}) were 0.996 and 0.998, respectively. The

Table 1 repeatability and reproducibility of scanning and repeatability of reference method and maximum coefficient of determination (R^2_{MAX}) for acetic acid (AA) and of Ethanol (ET)

Scanning		Parameters	Reference	
Repeatability	Reproducibility		Repeatability	R^2_{max}
0.0206	0.1346	AA	0.01	0.996
		ET	0.04	0.998

Conclusions

This research found that with the NIR spectrometer and the reference method have high precision. And it is worth to develop the model for monitoring acetification process in vinegar fermented bioreactor using near-infrared spectroscopy. Therefore, NIR spectroscopy can be used instead of the traditional method if the model is further developed using more samples.

Acknowledgements

The authors thank the Near Infrared Spectroscopy Research Center for Agricultural Product and Food (www.nirsresearch.com) at King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok, Thailand, for the use of

values of Table 1 can be used to determine the precision of the instrument and reference methods. Because repeatability and reproducibility of NIR scanning was low value, that means there is precision in scanning. And the repeatability of reference method was low and R^2_{MAX} was very high, that means that there is precision in reference methods and it is worth for further developing the model.

their instruments. and the Laboratory of Fermentation Technology, Faculty of Agro-Industry. King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang. Bangkok, Thailand, for sample.

References

- Han E. 2013. White, Brown, Black, Red, and Seasoned: All About Rice Vinegar. Available at: <http://www.thekitchn.com/rice-vinegar-ingredient-spotlight-184260>. Accessed on 24 July 2008.
- Healthcarethai. 2015. Vinegar. Available at: <http://www.healthcarethai.com/vinegar>. Accessed on 7 July 2008.
- Foster K.. 2016. What's the Difference Between Rice Wine and Rice Vinegar. Available at:

<http://www.thekitchn.com/whats-the-difference-between-rice-wine-and-rice-vinegar-228343>. Accessed on 24 July 2008.

Krabork. 2015. The Montreal protocol on substances that deplete the ozone layer. Available at: <http://www.krabork.com/2015/04/19>. Accessed on 7 July 2008.

WAN L.. 2016. All About Chinese Rice Vinegar Types and Recipes. Available at: <https://www.thespruce.com/chinese-rice-vinegar-types-and-recipes-4081768>. Accessed on 24 July 2008.

Garcia N. 2016. What is Acetic Acid? - Uses, Structure & Formula. Available at: <http://study.com/academy/lesson/what-is-acetic-acid-uses-structure-formula.html>. Accessed on 24 July 2008.

Garcia N.. 2016. What is Ethanol? - Uses, Structure & Formula. Available at: <http://study.com/academy/lesson/what-is-ethanol-formula-structure-uses.html>. Accessed on 24 July 2008.

Pornchaloempong P. and Rattanapanon N.. 2014. Vinegar. Available at: <http://www.foodnetworksolution.com/wiki/word/1183/vinegar>. Accessed on 7 July 2008.

Krusong W., Yaiyen S. and Pornpukdeewatana S.. 2014. Impact of high initial concentrations of acetic acid and ethanol on acetification rate in an internal Venturi injector bioreactor. Available at: https://www.researchgate.net/publication/269419591_Impact_of_high_initial_concentrations_of_acetic_acid_and_ethanol_on_acetification_rate_in_an_internal_Venturi_injector_bioreactor. Accessed on 7 July 2008.

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-นามสกุล	ฐิติมา พนมโสภณ
สัญชาติ	ไทย
วัน เดือน ปีเกิด	14 กันยายน 2537 ที่จังหวัดมุกดาหาร
ที่อยู่ปัจจุบัน	16/13 หมู่ 8 ต. าบลหนองปลาไหล อ. บางละมุง จังหวัดชลบุรี 20150
โทรศัพท์	091-862-8484
Email	thitimap.june@gmail.com
ประวัติการศึกษา	2559 วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเกษตร (เกียรตินิยมอันดับ 2) สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง 2560 วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ความชำนาญเฉพาะด้าน	เนียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี
ประสบการณ์และผลงานวิจัย	
พ.ศ.2559	โครงการปริญญานิพนธ์ เรื่อง การพัฒนาชุดหยอดข้าวสวยส สำหรับเครื่องผลิตข้าวยัดไส้ป่นปลาทุ (Development of Cooked Rice Dropper for Prototype of E-san Mackerel Paste in Rice Making Machine)
พ.ศ.2560	ส่งผลงานเข้าร่วมการประชุม The 18 th of TSAE Annual Conference and the 10 th of TSAE International Conference: TSAE 2017 เรื่อง Precision Test for Monitoring of Acetification Process in Vinegar Fermented bioreactor using Near-Infrared Spectroscopy