

SỬ DỤNG TRỰC QUAN HÓA QUANG PHỔ PHẢN XẠ TRONG VÙNG ÁNH SÁNG NHÌN THẤY ĐỂ PHÂN BIỆT CHẤT LỎNG

Nguyễn Hoàng Ngân, Ngô Đức Thành

Khoa Khoa học máy tính, Trường Đại học Công nghệ Thông tin, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh.

{ngannh, thanhnd}@uit.edu.vn

TÓM TẮT: Vấn đề phân biệt các chất lỏng có cùng màu sắc nhưng khác nhau về đặc tính và không thể sử dụng các giác quan như thị giác, khứu giác và vị giác là một trong những nhu cầu thực tế đang được đặt ra hiện nay. Thông thường, trong trường hợp này phương pháp hóa học được sử dụng để phân tích thành phần và cấu tạo để xác định loại chất. Tuy nhiên, quy trình thực nghiệm phức tạp, chi phí cao, thông tin thu được đòi hỏi kiến thức chuyên sâu về hóa học để đọc hiểu. Gần đây để xác định, phân biệt và đánh giá chất lượng các loại thực phẩm, các nghiên cứu sử dụng quang phổ phản xạ đều đạt kết quả đáng tin cậy. Vì vậy, trong bài báo này chúng tôi đưa ra phương pháp phân biệt chất lỏng dựa trên trực quan hóa quang phổ phản xạ trong vùng ánh sáng nhìn thấy. Kết quả thực nghiệm trên bộ dữ liệu tự xây dựng gồm 6 loại chất lỏng phổ biến là bia, rượu whisky, nước, giấm, nước rửa chén và sữa chua đã cho thấy sử dụng hình ảnh trực quan hóa của quang phổ phản xạ để dàng phân biệt được các chất lỏng.

Từ khóa: visualization, visible reflectance spectroscopy, liquid identification, fluorescence spectroscopy.

I. GIỚI THIỆU

Hiện nay, dưới sự phát triển của ngành công nghiệp hóa học, có rất nhiều các loại chất lỏng đã xuất hiện trong đời sống hàng ngày, cùng với đó là nhu cầu phân biệt các loại chất lỏng này tăng lên trong các lĩnh vực như kiểm định chất lượng đồ uống, các vụ án hình sự,.... Bên cạnh những loại chất lỏng có thể phân biệt được bằng các giác quan thông thường dựa trên các đặc tính như màu sắc, mùi vị, còn có rất nhiều loại chất lỏng khác nhau về chủng loại nhưng không thể phân biệt bằng cách sử dụng thị giác, khứu giác hay vị giác như các loại chất lỏng độc hại có cùng màu sắc nhưng không thể sử dụng mùi vị. Trong thực tế các trường hợp này được giải quyết bằng cách sử dụng phương pháp hoá học để phân tích thành phần, cấu tạo để xác định từng loại chất lỏng và phân biệt được chúng. Tuy nhiên phương pháp này có quy trình thực nghiệm phức tạp, cần độ tỉ mỉ cao và tốn nhiều chi phí khi thực hiện. Ngoài ra, quá trình đọc hiểu thông tin về thành phần hóa học và xác định các loại chất đòi hỏi rất nhiều các kiến thức chuyên sâu và thường phải thông qua các chuyên gia hóa học trong ngành. Bên cạnh đó đối với trường hợp chỉ phân biệt chất lỏng, việc phân tích chi tiết thành phần và xác định từng chất là không cần thiết. Do đó chúng tôi đưa ra một phương pháp khác dựa trên thông tin vật lý là quang phổ phản xạ trong vùng ánh sáng mà mắt người có thể nhìn thấy được để giải quyết bài toán này. Trong nhiều phương pháp khai thác thông tin vật lý để phân biệt chất lỏng thì những phương pháp sử dụng thông tin về sóng điện từ là hứa hẹn nhất [1]. Ánh sáng cũng là một loại sóng điện từ và tính chất của ánh sáng được thể hiện qua quang phổ phản xạ.

Quang phổ phản xạ trong vùng ánh sáng nhìn thấy (quang phổ phản xạ - visible reflectance spectroscopy) đã được nhiều nhà nghiên cứu sử dụng để xác định, phân biệt và đánh giá chất lượng trên nhiều loại thực phẩm khác nhau. Dựa vào đặc trưng của từng loại thực phẩm, các nghiên cứu này có thể chia thành các nhóm nghiên cứu như sau: Nhóm thịt động vật [2, 3, 4, 5, 6, 7], nhóm trái cây - rau củ [8, 9, 10] và nhóm chất lỏng [11, 12, 13].

Đối với nhóm thịt động vật các nghiên cứu áp dụng quang phổ phản xạ đều thu được kết quả tốt. Các nghiên cứu này tập trung giải quyết các bài toán xác định các loại thịt động vật khác nhau, dự đoán về màu sắc và chất lượng của các loại thịt. Mamani-Linares [2] đã xác định các loại thịt bò, thịt lạc đà và thịt ngựa bằng cách đo lường quang phổ phản xạ kết hợp cùng mô hình Partial least squares regression, kết quả phân loại đạt 95 - 100% với các mẫu thịt bò và thịt lạc đà, với mẫu thịt ngựa không bị phân loại sai nhưng phân loại không chắc chắn, tỉ lệ phân loại đúng và chắc chắn đạt 89 - 95%. Ding [3] sử dụng quang phổ phản xạ để phân biệt các loại thịt gà nướng từ nhiều cửa hàng khác nhau, kết quả phân loại đạt 100%, 92%, 96% và 92% tùy vào loại thịt gà. Liu và các cộng sự [4] đã dự đoán độ pH, màu sắc và các đặc điểm khác của thịt ức gà tại các thời điểm khác nhau và kết quả phân loại đạt 74%. Prieto [5], Liao [6] và Liu [7] đã thực hiện dự đoán màu sắc và chất lượng của thịt heo và thịt bò, kết quả cho thấy sử dụng quang phổ phản xạ dự đoán nhanh chóng chất lượng của các loại thịt.

Đối với nhóm trái cây - rau củ các nghiên cứu tập trung giải quyết bài toán xác định thành phần, dự đoán chất lượng. Một số nghiên cứu đã được thực hiện là dự đoán mùi vị của cam [8], xác định giống nho [9], dự đoán chất lượng bên trong quả cà chua [10]. Các nghiên cứu này đã chứng minh phương pháp quang phổ phản xạ có độ chính xác cao và tốc độ thực thi nhanh.

Đối với nhóm chất lỏng, các nghiên cứu được thực hiện trên hai loại chất lỏng là dầu oliu và sữa. Ping Lin và các cộng sự [11] đã sử dụng quang phổ phản xạ để xác định nguồn gốc xuất xứ của dầu Oliu và đạt kết quả 97% trên dữ liệu thực nghiệm. Với các loại sữa vì các thành phần protein trong sữa có khả năng hấp thụ và phản xạ ánh sáng ở nhiều bước sóng khác nhau, do đó các nghiên cứu tập trung phân tích quang phổ phản xạ, làm cơ sở để định lượng các thành phần protein này, từ đó xác định chất lượng của sữa [12, 13].

Mặc dù có nhiều nghiên cứu ứng dụng quang phổ phản xạ nhưng chưa có nghiên cứu nào áp dụng quang phổ phản xạ để phân biệt các loại chất lỏng. Trong nghiên cứu này, chúng tôi tiến hành nghiên cứu thực nghiệm và đánh giá khả năng ứng dụng quang phổ phản xạ trong phân biệt chất lỏng dựa trên trực quan hoá dữ liệu quang phổ. Với thông tin được trực quan hoá này, các nhà nghiên cứu cũng như các nhà phát triển ứng dụng công nghệ thông tin có thể sử dụng để phát triển các ứng dụng khác nhau.

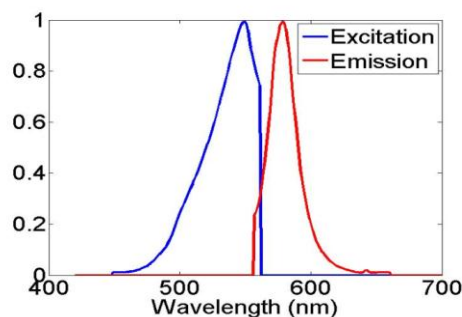
Phương pháp đề xuất gồm có 2 bước: Đo lường quang phổ phản xạ (Phần II.A) và Trực quan hóa quang phổ phản xạ (Phần II.B). Trước tiên, quang phổ phản xạ được đo lường nhiều lần với hiệu điện thế thay đổi để xác định điều kiện thí nghiệm mà dữ liệu thực nghiệm có độ chính xác cao nhất. Sau đó quang phổ phản xạ được trực quan bằng biểu đồ đường. Biểu đồ này là dạng biểu đồ điển hình để thể hiện quang phổ phản xạ của một loại chất.

Đóng góp lớn nhất của bài báo này là những đánh giá thực tế về khả năng ứng dụng của quang phổ phản xạ cho việc phân biệt chất lỏng thông qua việc sử dụng mô phỏng chất lỏng bằng đồ thị quang phổ phản xạ.

II. PHƯƠNG PHÁP

A. MÀU SẮC CỦA CHẤT LỎNG

Theo Zhang và Sato [15], màu sắc của các loại vật chất do hai yếu tố quyết định là huỳnh quang và phản xạ ánh sáng. Huỳnh quang là một hiện tượng quang phát quang, trong đó một loại vật chất hấp thụ ánh sáng ở một bước sóng ngắn (năng lượng cao hơn) thông thường là vùng ánh sáng tử ngoại 200 nm – 380 nm và phát ra ánh sáng ở bước sóng dài hơn (năng lượng thấp hơn) nằm trong vùng ánh sáng nhìn thấy 380 nm – 720 nm. Bước sóng ánh sáng được vật chất hấp thụ gọi là bước sóng kích thích (Excitation – EX), bước sóng ánh sáng vật chất phát ra sau khi hấp thụ năng lượng gọi là bước sóng phát xạ (Emission – EM). Thông tin về huỳnh quang được thể hiện qua hai loại quang phổ là quang phổ kích thích (excitation spectra) và quang phổ phát xạ (emission spectra), ví dụ ở **Hình 1**. Với phản xạ ánh sáng, vật chất sẽ phát ra ánh sáng có bước sóng bằng bước sóng kích thích. Thông tin về phản xạ ánh sáng thể hiện qua quang phổ phản xạ.



Hình 1. Quang phổ kích thích và quang phổ phát xạ của một chất [15]

Màu sắc của chất lỏng cũng được quyết định bởi hai yếu tố trên. Do đó để xác định màu sắc của các loại chất lỏng do huỳnh quang hay phản xạ ánh sáng tạo nên, chúng tôi tiến hành đo đạc thông tin về cả hai yếu tố trên trong vùng ánh sáng nhìn thấy được. Các mẫu chất lỏng được đo bằng máy đo quang phổ huỳnh quang Hitachi F-7000 với giá trị bão hòa về cường độ ánh sáng là 9999.9. Các loại quang phổ được đo với bước sóng thay đổi từ 300 nm tới 700nm, mỗi bước đo bước sóng được tăng lên 10 nm, các bước sóng kích thích và phát xạ được thay đổi đồng thời. Tại các mức điện thế khác nhau, cường độ nguồn sáng sẽ thay đổi, do đó thí nghiệm cần được thực hiện ở nhiều hiệu điện thế nhằm đảm bảo tín hiệu thu được phản ánh tốt nhất quang phổ phản xạ trong vùng ánh sáng nhìn thấy của các mẫu thử. Chúng tôi thực hiện phép đo tại 3 mức điện thế khác nhau là 100 V, 150 V và 180 V cho tất cả các mẫu thử.

B. TRỰC QUAN HÓA DỮ LIỆU QUANG PHỔ PHẢN XẠ

Để trực quan hóa dữ liệu quang phổ chúng tôi sử dụng đại lượng cường độ phản xạ tương đối để đảm bảo rằng giá trị quang phổ này không bị sai khác khi tiến hành nhiều lần đo khác nhau trên cùng một loại máy hay trên nhiều loại máy khác nhau. Cường độ phản xạ tương đối (Relative Reflectance) là tỉ lệ giữa cường độ phản xạ ánh sáng của một chất so với cường độ phản xạ ánh sáng chuẩn (thông thường cường độ phản xạ ánh sáng chuẩn được sử dụng là cường độ phản xạ ánh sáng của một tờ giấy màu trắng). Tại một bước sóng λ bất kỳ, cường độ ánh sáng phản xạ tương đối được tính theo công thức sau:

$$R = 100 * \frac{I}{I_0} \tag{1}$$

Với R là cường độ phản xạ tương đối tại bước sóng λ ;

I là cường độ ánh sáng phản xạ tại bước sóng λ ;

I_0 là cường độ ánh sáng phản xạ chuẩn tại bước sóng λ .

Dữ liệu quang phổ được chúng tôi lưu trữ dưới một ma trận hai chiều và biểu diễn ở dạng bảng trong đó hàng đầu tiên của bảng là các bước sóng kích thích (EX), cột đầu tiên của bảng dữ liệu là các bước sóng phát xạ (EM), các giá trị tại hàng và cột còn lại là các giá trị cường độ ánh sáng. Dữ liệu cường độ ánh sáng phản xạ là các giá trị nằm trên đường chéo của bảng ($EM = EX$). Chúng tôi minh họa cách biểu diễn dữ liệu của mình ở **Bảng 1** và **2**. Ví dụ trong Bảng 1, cường độ ánh sáng phản xạ tại bước sóng 310 nm là 3103 ($EX=EM=310$).

Chúng tôi tiến hành trực quan hóa dữ liệu thu được thông qua hai bước. Đầu tiên chúng tôi loại bỏ nhiễu của dữ liệu quang phổ đo được, sau đó chúng tôi lựa chọn một loại đồ thị thích hợp để biểu diễn dữ liệu quang phổ đo được (thông qua cường độ phản xạ tương đối).

1. Loại bỏ dữ liệu nhiễu

Dữ liệu cường độ ánh sáng huỳnh quang là các giá trị có $EM > EX$. Theo Fujita [18] thì vùng dữ liệu huỳnh quang không bị nhiễu là vùng dữ liệu tại các vị trí thỏa mãn điều kiện $EX \geq EM - 40$ hoặc $2EX \leq EM + 40$. Việc xác định rõ các vị trí mà huỳnh quang đạt giá trị lớn nhất sẽ giải thích được sự ảnh hưởng của huỳnh quang đối với màu sắc của chất lỏng. Trong **Bảng 1**, cường độ ánh sáng huỳnh quang là các giá trị in nghiêng. Ví dụ cường độ ánh sáng huỳnh quang tại bước sóng kích thích và bước sóng phát xạ lần lượt $EM = 300\text{nm}$, $EX = 310\text{nm}$ là 1285.

Từ **Bảng 1** đối với bia có thể nhận thấy cường độ phản xạ ánh sáng mạnh hơn cường độ huỳnh quang. Đây cũng là đặc điểm chung của các loại mẫu thử chất lỏng trong thí nghiệm này.

Dữ liệu quang phổ phản xạ trong vùng bước sóng 300nm – 400 nm có giá trị như nhau đối với tất cả mẫu thử, nguyên nhân do đây là vùng bước sóng gần vùng ánh sáng tử ngoại, năng lượng cao, các mẫu chất lỏng hấp thụ ánh sáng và phát huỳnh quang.

Bảng 1. Dữ liệu quang phổ của bia

EX \ EM	300	310	320	330	340	350
300	2798	2495	720.7	16.01	1.028	0.755
310	1285	3103	2929	832.6	19.43	1.136
320	144.6	1350	3593	3313	993.4	24.12
330	11.67	147.2	1498	3930	3721	1136
340	7.388	12.53	157	1548	4219	4048
350	7.868	8.028	12.5	155.7	1626	4472

Bảng 2. Dữ liệu quang phổ của rượu whisky

EX \ EM	300	310	320	330	340	350
300	2439	2196	639.7	14.24	0.899	0.669
310	1112	2692	2548	726.6	17.38	0.991
320	123.4	1143	3101	2854	866.7	21.7
330	10.07	119.7	1269	3320	3215	997.8
340	6.441	11.16	127.1	1295	3608	3547
350	6.826	7.711	11.13	122.8	1366	3887

Nhìn vào dữ liệu quang phổ bia và rượu whisky ở **Bảng 1** và **2** rất khó để phân biệt 2 loại chất lỏng này, do đó cần lựa chọn phương pháp trực quan hoá thích hợp để thể hiện dữ liệu trên.

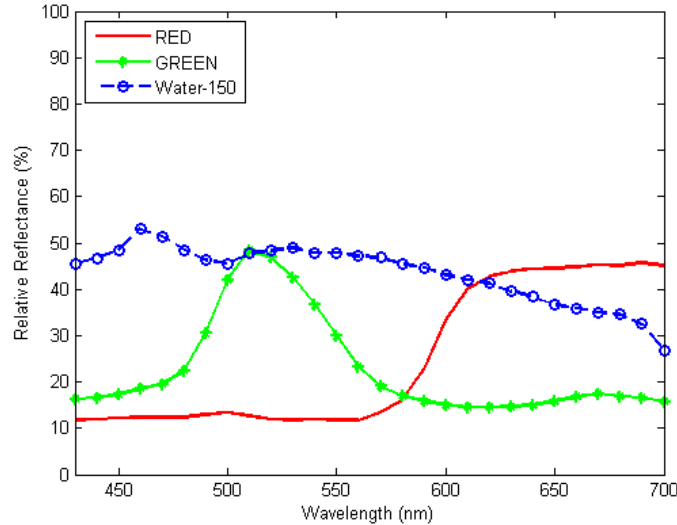
2. Đồ thị biểu diễn dữ liệu quang phổ phản xạ

Dữ liệu quang phổ phản xạ là loại dữ liệu định lượng. Theo Cleveland [19], đối với loại dữ liệu định lượng, độ chính xác của nhận thức với một hình ảnh trực quan hóa sẽ giảm dần theo các yếu tố biểu thị vị trí, độ lớn, góc, màu sắc. Do đó chúng tôi lựa chọn biểu đồ đường để thể hiện dữ liệu quang phổ phản xạ. Đây cũng là dạng biểu đồ điển hình được sử dụng trong các nghiên cứu ứng dụng quang phổ phản xạ.

Từ dữ liệu cường độ ánh sáng phản xạ chúng tôi tiến hành xử lý để thu được cường độ ánh sáng phản xạ tương đối, sau đó trực quan hóa thành biểu đồ đường, thể hiện phân bố của cường độ phản xạ tương đối theo bước sóng. Biểu đồ này tuân theo quy tắc của Cleveland, thể hiện được các thông tin về màu sắc của một loại chất theo 2 thông tin là vị trí (giá trị bước sóng) và độ lớn (cường độ tại bước sóng đó).

Nếu hình dạng của biểu đồ là một đường parapol, thì giá trị hoành độ của đỉnh của parapol chính là bước sóng thể hiện màu sắc của loại chất đó. Nếu biểu đồ không có dạng parapol mà đạt cực đại và không đổi thì từ bước sóng bắt đầu đạt cực đại chính là dải màu sắc của chất đó. Trong trường hợp biểu đồ có dạng phân bố đều, giá trị cực đại của cường độ so với các giá trị cường độ còn lại không đáng kể thì loại chất đó có thể không màu hoặc là dạng chất trong suốt.

Xem xét ví dụ tại **Hình 2**, thể hiện quang phổ của nước và 2 tờ giấy sticker màu xanh lá, màu đỏ. Với tờ giấy màu xanh biểu đồ có dạng parapol và đạt giá trị cực đại tại bước sóng 510 nm, đây là bước sóng nằm trong dải màu xanh lá (495 nm – 570 nm). Với tờ giấy màu đỏ, giá trị cường độ bắt đầu đạt cực đại tại bước sóng 630nm và không giảm cho tới bước sóng 700nm, đây là vùng ánh sáng màu đỏ (620 nm - 750 nm). Trong khi đó, đối với nước quang phổ phản xạ có giá trị cường độ tại điểm cực đại so với các điểm khác trên biểu đồ không đáng kể.



Hình 2. Quang phổ của nước và 2 tờ giấy sticker màu xanh lá (green), màu đỏ (red)

III. THỰC NGHIỆM

A. MẪU THỬ CHẤT LỎNG

Hiện nay chưa có bộ dữ liệu chuẩn cho bài toán sử dụng quang phổ phản xạ trong vùng ánh sáng nhìn thấy để phân biệt chất lỏng. Do đó chúng tôi tiến hành xây dựng bộ dữ liệu trên 6 loại chất lỏng phổ biến gồm có: bia, rượu whisky, nước, giấm, nước rửa chén và sữa chua. Các mẫu thử này bảo quản trong glass vials (20 ml) ở nhiệt độ phòng 25 °C - 27 °C.

Sáu loại chất lỏng có thể chia theo nhóm dựa theo màu sắc như **Bảng 3**.

Bảng 3. Thông tin các mẫu thử chất lỏng

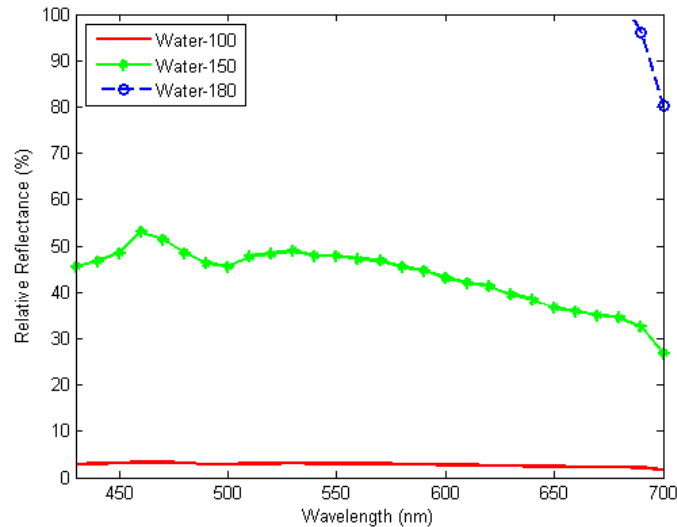
Màu sắc	Các chất lỏng
Không màu	nước, giấm (Mizkan Rice Vinegar)
Vàng trong suốt	bia (Asahi Super Dry), rượu whisky (Scotch whisky)
Cam trong suốt	nước rửa chén (Rocket Dishwashing Liquid – Orange 600ml)
Trắng đục	sữa chua (Morinaga Bifidus Plain Yogurt)

B. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

1. Ảnh hưởng của hiệu điện thế đối với quang phổ phản xạ trong vùng ánh sáng nhìn thấy được

Để xét mức độ ảnh hưởng của hiệu điện thế đối với quang phổ phản xạ, chúng tôi đã thực hiện so sánh về cường độ ánh sáng tại 3 mức hiệu điện thế của cùng một chất lỏng và so sánh về sự khác nhau quang phổ giữa các mẫu chất lỏng ở 3 mức hiệu điện thế.

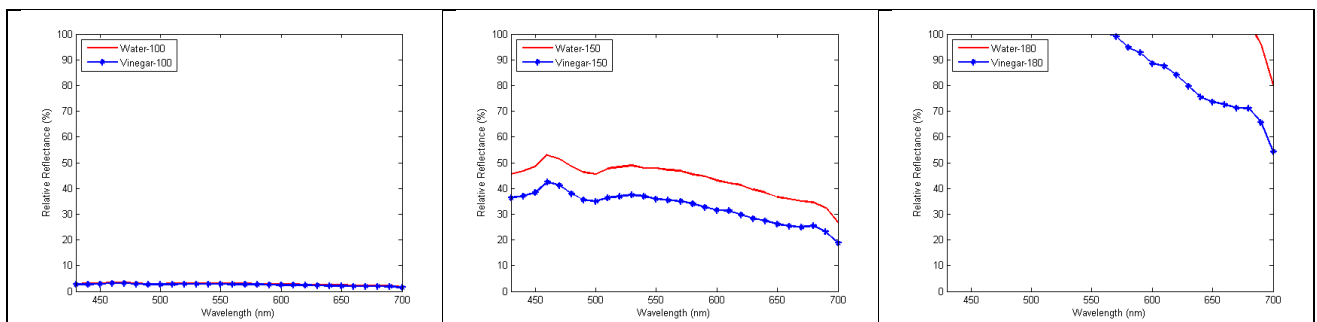
Quang phổ phản xạ của các chất lỏng tỉ lệ thuận với hiệu điện thế, ví dụ điển hình là quang phổ phản xạ của nước tại 3 mức điện thế 100V, 150V và 180V như ở **Hình 3**. Với mức điện thế 180V, cường độ ánh sáng đạt mức bão hòa.



Hình 3. Quang phổ của nước tại các mức điện thế khác nhau.

Tại các hiệu điện thế khác nhau, sự khác nhau về mặt quang phổ của các chất lỏng chịu sự ảnh hưởng của điện thế.

Ví dụ như trường hợp của nước và giấm ở **Hình 4**, ở mức điện thế 100 V khác biệt về quang phổ của 2 chất này rất ít, ngược lại ở mức 180V thì cường độ đạt bão hòa.



Hình 4. Sự khác nhau về quang phổ của nước và giấm ở các hiệu điện thế khác nhau.

Như vậy, để thu được quang phổ thực nghiệm tốt, cần tiến hành thí nghiệm đo ở mức điện thế đảm bảo được về cường độ, cường độ này đủ lớn để thấy được sự khác biệt giữa các chất và không đạt giá trị bão hòa. Sau khi đo lường và so sánh, chúng tôi lựa chọn dữ liệu được đo tại mức điện thế 150 V để thực hiện các bước tiếp theo.

2. Phân biệt các chất lỏng sử dụng trực quan hoá dữ liệu quang phổ phản xạ trong vùng ánh sáng nhìn thấy được

Chúng tôi xem xét hiệu quả của kết quả trực quan hoá trong 2 trường hợp: Phân biệt các chất lỏng khác màu sắc và phân biệt các chất lỏng cùng màu sắc.

Phân biệt các chất lỏng khác màu sắc:

Quang phổ của 4 nhóm chất lỏng khác màu được trực quan hóa tại **Hình 5**.

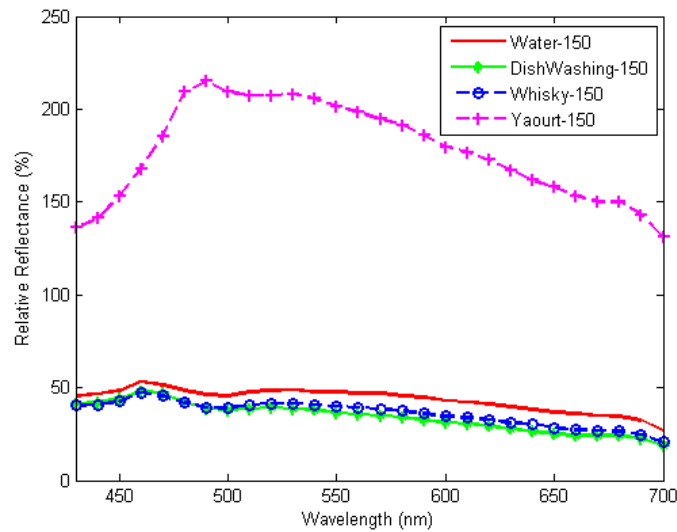
Từ kết quả này có thể thấy được, các chất lỏng có độ trong suốt cao (nước, rượu whisky, nước rửa chén) có cường độ phản xạ ánh sáng thấp hơn so với chất lỏng không trong suốt (sữa chua).

Sự khác biệt về quang phổ của các loại chất lỏng trong suốt đủ lớn để phân biệt các loại chất lỏng này.

Các chất lỏng trong suốt có màu sắc gần giống nhau thì sự khác biệt giữa quang phổ càng nhỏ (nước rửa chén và rượu whisky). Bên cạnh đó, các chất lỏng trong suốt không phản xạ mạnh ở bất kỳ bước sóng nào, do đó ánh sáng có thể đi xuyên qua các chất lỏng này, đây là lí do khiến các chất lỏng này trong suốt.

Đối với sữa chua: Thành phần chính của sữa chua là sữa. Sữa chứa các thành phần như fat globules, casein micelles, whey proteins, lactose, salts. Các chất này không chỉ hấp thụ ánh sáng ở nhiều bước sóng mà còn tán xạ ánh sáng.

Sự đồng nhất hóa về mặt cấu trúc của sữa làm gia tăng sự phân xạ khuếch tán khiến sữa có màu trắng, tương tự sữa chua cũng có màu trắng. Ngoài ra sữa chua có huỳnh quang mạnh, các thành phần trong sữa chua hấp thụ ánh sáng trong vùng ánh sáng tử ngoại (360nm) và phát ra ánh sáng trong vùng ánh sáng nhìn thấy (430nm), chính sự quang phát quang này khiến cho quang phổ phản xạ tương đối của sữa chua hơn 100% [14].

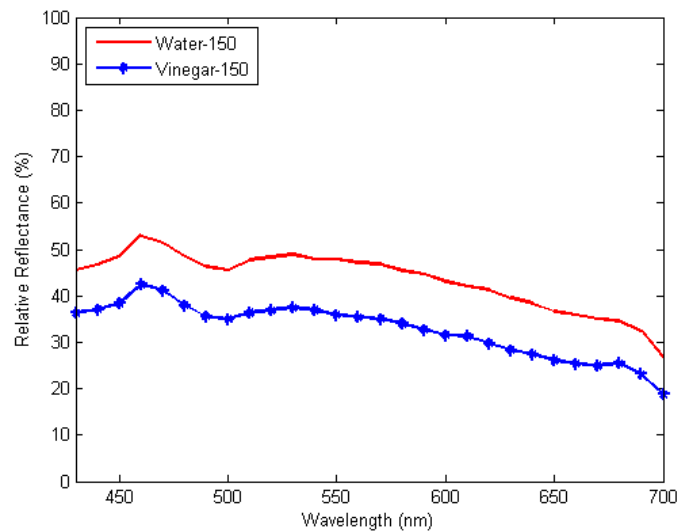


Hình 5. Quang phổ các chất lỏng nước, rượu whisky, nước rửa chén và sữa chua

Phân biệt các loại chất lỏng cùng màu sắc:

Các loại chất lỏng cùng màu sắc có thể phân biệt bằng cách sử dụng quang phổ phản xạ.

Các chất lỏng cùng màu có cùng phân bố quang phổ nhưng có sự khác biệt rõ rệt về độ lớn của cường độ, điều này thể hiện qua trực quan quang phổ của các chất tại các Hình 6, 7.

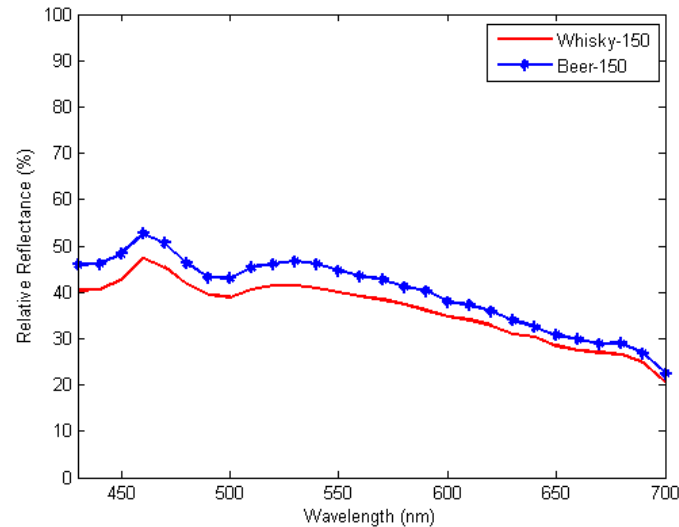


Hình 6. Quang phổ phản xạ của nước và giấm

Ở Hình 6 sự khác biệt về cường độ của nước và giấm rõ rệt, đây là cơ sở để phân biệt hai chất này.

Trong Hình 7, quang phổ phản xạ của bia và rượu whisky có sự khác biệt cường độ ít hơn so với sự khác biệt cường độ giữa nước và giấm. Mặc dù cùng đạt cường độ cực đại tại giá trị bước sóng 460 nm nhưng màu sắc của nhóm bia – rượu whisky khác với nhóm nước – giấm.

Sự khác biệt về màu sắc là do ảnh hưởng của huỳnh quang. Màu sắc của các loại vật chất này là sự tổng hợp của quang phổ phản xạ và quang phổ phát xạ của huỳnh quang. Trong thành phần của bia có các chất phát huỳnh quang, màu sắc của bia do sự phát huỳnh quang này hình thành, điển hình đó là Riboflavin trong bia hấp thụ ánh sáng tại bước sóng 440nm và phát ra ánh sáng tại bước sóng 530nm (màu vàng) [16]. Tương tự trong rượu whisky cũng chứa các chất phát huỳnh quang [17].



Hình 7. Quang phổ phản xạ của bia và rượu whisky

IV. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã tiến hành nghiên cứu thực nghiệm và đánh giá khả năng ứng dụng quang phổ phản xạ để phân biệt các loại chất lỏng thông qua việc trực quan hoá dữ liệu quang phổ. Bên cạnh đó chúng tôi cũng xây dựng bộ dữ liệu về quang phổ phản xạ và quang phổ huỳnh quang cho 6 loại chất lỏng phổ biến là nước, nước rửa chén, bia, rượu whisky, giấm và sữa chua, đây là dữ liệu chưa có nhóm nghiên cứu nào xây dựng và công bố. Hiện tại, chúng tôi đã công bố những dữ liệu về các loại chất lỏng trên cho các nhóm nghiên cứu liên quan¹. Đồng thời chúng tôi đề xuất giải pháp trực quan hoá dữ liệu quang phổ giúp dễ dàng phân biệt các loại chất lỏng. Kết quả cho thấy đối với các loại chất lỏng khác màu sắc cũng như các loại chất lỏng cùng màu sắc đều phân biệt được khi sử dụng hình ảnh đồ thị trực quan của quang phổ phản xạ. Với các chất lỏng khác màu sắc hình dạng của biểu đồ có sự khác nhau rõ rệt. Với các chất lỏng cùng màu sắc và trong suốt, biểu đồ có hình dạng giống nhau nhưng khác biệt về độ lớn của cường độ, sự khác biệt này đủ để phân biệt các chất này. Ngoài ra, các chất lỏng có cùng tính chất trong suốt như bia, rượu Whisky, nước, giấm thì hình dạng biểu đồ tương tự nhau, sự khác nhau về màu sắc là do ảnh hưởng của huỳnh quang. Trong tương lai, chúng tôi sẽ mở rộng hơn với nhiều loại chất lỏng, xây dựng một cơ sở dữ liệu đủ lớn cho các loại chất lỏng phổ biến và đưa ra những tiếp cận tự động để nhận diện nhóm hoặc loại chất lỏng dựa vào quang phổ của chất lỏng.

LỜI CẢM ƠN

Thí nghiệm này được hỗ trợ bởi Giáo sư Imari Sato - Viện Thông tin Quốc gia Nhật Bản. Chúng tôi gửi lời cảm ơn chân thành tới Giáo sư trong việc cung cấp các mẫu thử, các thiết bị thí nghiệm cũng như các kiến thức về quang phổ phản xạ và quang phổ huỳnh quang.

Nghiên cứu này là sản phẩm của đề tài "phân biệt chất lỏng sử dụng trực quan hoá quang phổ phản xạ" mã số D2-2017-01, thuộc Trường Đại học Công nghệ Thông tin - ĐHQG TP.HCM.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] National Research Council. Existing and potential standoff explosives detection techniques. National Academies Press, 2004.
- [2] Mamani-Linares, L. W., C. Gallo, and D. Alomar. "Identification of cattle, llama and horse meat by near infrared reflectance or transmittance spectroscopy.", *Meat science*, vol.90, no.2, pp.378-385, 2012.
- [3] Ding, Haibiao, Ruo-Jun Xu, and Daniel K. O. Chan. "Identification of broiler chicken meat using a visible/near-infrared spectroscopic technique.", *Journal of the Science of Food and Agriculture* vol.79, no.11, pp.1382-1388, 1999.
- [4] Liu, Yongliang, et al. "Prediction of physical, color, and sensory characteristics of broiler breasts by visible/near infrared reflectance spectroscopy.", *Poultry science*, vol.83, no.8, pp.1467-1474, 2004.
- [5] Prieto, Nuria, et al. "On-line application of visible and near infrared reflectance spectroscopy to predict chemical-physical and sensory characteristics of beef quality.", *Meat Science* vol.83, no.1, pp.96-103, 2009.
- [6] Liao, Yi-Tao, Yu-Xia Fan, and Fang Cheng. "On-line prediction of fresh pork quality using visible/near-infrared reflectance spectroscopy.", *Meat Science*, vol.86, no.4, pp.901-907, 2010.

¹ Truy cập theo địa chỉ <https://goo.gl/vdrxXf>

- [7] Liu, Yongliang, et al. "Prediction of color, texture, and sensory characteristics of beef steaks by visible and near infrared reflectance spectroscopy. A feasibility study.", *Meat Science*, vol.65, no.3, pp.1107-1115, 2003.
- [8] Jamshidi, Bahareh, et al. "Reflectance Vis/NIR spectroscopy for nondestructive taste characterization of Valencia oranges.", *Computers and Electronics in Agriculture*, vol.85, pp.64-69, 2012.
- [9] Cao, Fang, Di Wu, and Yong He. "Soluble solids content and pH prediction and varieties discrimination of grapes based on visible–near infrared spectroscopy.", *Computers and Electronics in Agriculture*, vol.71, pp. S15-S18, 2010.
- [10] Flores, Katherine, et al. "Feasibility in NIRS instruments for predicting internal quality in intact tomato.", *Journal of Food Engineering*, vol.91, no.2, pp.311-318, 2009.
- [11] Lin, Ping, Yongming Chen, and Yong He. "Identification of geographical origin of olive oil using visible and near-infrared spectroscopy technique combined with chemometrics.", *Food and Bioprocess Technology*, vol 5, no.1, pp. 235-242, 2012
- [12] Wu, Di, et al. "Study on infrared spectroscopy technique for fast measurement of protein content in milk powder based on LS-SVM.", *Journal of Food Engineering*, vol.84, no.1, pp.124-131, 2008.
- [13] Bogomolov, Andrey, et al. "Quantitative determination of fat and total protein in milk based on visible light scatter.", *Food Chemistry*, vol.134, no.1, pp.412-418, 2012.
- [14] Choudhury, Asim Kumar Roy. *Principles of Colour and Appearance Measurement: Visual Measurement of Colour, Colour Comparison and Management*, Woodhead Publishing, 2014.
- [15] Zhang, Cherry, and Imari Sato. "Separating reflective and fluorescent components of an image.", *Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, IEEE Conference on. IEEE, 2011.
- [16] Sikorska, Ewa, et al. "Monitoring beer during storage by fluorescence spectroscopy.", *Food Chemistry*, vol.96, no.4, pp.632-639, 2006.
- [17] Mignani, Anna Grazia, et al. "Identifying the production region of single-malt Scotch whiskies using optical spectroscopy and pattern recognition techniques.", *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol.171, pp.458-462, 2012.
- [18] Fujita, Kaori, Mizuki Tsuta, Mito Kokawa, and Junichi Sugiyama. "Detection of deoxynivalenol using fluorescence excitation–emission matrix.", *Food and Bioprocess Technology*, vol.3, no. 6, pp. 922-927, 2010.
- [19] Cleveland, William S., and Robert McGill. "Graphical perception: Theory, experimentation, and application to the development of graphical methods.", *Journal of the American statistical association*, vol.79, no.387, pp.531-554, 1984.

A VISIBLE REFLECTANCE SPECTROSCOPY BASED VISUALIZATION TECHNIQUE FOR LIQUID IDENTIFICATION

Nguyen Hoang Ngan, Ngo Duc Thanh

ABSTRACT: *The need for distinguishing similar-looking liquids without tasting and smelling is now rising in many fields such as control quality of beverage, crime analysis, etc. Normally, methods based on chemical composition analysis are used to identify elements of each liquid and then recognize types of each liquid. However, those methods require complex procedures, high cost, and specialists to conduct. Recently, methods based visible reflectance spectroscopy have achieved good results to distinguish divers kinds of foods. In this paper, we propose a method of using visible reflectance spectroscopy to distinguish similar-looking liquids. Our experiments conducted on 6 kinds of liquids including beer, whiskey alcohol, pure water, vinegar, dishwashing, and yogurt have shown the effectiveness of recognizing similar looking liquids.*