



การตรวจวัดสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีร่วมกับการผสมผสานข้อมูล

โดย

นายกันตพงศ์ สุจริตพงษ์พันธ์



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผน ก แบบ ก 1

ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า

มหาวิทยาลัยศิลปากร

ปีการศึกษา 2567

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยศิลปากร

การตรวจวัดสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีร่วมกับการผสมผสานข้อมูล



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผน ก แบบ ก 1

ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า

มหาวิทยาลัยศิลปากร

ปีการศึกษา 2567

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยศิลปากร

DETERMINATION OF IMPORTANT SUBSTANCES IN COFFEE SAMPLES USING
SPECTROSCOPY TECHNIQUES IN COMBINATION WITH DATA FUSION.



A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for Master of Engineering ELECTRICAL AND COMPUTER ENGINEERING
Department of ELECTRICAL ENGINEERING
Academic Year 2024
Copyright of Silpakorn University

หัวข้อ	การตรวจวัดสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี
	ร่วมกับการผสานข้อมูล
โดย	นายกัณฑ์พงศ์ สุจริตพงษ์พันธ์
สาขาวิชา	วิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผนก ก แบบ ก 1
อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ระพีพันธ์ แก้วอ่อน
อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	ดร. รุ่งโรจน์ จินตเมธาสวัสดิ์

คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยศิลปากร ได้รับพิจารณาอนุมัติให้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษา ตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

	คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์และ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. อรุณศรี ลิขิจำเนียร)	เทคโนโลยีอุตสาหกรรม

พิจารณาเห็นชอบโดย

	ประธานกรรมการ
(อาจารย์ ดร. โสภณ ผู้มีจรรยา)	
	อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ระพีพันธ์ แก้วอ่อน)	
	อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม
(ดร. รุ่งโรจน์ จินตเมธาสวัสดิ์)	
	ผู้ทรงคุณวุฒิภายใน
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ภูมิร ศิลาพันธ์)	
	ผู้ทรงคุณวุฒิภายนอก
(ดร. มติ ห่อประทุม)	

650920011 : วิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผน ก แบบ ก 1

คำสำคัญ : กาแฟ รสเปรกโทรสโกปี การประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น การเรียนรู้ของเครื่อง

นาย กันตพงศ์ สุจริตพงษ์พันธ์: การตรวจวัดสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีร่วมกับการผสมผสานข้อมูล อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ระพีพันธ์ แก้วอ่อน

กาแฟเป็นเครื่องดื่มยอดนิยมที่บริโภคมากทั่วโลก โดยสายพันธุ์หลักคือ อราบิก้า และโรบัสต้า ซึ่งมีอัตราส่วนการบริโภค 60-70% และ 30-40% ตามลำดับ และมีความต้องการเพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่อง ซึ่งในปัจจุบันมีการเพาะปลูกกาแฟในพื้นที่มากกว่า 50 ประเทศ ทำให้กาแฟเป็นพืชเศรษฐกิจสำคัญ สำหรับเมล็ดกาแฟเขียวที่เป็นวัตถุดิบที่มีความต้องการสูงนั้น จะมีผลกระทบต่อระบบประสาทของผู้บริโภค โดยจะช่วยเพิ่มความตื่นตัวและลดการง่วงนอน ส่วนกลิ่นและรสชาติของกาแฟก็มีผลต่อการตัดสินใจของผู้บริโภคเช่นกัน โดยคุณลักษณะดังกล่าวขึ้นอยู่กับสายพันธุ์ แหล่งเพาะปลูก และกระบวนการคั่ว ทั้งนี้มีรายงานว่ากาแฟประกอบด้วยสารเคมีมากกว่า 1,000 ชนิด แต่สารสำคัญที่ส่งผลต่อรสชาติและกลิ่น ได้แก่ กรดคลอโรจินิก (Chlorogenic acid) และคาเฟอีน (Caffeine) ซึ่งมีปริมาณแตกต่างกันตามเงื่อนไขการคั่วต่างๆ โดยในปัจจุบันการตรวจวัดสารสำคัญเหล่านี้สามารถทำได้โดยใช้เทคนิคที่มีประสิทธิภาพสูง เช่น Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS) ซึ่งมีข้อจำกัดในเรื่องเวลาวิเคราะห์ที่นาน และค่าใช้จ่ายที่สูง วิทยานิพนธ์นี้จึงมุ่งพัฒนาเทคนิคการวัดที่มีความรวดเร็วและมีต้นทุนต่ำ โดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีซึ่งเป็นเทคนิคการวัดแบบไม่ทำลายที่อาศัยหลักการของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า ณ ความยาวคลื่นต่างๆ ร่วมกับเทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ที่ถูกนำมาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟ เพื่อเพิ่มความแม่นยำและประสิทธิภาพในการประเมินคุณภาพของเครื่องดื่มกาแฟ เทคนิคที่เสนอในวิทยานิพนธ์นี้ช่วยลดต้นทุนและเวลาในการตรวจวัด และยกระดับการวิเคราะห์คุณภาพกาแฟให้มีความแม่นยำและประสิทธิภาพสูงขึ้น

650920011 : Major ELECTRICAL AND COMPUTER ENGINEERING

Keyword : Coffee Spectroscopy Pre-processing Machine learning

MR. Kantapong SUCHARITPONGPAN : Determination of important substances in coffee samples using spectroscopy techniques in combination with data fusion.

Thesis advisor : Professor Rapeepan Keawon, Ph.D.

Coffee is a popular beverage consumed worldwide, with the main varieties being Arabica and Robusta, accounting for approximately 60-70% and 30-40% of global consumption, and their demands have shown to increase continually. Currently, coffee has been grown in over 50 countries, making it an important economic crop. For green coffee beans, whose demand is high, have been known to stimulate consumer's nervous system, which enhance alertness and reduce sleep. The aroma and flavor of coffee also influence consumer choices, where those characteristics depend on factors such as the coffee variety, cultivation location, and roasting process. It has been reported that coffee contains over 1,000 chemical compounds, but the key compounds affecting flavor and aroma are chlorogenic acid and caffeine, with their concentrations varying based on different roasting conditions. Accurate measurement of these compounds typically relies on techniques such as Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS), which have limitations in terms of time and cost. Therefore, this thesis aims to develop a rapid and cost-effective measurement technique using spectroscopy, which is a non-destructive method based on electromagnetic wave interactions at various wavelengths. Machine learning technique has also been applied to analyze coffee spectra, which helps in improving accuracy and efficiency in coffee quality evaluation. The proposed technique helps reduce measurement costs and time, and enhance the precision and effectiveness of coffee quality analysis.

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยความช่วยเหลือและการสนับสนุนจากหลายฝ่าย ผู้วิจัยขอแสดงความขอบคุณอย่างสุดซึ้ง โดยเฉพาะอย่างยิ่งต่อ อาจารย์ ดร.ระพีพันธ์ แก้วอ่อน อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก ที่ได้มอบความรู้ คำแนะนำ และการสนับสนุนในทุกขั้นตอนของการวิจัย อาจารย์ได้มีส่วนสำคัญอย่างยิ่งในการช่วยให้ผู้วิจัยได้พัฒนาทักษะการทำงานและการวิจัยอย่างเป็นระบบ ขอขอบพระคุณ อาจารย์ ดร.โสภณ ผู้มีจรรยา ประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ และ อาจารย์ ดร.ภมร ศิลาพันธ์ กรรมการผู้ทรงคุณวุฒิภายใน รวมถึง ดร.มติ ห่อประทุม กรรมการผู้ทรงคุณวุฒิภายนอก ที่ได้ให้คำแนะนำในระหว่างกระบวนการสอบและการปรับปรุงผลงานวิจัย ซึ่งช่วยให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้มีความสมบูรณ์และตรงตามเป้าหมายของการศึกษา

นอกจากนี้ ขอขอบคุณ ดร.รุ่งโรจน์ จินตเมธาสวัสดิ์ และ ดร.เกียรติวุฒิ ประเสริฐสุข ที่ได้กรุณาให้คำปรึกษาเกี่ยวกับเครื่องมือและการวางแผนการทดลอง ทั้งยังช่วยแก้ไขปัญหาดังกล่าวที่เกิดขึ้นในระหว่างการทำงาน การสนับสนุนและการชี้แนะเหล่านี้เป็นส่วนสำคัญที่ทำให้การวิจัยครั้งนี้เป็นไปอย่างราบรื่น

ขอขอบพระคุณภาคีวิชาชีพวิศวกรรมไฟฟ้า คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยศิลปากร ที่มอบโอกาสและทรัพยากรสำหรับการศึกษาและการวิจัย รวมทั้งขอขอบคุณอาจารย์และเจ้าหน้าที่ทุกท่านที่ให้การสนับสนุนตลอดระยะเวลาของการศึกษา

สุดท้ายนี้ ขอขอบคุณเพื่อนร่วมงานทุกคนในทีมวิจัยเทคโนโลยีเทระเฮิรตซ์ ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (เนคเทค-สวทช.) สำหรับการสนับสนุนทางด้านอุปกรณ์สถานที่ และมิตรภาพดีๆ ซึ่งเป็นแรงบันดาลใจและกำลังใจสำคัญในการทำวิจัยนี้ ขอขอบพระคุณทุกคนที่ไม่ได้กล่าวถึงในที่นี้ ที่ได้มอบความช่วยเหลือและกำลังใจอย่างมากมายตลอดระยะเวลาของการศึกษา

กัณฑ์พงศ์ สุจริตพงษ์พันธ์

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ.....	ช
สารบัญตาราง.....	ฅ
สารบัญรูปภาพ.....	ฐ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย	3
1.3 สมมติฐานของงานวิจัย	3
1.4 ขอบเขตของงานวิจัย.....	4
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	4
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	5
2.1. สารสำคัญในกาแฟ.....	6
2.1.1 กรดคลอโรจีนิค (Chlorogenic acid: CGA).....	6
2.1.2 คาเฟอีน (Caffeine)	9
2.2 การวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี	12
2.2.1 สเปกโทรสโกปีแบบการดูดกลืนแสง (Absorption Spectroscopy)	15
2.2.1.1 เครื่องฟูเรียร์ทรานส์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FTIR)	16
2.2.1.2 เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS).....	21

2.2.2 สเปกโทรสโกปีแบบการกระเจิงแสง (Scattering Spectroscopy).....	25
2.2.2.1 การตรวจวัดสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีแบบการ กระเจิงแสงโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) .	26
2.3. การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี	30
2.3.1 การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดเทคนิคด้วยฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรส โกปี	31
2.3.2 การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์โหมดสเปกโทรสโกปี ...	31
2.3.3 การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี	32
2.4 การประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing).....	33
2.4.1 การปรับฐานของสเปกตรัม (Baseline Removal)	33
2.4.2 การลบรังสีคอสมิก (Cosmic Ray Removal)	35
2.4.3 การกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติ (Outlier Removal)	37
2.4.4 การปรับสัญญาณให้เรียบ (Signal Smoothing).....	38
2.4.5 การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (Normalization)	40
2.5. การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกโทรสโกปีด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning).....	41
2.5.1 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้ การเรียนรู้ของเครื่อง (Qualitative Analysis)	41
2.5.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้ การเรียนรู้ของเครื่อง (Quantitative Analysis).....	43
2.5.2.1 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี โดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ (Supervised Learning)	43
2.5.2.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี โดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ (Unsupervised Learning)	46
2.6 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	48
บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย.....	53

3.1 การทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐาน.....	54
3.1.1 การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐาน	54
3.1.1.1 การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยไม่มีการผสมสารยัดเกาะ	54
3.1.1.2 การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยทำการผสมสารยัดเกาะ	55
3.1.2 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี	56
3.2 การเตรียมตัวอย่างสารประกอบกาแฟที่ต้องการตรวจสอบ (Sample Preparation).....	59
3.2.1 การเตรียมตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณโดยใช้เทคนิค รามานสเปกโทรสโกปี.....	59
3.2.2 การเตรียมตัวอย่างกาแฟจริงสำหรับการวิเคราะห์เชิงคุณภาพโดยใช้เทคนิค รามานสเปกโทรสโกปี	60
3.3 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี	62
3.3.1 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี เพื่อการวิเคราะห์เชิงปริมาณ	62
3.3.2 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงของตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีเพื่อการ วิเคราะห์เชิงคุณภาพ	63
3.4 การประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing).....	63
3.4.1 การปรับฐานของสเปกตรัม (Baseline Removal)	64
3.4.2 การลบรังสีคอสมิก (Cosmic Ray Removal)	64
3.4.3 การปรับสัญญาณให้เรียบ (Signal Smoothing).....	65
3.4.4 การกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (Outlier Removal)	65
3.4.5 การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (Normalization)	65
3.5 การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning).....	67
3.5.1 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การ เรียนรู้ของเครื่อง	67

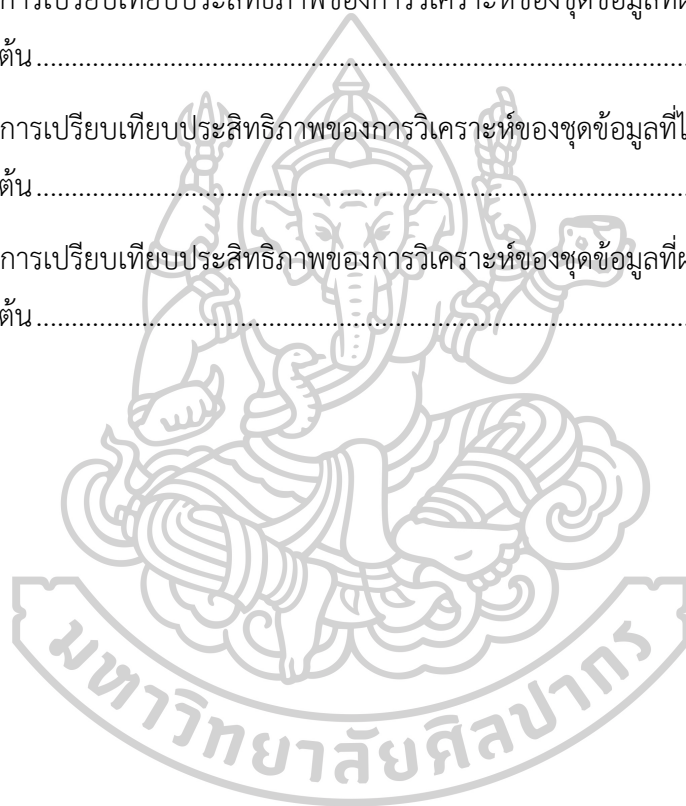
3.5.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟจริงด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning).....	69
บทที่ 4 ผลการทดลองของงานวิจัย.....	72
4.1 การวิเคราะห์ทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี	72
4.1.1. เทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy).....	73
4.1.3 เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy).....	77
4.2 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง.....	79
4.2.1 ผลจากการวัดสัญญาณสเปกตรัมรามาน (Raman Measurements).....	79
4.2.2 ผลการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing).....	81
4.2.3 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Quantitative Analysis of Standard Caffeine Samples using Machine Learning)	87
4.3 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง	91
4.3.1 ผลจากการวัดสัญญาณสเปกตรัมรามาน (Raman Measurements).....	91
4.3.2 ผลการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing).....	93
4.3.3 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟ (Qualitative Analysis of Coffee Samples).....	99
บทที่ 5 สรุปและข้อเสนอแนะ	106
5.1 สรุปผลการวิจัย.....	106
5.2 ข้อเสนอแนะ	107
5.3 แนวทางการพัฒนาต่อยอด.....	108
รายการอ้างอิง	109
ประวัติผู้เขียน	115



สารบัญตาราง

หน้า

ตารางที่ 1 รายชื่อแบบจำลองโมเดลทั้งหมด 18 โมเดลที่ใช้ในการวิเคราะห์เชิงปริมาณ.....	68
ตารางที่ 2 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลก่อนการประมวลผล สัญญาณเบื้องต้น.....	88
ตารางที่ 3 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลที่ผ่านการประมวลผล สัญญาณเบื้องต้น.....	89
ตารางที่ 4 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลที่ไม่ผ่านการประมวลผล สัญญาณเบื้องต้น.....	102
ตารางที่ 5 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลที่ผ่านการประมวลผล สัญญาณเบื้องต้น.....	103



สารบัญรูปภาพ

หน้า

รูปที่ 1 โครงสร้างเปรียบเทียบของกรด 3-O-, 4-O-, และ 5-O-คาเฟอิลควินิก	6
รูปที่ 2 ปริมาณของกรดคลอโรจีนิกที่ลดลงระหว่างกระบวนการคั่ว.....	7
รูปที่ 3 โครงสร้างทางเคมีของคาเฟอีน (1,3,7-ไตรเมทิลแซนทีน)	9
รูปที่ 4 สเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าและการศึกษาลักษณะการเปลี่ยนแปลงในช่วงความยาวคลื่น ต่างๆ	13
รูปที่ 5 เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FT-IR).....	16
รูปที่ 6 สเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้าบริเวณย่านคลื่นอินฟราเรด แบ่งเป็นบริเวณไกล กลาง และใกล้.....	17
รูปที่ 7 range infrared beam จากการวัดทั้งสองย่านนี้ช่วยในการตรวจสอบและระบุคุณลักษณะ สเปกตรัมของสารประกอบภายในกาแฟ.....	18
รูปที่ 8 หลักการทำงานของอินเตอร์ฟีโรมิเตอร์ภายในเครื่อง FT-IR.....	19
รูปที่ 9 หลักการทำงานของเครื่อง FT-IR.....	20
รูปที่ 10 ตำแหน่งสเปกตรัมของการดูดซับ IR ของสารประกอบที่วัดได้จากเครื่อง FT-IR.....	21
รูปที่ 11 เครื่องเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS).....	22
รูปที่ 12 ความสามารถในการวัดเทราเฮิรตซ์.....	23
รูปที่ 13 หลักการทำงานของเครื่องเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (THz-TDS).....	24
รูปที่ 14 เครื่องรามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy).....	26
รูปที่ 15 การกระเจิงแสงแบบสโตค (Stoke Scattering) ในเครื่องรามานสเปกโทรสโกปี	27
รูปที่ 16 หลักการทำงานของเครื่องรามานสเปกโทรสโกปี	28
รูปที่ 17 ตัวอย่างสเปกตรัมที่วัดจากรามานแสดงสารเคมีบางชนิดในแท็บเล็ตที่สงสัยว่าเป็นของปลอม เราระบุสเปกตรัมสีแดงว่าเป็น CaSO_4 โดยค้นหาจากคลังข้อมูลวัสดุอนินทรีย์และแร่ธาตุของเครื่อง Renishaw Raman Spectroscopy	29

รูปที่ 18 ตัวอย่างสเปกตรัมสารยึดเกาะที่ใช้ผสมกับตัวอย่าง (ก) โพลีเอทิลีน (Polyethylene: PE) ในย่านความถี่อินฟราเรดไกล (ข) โพแทสเซียมโบรไมด์ (Potassium Bromide: KBr) ในย่านความถี่อินฟราเรดกลาง	31
รูปที่ 19 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการปรับพื้นฐานที่ไม่เกี่ยวข้องที่ปรากฏอยู่ในสัญญาณสเปกตรัม	33
รูปที่ 20 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการปรับพื้นฐานของสเปกตรัมต่างๆ โดยอาศัยฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์.....	35
รูปที่ 21 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการลบรังสีคอสมิกจะเกิดขึ้นในการวัดด้วยเทคนิครามสเปกโทรสโกปี	36
รูปที่ 22 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติจากการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี.....	38
รูปที่ 23 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการปรับสัญญาณสเปกตรัมให้เรียบโดยใช้ Savitzky-Golay-Filter จากการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี	39
รูปที่ 24 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน	40
รูปที่ 25 การตรวจสอบผลลัพธ์ของการทำนายของแบบจำลองผ่านกราฟ Prediction Plot เพื่อบอกความแม่นยำของแบบจำลองที่ได้	42
รูปที่ 26 การใช้การเรียนรู้ของเครื่องการเรียนรู้โดยมีการกำกับ (Supervise Learning) และการเรียนรู้โดยไม่มีกำกับ (Unsupervised Learning)	43
รูปที่ 27 การวิเคราะห์ผลลัพธ์การทำนายของแบบจำลองผ่านเมทริกซ์ความแปรปรวน (confusion matrix)	45
รูปที่ 28 ตัวอย่างการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักที่สามารถจัดกลุ่มของข้อมูลและลดมิติข้อมูลที่มีความซับซ้อน	47
รูปที่ 29 วิธีการเตรียมตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานวัดโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี	60
รูปที่ 30 การเตรียมตัวอย่างกาแฟจริงวัดโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี.....	62
รูปที่ 31 ตัวอย่างสเปกตรัมที่ผ่านวิธีการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น	64
รูปที่ 32 ภาพรวมการทำงานทั้งหมดของการวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง	68

รูปที่ 33 ภาพรวมการทำงานของเครื่องวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมรามานโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ.....	70
รูปที่ 34 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิค FT-IR ย่านอินฟราเรดกลาง (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมจากตัวอย่างกาแฟจริงเดียวกันในรอบการวัดที่แตกต่างกัน	73
รูปที่ 35 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิค FT-IR ย่านอินฟราเรดไกล (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมกรดคลอโรจีนิกโดยใช้สารมาตรฐาน (ค) ตัวอย่างการวัดสัญญาณซ้ำของตัวอย่างกาแฟจริงจากตัวอย่างเดิมในเวลาที่แตกต่างกัน.....	75
รูปที่ 36 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิค THZ-TDS (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมกรดคลอโรจีนิกโดยใช้สารมาตรฐาน	76
รูปที่ 37 ตัวอย่างการวัดสัญญาณของตัวอย่างกาแฟจริง โดยใช้เทคนิค THZ-TDS	77
รูปที่ 38 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิครามาน (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมกรดคลอโรจีนิกโดยใช้สารมาตรฐาน	77
รูปที่ 39 สัญญาณรามานที่เด่นของสารคาเฟอีนที่สามารถตรวจวัดได้มีลักษณะคล้ายกับงานวิจัยที่ได้มีการศึกษาและตรวจวัดสารคาเฟอีนมาตรฐาน.....	78
รูปที่ 40 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความเข้มข้นแตกต่างกันที่ไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น	80
รูปที่ 41 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมมีรูปแบบและระดับของเส้นฐานที่แตกต่างกัน (ข) สเปกตรัมที่ผ่านกระบวนการปรับระดับของฐานแล้ว	81
รูปที่ 42 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมมีเกิดปรากฏการณ์รังสีคอสมิก (ข) สเปกตรัมที่ทำการลบปรากฏการณ์รังสีคอสมิก	82
รูปที่ 43 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมมีค่าสัญญาณรบกวนที่สูง (ข) สเปกตรัมผ่านกระบวนการปรับสัญญาณให้เรียบ	83
รูปที่ 44 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมที่มีค่าสัญญาณรบกวนสูงกว่าเกณฑ์ (ข) สเปกตรัมที่มีค่าความเข้มสัญญาณปกติ และแสดงจุดยอดของสัญญาณได้ถูกต้อง.....	84
รูปที่ 45 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) ก่อนทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมที่ผ่านกระบวนการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน	85

รูปที่ 46 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานในความเข้มข้นต่างๆ (ก) ก่อนการ ประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (ข) หลังการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น	86
รูปที่ 47 การวิเคราะห์ผลการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐาน เพื่อแสดงภาพรวมความ คลาดเคลื่อนในการทำนายปริมาณความเข้มข้นของสารคาเฟอีนจากสเปกตรัมรามานในชุดข้อมูล ทดสอบ (Testing Set)	90
รูปที่ 48 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) ก่อนการเตรียมตัวอย่างด้วยเทคนิค QuEChERS (ข) หลังการเตรียมตัวอย่างด้วย เทคนิค QuEChERS	92
รูปที่ 49 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการปรับฐานของสเปกตรัม (ข) สเปกตรัมหลังการปรับฐานของ สเปกตรัม	93
รูปที่ 50 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการลบรังสีคอสมิก (ข) สเปกตรัมหลังการลบรังสีคอสมิก	94
รูปที่ 51 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการปรับสัญญาณให้เรียบ (ข) สเปกตรัมหลังการปรับสัญญาณให้เรียบ	95
รูปที่ 52 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (ข) สเปกตรัมที่มีค่าความเข้มสัญญาณปกติ และแสดงจุดยอดของสัญญาณได้ถูกต้อง	96
รูปที่ 53 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมหลังการทำให้ สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน	97
รูปที่ 54 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (ข) สเปกตรัมหลังการประมวลผล สัญญาณเบื้องต้น	98
รูปที่ 55 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS ผ่านการวิเคราะห์โดยใช้การหาองค์ประกอบหลัก (PCA) (ก) สเปกตรัมก่อนการ ประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (ข) สเปกตรัมหลังการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น	100

รูปที่ 56 การวิเคราะห์ผลการทำนายระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้ แบบจำลองของเครื่อง	104
รูปที่ 57 ตำแหน่งคุณลักษณะที่มีความสำคัญ (Feature Importance) ที่ใช้ในการระดับการคั่วของ ตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้แบบจำลองของเครื่องทั้งหมด 5 แบบจำลองที่มี ประสิทธิภาพสูงสุด	105



บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

กาแฟเป็นหนึ่งในเครื่องดื่มที่นิยมบริโภคมากที่สุดในโลกเช่นเดียวกับชา โดยสารพันธุกรรมที่นิยมบริโภคมากที่สุดได้แก่ อาราบิก้าและโรบัสต้า อัตราส่วนการบริโภคกาแฟสายพันธุ์อาราบิก้าและโรบัสต้าคิดเป็นอัตราส่วน 70 และ 30% ตามลำดับ [1] นอกจากนั้นยังมีการเพาะปลูกกาแฟในมากกว่า 50 ประเทศทั่วโลกจากข้อมูลขององค์การกาแฟระหว่างประเทศ (International Coffee Organization; ICO) ซึ่งนับได้ว่าเป็นพืชเศรษฐกิจที่สำคัญของหลายประเทศ ยิ่งไปกว่านั้นเมล็ดกาแฟเขียว (green coffee bean) หรือกาแฟที่ไม่ผ่านกระบวนการคั่วยังมีปริมาณการเพาะปลูกเพิ่มขึ้นทุกปี แสดงให้เห็นถึงแนวโน้มความต้องการบริโภคกาแฟของตลาดที่สูงขึ้น สาเหตุของการบริโภคกาแฟเนื่องจากกาแฟมีการออกฤทธิ์ต่อระบบประสาทส่วนกลาง ที่ส่งผลเชิงบวกต่อผู้บริโภคให้มีการรับรู้สูงขึ้น และใช้ระยะเวลาในการนอนลดลง [2] อย่างไรก็ตาม ปัจจัยหลักที่ผู้บริโภคใช้ในการพิจารณาในการตัดสินใจบริโภคกาแฟ ได้แก่ กลิ่นของกาแฟ และรสชาติ ซึ่งเป็นผลมาจากสายพันธุ์ แหล่งที่มา และกระบวนการคั่วเมล็ดกาแฟ ที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงองค์ประกอบและคุณสมบัติดังกล่าวของกาแฟ เนื่องจากกาแฟประกอบด้วยสารประกอบเคมีมากกว่า 1000 ชนิด อย่างไรก็ตาม สารประกอบเคมีภายในกาแฟมากกว่า 1000 ชนิด คิดเป็นอัตราส่วนปริมาณต่อมวลของกาแฟน้อยมาก [3] มีเพียงสารประกอบเคมีเพียง 2-3 ชนิด ที่มีอัตราส่วนปริมาณสารต่อมวลกาแฟมากกว่าร้อยละ 5 โดยมวลแห้งของกาแฟ [4] ซึ่งถือได้ว่าเป็นสารประกอบหลักของกาแฟ ได้แก่ กรดคลอโรจีนิค (Chlorogenic acid) และคาเฟอีน (Caffeine) ที่ส่งผลต่อรสชาติ และกลิ่นของกาแฟ อย่างไรก็ตาม ปริมาณของสารประกอบทั้ง 2 ชนิด มีปริมาณแปรผันตามสายพันธุ์ แหล่งที่เพาะปลูก อุณหภูมิ และกระบวนการคั่ว ในปัจจุบันการตรวจวัดปริมาณสารสำคัญภายในกาแฟที่มีความแม่นยำ และมีความน่าเชื่อถือ จำเป็นต้องใช้เทคนิคทางเคมีมาตรฐาน [5-8] เช่น Gas Chromatography Mass-Spectrometer (GC-MS) ซึ่งมีความแม่นยำในการตรวจวัดสูงแต่มีข้อจำกัดในเรื่องของระยะเวลาและราคาในการตรวจวัด นอกจากนั้นยังมีการตรวจวัดด้วย Q-grader แต่สามารถเปิด Human Error ที่สูง ดังนั้นจึงจำเป็นต้องพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดปริมาณสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟ ที่มี

ความรวดเร็ว และราคาที่ต่ำกว่าเทคนิคมาตรฐานที่มีอยู่ งานวิจัยนี้ได้มีการใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีซึ่งสามารถลดข้อจำกัดดังกล่าวได้

สเปกโทรสโกปี (Spectroscopy) เป็นเทคนิคการวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลาย (Non-Destructive) โดยอาศัยหลักการคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีลักษณะเป็นแถบพลังงาน โดยการศึกษาปฏิกิริยาระหว่างคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ากับสารตัวอย่างที่ยานความถี่แตกต่างกัน จากความสัมพันธ์ดังกล่าวทำให้ได้ข้อมูลอยู่ในรูปแบบ ที่เรียกว่า สเปกตรัม อย่างไรก็ตาม สารตัวอย่างที่ต่างชนิดกันจะมีรูปแบบของสเปกตรัมที่แตกต่างกัน ทำให้เทคนิคดังกล่าวสามารถได้ข้อมูลโครงสร้างของสารตัวอย่าง ส่งผลให้มีการใช้หลักการดังกล่าวในการวิเคราะห์ทั้งเชิงคุณภาพและปริมาณของสารเคมีและวัสดุอย่างกว้างขวาง [9-11] อย่างไรก็ตาม การใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีมีความสามารถในการวิเคราะห์ที่แตกต่างกัน และยังมีความท้าทายอยู่มากในปัจจุบัน เนื่องจากข้อจำกัดทางด้านการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี และตัวอย่างในการวัด ดังนั้นการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกโทรสโกปีที่มีความแม่นยำต่ำ จึงจำเป็นต้องใช้เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

ในปัจจุบันการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine learning) ได้มีการนำมาประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมการวัดเชิงแสงทั้งการวิเคราะห์เชิงปริมาณ และคุณภาพกันอย่างแพร่หลาย [12-14] อีกทั้งยังสามารถวิเคราะห์ได้ในหลายเทคนิคการวัด ไม่ว่าจะเป็นเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectrometer: FTIR) [15, 16] เทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time-Domain Spectroscopy: THz-TDS) [17] และรามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) [18, 19] โดยการป้อนข้อมูลสเปกตรัมลงในอัลกอริทึมการเรียนรู้ แบบจำลองสามารถสร้างขึ้นเพื่อส่งผลลัพธ์การตัดสินใจจากข้อมูลอินพุตเริ่มต้นโดยอัตโนมัติและรวดเร็ว การเรียนรู้ของเครื่องร่วมกับเทคนิคสเปกโทรสโกปีสามารถใช้ในการวิเคราะห์จัดกลุ่มสายพันธุ์ของกาแฟได้อย่างมีประสิทธิภาพ [20, 21] และวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารประกอบในกาแฟโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปี [22] นอกจากนี้ได้มีการนำการเรียนรู้ของเครื่องประยุกต์ใช้ในการจำแนกประเภทของเครื่องดื่มกาแฟโดยใช้ข้อมูลสเปกตรัม [23, 24] อย่างไรก็ตาม งานวิจัยนี้ได้มีเป้าหมายการพัฒนาเทคนิคที่ใช้ระยะเวลาที่รวดเร็ว มีค่าใช้จ่ายต่อการวัดที่ต่ำกว่าเทคนิคมาตรฐาน และมีความหลากหลายของเทคนิคและความยาวคลื่น ดังนั้นการศึกษาประสิทธิภาพในแต่ละความยาวคลื่นจึงเป็นสิ่งที่สำคัญต่อการตรวจสอบคุณภาพ และนำข้อดีของข้อมูลในแต่ละความยาวคลื่นมาผสานเพื่อให้ได้ข้อมูลที่มีคุณภาพต่อการวิเคราะห์ที่สูงขึ้น เพื่อยกระดับมาตรฐานการตรวจสอบคุณภาพของเศรษฐกิจ

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

1.2.1 เพื่อพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพของกาแฟ โดยการหาปริมาณสารประกอบในกาแฟ ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีในแต่ละความยาวคลื่น

1.2.2 เพื่อวิเคราะห์ประสิทธิภาพเทคนิคสเปกโทรสโกปีในแต่ละความยาวคลื่นโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องร่วมกับการผสมข้อมูล

1.3 สมมติฐานของงานวิจัย

1.3.1 เทคนิคสเปกโทรสโกปีมีแนวโน้มที่จะสามารถตรวจสอบปริมาณของสารประกอบกาแฟได้

1.3.2 การใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีร่วมกับการผสมข้อมูล จะทำให้สามารถตรวจวัดปริมาณสารที่สนใจในตัวอย่างกาแฟได้



1.4 ขอบเขตของงานวิจัย

1.4.1 นำตัวอย่างกาแฟมาตรวจวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีในแต่ละความยาวคลื่น และเตรียมตัวอย่างกาแฟให้อยู่ในรูปแบบสารของแข็ง หรือของเหลว

1.4.2 ใช้เครื่องมือในการวัดสเปกตรัมด้วยเครื่องมือวัดแบบฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในช่วงความถี่ตั้งแต่ 1-3 THz และ 20-140 THz

1.4.3 ใช้เครื่องมือในการวัดสเปกตรัมด้วยเครื่องมือเทราเฮิร์ตซ์ไมโดเมนสเปกโทรสโกปี ในช่วงความถี่ 0.1- 10 THz

1.4.4 ใช้เครื่องมือในการวัดสเปกตรัมด้วยเครื่องมือวัดรามานสเปกโทรสโกปี

1.4.5 ใช้เทคนิคการเตรียมตัวอย่างสารด้วยวิธีการ QuEChERS

1.4.6 วิเคราะห์ผลสเปกตรัมที่ตรวจวัดได้จากเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในแต่ละความถี่ตั้งแต่ 1-3 THz และ 12-140 THz

1.4.7 วิเคราะห์ผลสเปกตรัมที่ตรวจวัดได้จากเครื่องรามานสเปกโทรสโกปี

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1.5.1 สามารถพัฒนาวิธีการตรวจสอบคุณภาพของกาแฟ ให้สามารถเข้าถึงได้ง่าย และใช้ระยะเวลาที่ลดลง

1.5.2 ยกระดับการตรวจวัดคุณภาพของกาแฟในประเทศไทย

บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ผู้วิจัยได้นำเสนอหัวข้อการวิจัยเรื่องการตรวจวัดสารสำคัญในกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี ร่วมกับการผสมผสานข้อมูล ดังนั้นจึงมีความจำเป็นที่ผู้วิจัยต้องทำการศึกษาเกี่ยวข้องกับสารสำคัญในกาแฟ การเตรียมตัวอย่างสำหรับเทคนิคสเปกโทรสโกปีแต่ละเทคนิค เทคนิคสเปกโทรสโกปี รวมถึงการวิเคราะห์ข้อมูล โดยสามารถแบ่งหัวข้อการศึกษาออกเป็น ดังนี้

- 2.1 สารสำคัญในกาแฟ
- 2.2. การวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี
- 2.3. วิธีการเตรียมตัวอย่างสาร (Samples Preparation)
- 2.4 การประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing)
- 2.5. การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

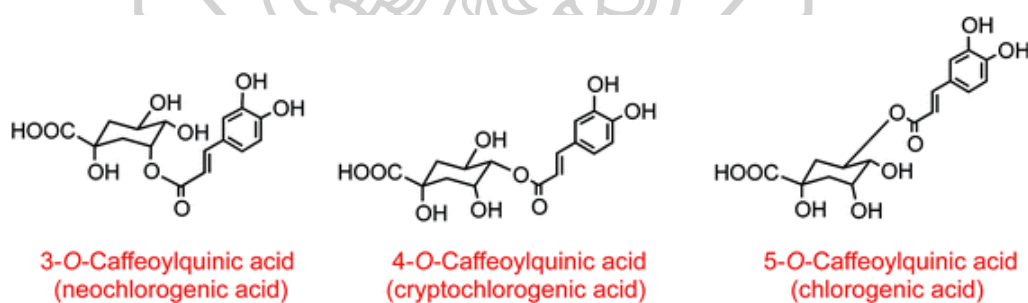


2.1. สารสำคัญในกาแฟ

กาแฟเป็นพืชเศรษฐกิจที่มีความสำคัญอย่างยิ่งในหลายประเทศทั่วโลก โดยที่กาแฟมีส่วนประกอบหลักเป็นสารประกอบเคมีที่มีมากกว่า 1000 ชนิด [3] ซึ่งสารประกอบเหล่านี้มีบทบาทที่สำคัญในการกำหนดลักษณะเฉพาะของกาแฟ ทั้งในด้านของรสชาติ กลิ่น รวมถึงผลกระทบต่อสุขภาพของผู้บริโภค อย่างไรก็ตามสารพันธุ์ของกาแฟ กระบวนการผลิต กระบวนการคั่ว และวิธีหรือขั้นตอนการสกัด ถือเป็นหนึ่งตัวแปรในการกำหนดชนิดและปริมาณของสารประกอบเคมีภายในกาแฟ [25, 26] จึงทำให้ชนิดและปริมาณของสารประกอบมีความต่อการกำหนดคุณภาพของกาแฟ ซึ่งสารประกอบที่สำคัญและมีปริมาณสูงที่สุดภายในกาแฟได้แก่ คาเฟอีน (Caffeine) และกรดคลอโรจีนิก (Chlorogenic acid)

2.1.1 กรดคลอโรจีนิก (Chlorogenic acid: CGA)

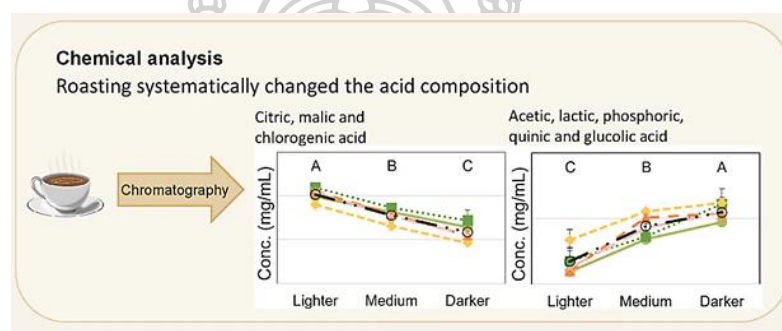
กรดคลอโรจีนิก (Chlorogenic acid: CGA) เป็นสารประกอบในกลุ่มโพลีฟีนอล (Polyphenol) ที่สามารถเกิดขึ้นได้ตามธรรมชาติและพบได้ในพืชหลายชนิด รวมถึงสามารถพบได้ในกาแฟ โดยที่กรดคลอโรจีนิกจัดอยู่ในกลุ่มของสารเอสเทอร์ที่เกิดจากปฏิกิริยาระหว่างกรดคาเฟอิก (Caffeic acid) และกรดควินิก (Quinic acid) ซึ่งสามารถจำแนกได้ออกเป็น 3 ประเภท ได้แก่ 3-O-Caffeoylquinic acid (3-CQA), 4-O-Caffeoylquinic acid (4-CQA), และ 5-O-Caffeoylquinic acid (5-CQA) ซึ่งแต่ละชนิดมีโครงสร้างโมเลกุลเฉพาะที่แตกต่างกัน แสดงดังรูปที่ 1



รูปที่ 1 โครงสร้างเปรียบเทียบของกรด 3-O-, 4-O-, และ 5-O-คาเฟอิลควินิก

ที่มา : <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2014/fo/c4fo00290c>

ซึ่งภายในเมล็ดกาแฟดิบ หรือเมล็ดกาแฟที่ไม่ผ่านกระบวนการคั่ว (Green Bean) มีปริมาณของกรดคลอโรจีนิกคิดเป็นสัดส่วน 6 ถึง 14% โดยมวลแห้งของเมล็ดกาแฟ [27] ซึ่งปริมาณของกรดคลอโรจีนิกจะมีปริมาณลดลงในระหว่างกระบวนการคั่วอย่างมีนัยสำคัญ [28] แสดงดังรูปที่ 2 เนื่องจากกระบวนการคั่วเป็นกระบวนการที่ให้ความร้อนกับกาแฟเป็นระยะเวลาหนึ่ง จึงทำให้กรดคลอโรจีนิกเกิดการสลายตัวและเกิดการแปรสภาพเป็นสารประกอบชนิดอื่น โดยการกำหนดอุณหภูมิและเวลา ซึ่งในระดับอุตสาหกรรมการกำหนดอุณหภูมิและเวลาที่ใช้ในการคั่วมีความแตกต่างกันในแต่ละโรงคั่ว ซึ่งปริมาณของกรดคลอโรจีนิกส่งผลโดยตรงต่อรสชาติความขม และความเป็นกรดของกาแฟ [29] นอกจากนี้กรดคลอโรจีนิกยังส่งผลกระทบต่อสุขภาพที่เป็นประโยชน์ แต่หากร่างกายได้รับกรดคลอโรจีนิกมากเกินไปปริมาณที่ควรได้รับอาจก่อให้เกิดผลข้างเคียงได้



รูปที่ 2 ปริมาณของกรดคลอโรจีนิกที่ลดลงระหว่างกระบวนการคั่ว

ที่มา : <https://normcorecoffee.com.au/blogs/coffee-log/chlorogenic-acids-in-coffee>

ประโยชน์ของกรดคลอโรจีนิกต่อร่างกายมนุษย์

1) คุณสมบัติด้านการต้านอนุมูลอิสระ: กรดคลอโรจีนิกเป็นสารต้านอนุมูลอิสระที่มีศักยภาพสูง ช่วยในการลดการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชัน (Oxidation) ภายในร่างกาย [30] ซึ่งปฏิกิริยาออกซิเดชันเป็นกระบวนการที่ทำให้เซลล์ภายในร่างกายเสื่อมสภาพและการเกิดโรคเรื้อรัง เช่น โรคหัวใจ โรคหลอดเลือด และโรคเมตาบอลิก

2) ลดความเสี่ยงต่อการเป็นโรคเบาหวาน: การบริโภคกรดคลอโรจีนิกสามารถช่วยชะลอการดูดซึมของกลูโคสในระบบทางเดินอาหาร [31] ทำให้สามารถช่วยลดระดับน้ำตาลในเลือดหลังมีการรับประทานอาหาร ส่งผลให้ลดความเสี่ยงต่อการเกิดโรคเบาหวานประเภท 2

3) ช่วยในการควบคุมน้ำหนัก: กรดคลอโรจีนิกมีส่วนช่วยในการกระตุ้นกระบวนการเผาผลาญไขมันและยับยั้งการสะสมของไขมันภายในร่างกาย

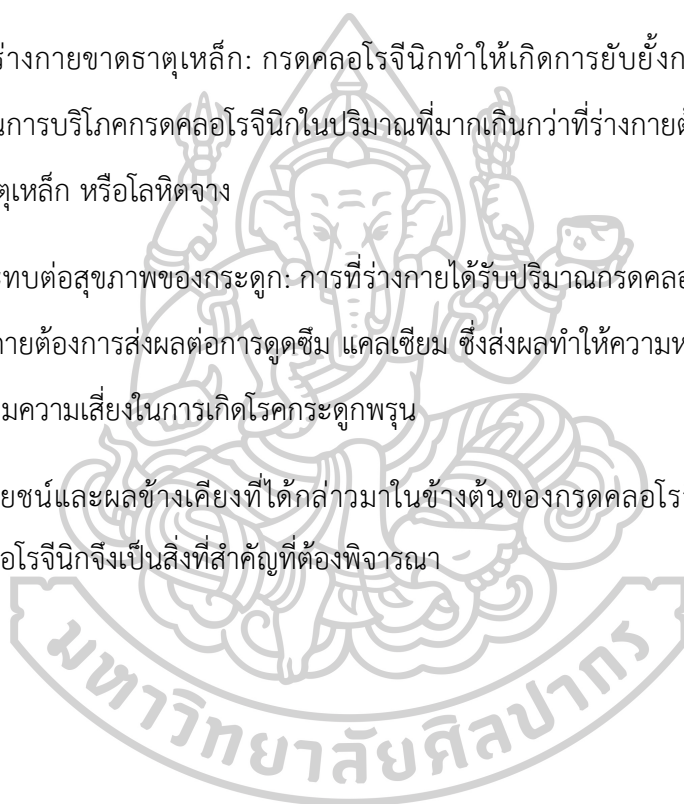
ผลข้างเคียงของกรดคลอโรจีนิกต่อร่างกายมนุษย์

1) ปัญหาทางเดินอาหาร: การที่ร่างกายได้รับปริมาณกรดคลอโรจีนิกมากเกินไปที่ร่างกายต้องการ ส่งผลให้เกิดอาการระคายเคืองต่อระบบทางเดินอาหาร เช่น การมีอาการท้องอืด ท้องเสีย หรือปวดท้องได้

2) การที่ร่างกายขาดธาตุเหล็ก: กรดคลอโรจีนิกทำให้เกิดการยับยั้งการดูดซึมธาตุเหล็กของร่างกาย ดังนั้นการบริโภคกรดคลอโรจีนิกในปริมาณที่มากเกินไปที่ร่างกายต้องการอาจจะก่อให้เกิดสภาวะขาดธาตุเหล็ก หรือโลหิตจาง

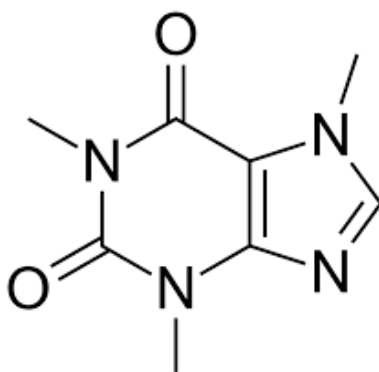
3) ผลกระทบต่อสุขภาพของกระดูก: การที่ร่างกายได้รับปริมาณกรดคลอโรจีนิกในปริมาณที่มากเกินไปที่ร่างกายต้องการส่งผลต่อการดูดซึม แคลเซียม ซึ่งส่งผลทำให้ความหนาแน่นของมวลกระดูกลดลง ทำให้เพิ่มความเสี่ยงในการเกิดโรคกระดูกพรุน

จากประโยชน์และผลข้างเคียงที่ได้กล่าวมาในข้างต้นของกรดคลอโรจีนิก ทำให้ปริมาณการบริโภคกรดคลอโรจีนิกจึงเป็นสิ่งที่สำคัญที่ต้องพิจารณา



2.1.2 คาเฟอีน (Caffeine)

คาเฟอีน (Caffeine) ชื่อทางเคมีว่า 1,3,7-ไตรเมทิลแซนทีน (1,3,7-Trimethylxanthine) โดยเป็นสารกลุ่มแซนทีนที่มีลักษณะเป็นผลึกผงสีขาวลักษณะแหลมรียาวไม่มีกลิ่น แต่มีรสชาติดขมโดยมีโครงสร้าง แสดงดังรูปที่ 3 ซึ่งสามารถพบได้ในพืชหลายชนิด โดยเฉพาะในกาแฟ ชา โกโก้ และเครื่องดื่มให้พลังงานหลายชนิด [32]



รูปที่ 3 โครงสร้างทางเคมีของคาเฟอีน (1,3,7-ไตรเมทิลแซนทีน)

ที่มา: <https://albumz.online/%E0%B8%84%E0%B8%B2%E0%B9%80%E0%B8%9F%E0%B8%AD%E0%B8%B5%E0%B8%99-%E0%B9%82%E0%B8%84-1691291885447916/>

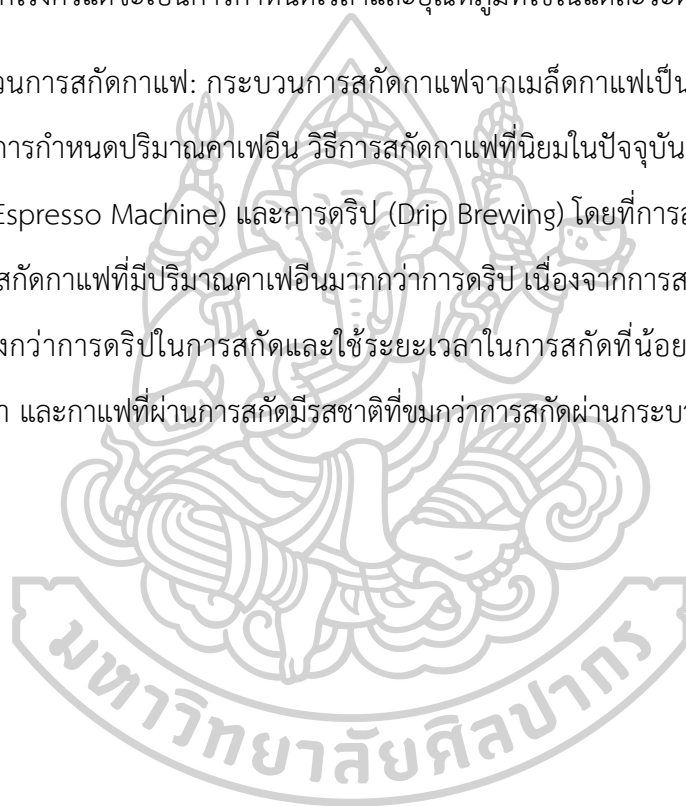
ภายในเมล็ดกาแฟดิบ หรือเมล็ดกาแฟที่ไม่ผ่านกระบวนการคั่ว (Green Bean) มีปริมาณของคาเฟอีนคิดเป็นสัดส่วน 0.6 ถึง 4% โดยมวลแห้งของเมล็ดกาแฟ ซึ่งปริมาณของคาเฟอีนส่งผลต่อรสชาติความขมและความฝาดของกาแฟโดยตรง [33] และถูกกำหนดโดยสายพันธุ์ของกาแฟ กระบวนการคั่ว และวิธีการสกัดกาแฟ สายพันธุ์ของเมล็ดกาแฟ [34]

1) สายพันธุ์ของกาแฟ: ปริมาณคาเฟอีนจะขึ้นอยู่กับสายพันธุ์ของกาแฟ โดยที่กาแฟสายพันธุ์อาราบิก้าและโรบัสต้าที่นิยมปลูกและบริโภคกันมากที่สุดในโลก มีปริมาณคาเฟอีนอยู่ที่ 0.8-1.5% และ 2.0-2.7 % โดยมวลแห้ง [35] แสดงให้เห็นว่ากาแฟสายพันธุ์อาราบิก้ามีปริมาณคาเฟอีนที่ต่ำกว่าสายพันธุ์โรบัสต้า ส่งผลทำให้กาแฟสายพันธุ์โรบัสต้ามีความขมและขมกว่ากาแฟสายพันธุ์อาราบิก้า

2) กระบวนการคั่วของกาแฟ: กระบวนการคั่วของกาแฟมีผลโดยตรงต่อปริมาณคาเฟอีนในกาแฟ ที่ผ่านกระบวนการคั่วในปัจจุบันสามารถแบ่งออกได้เป็น 3 ระดับการคั่วตั้งแต่ 1. ระดับการคั่วอ่อน

(Light Roast) 2. ระดับการคั่วกลาง (Medium Roast) และ 3.ระดับการคั่วเข้ม (Dark Roast) แม้ว่าคาเฟอีนจะเป็นสารที่สามารถทนต่อความร้อนได้และไม่มีการเปลี่ยนแปลงปริมาณในกระบวนการคั่ว แต่กาแฟในระดับการคั่วอ่อนจะมีปริมาณสัดส่วนของคาเฟอีนที่มากกว่ากาแฟในระดับการคั่วเข้ม [36] เนื่องจากกระบวนการคั่วเป็นการให้ความร้อนเป็นระยะเวลาหนึ่ง แต่สารประกอบภายในกาแฟชนิดอื่นเกิดการสลายตัว จึงทำให้อัตราส่วนของปริมาณคาเฟอีนต่อมวลของกาแฟมากขึ้น อย่างไรก็ตาม ในกระบวนการคั่วแต่ละระดับในแต่ละโรงคั่วไม่มีการกำหนดอุณหภูมิและเวลาที่ใช้การคั่วที่เป็นมาตรฐานในทุกโรงคั่วแต่จะเป็นการกำหนดเวลาและอุณหภูมิที่ใช้ในแต่ละระดับการคั่วเองตามโรงคั่ว

3) กระบวนการสกัดกาแฟ: กระบวนการสกัดกาแฟจากเมล็ดกาแฟเป็นเครื่องต้นกาแฟเป็นอีกหนึ่งปัจจัยในการกำหนดปริมาณคาเฟอีน วิธีการสกัดกาแฟที่นิยมในปัจจุบัน เช่นการสกัดผ่านเครื่องเอสเปรสโซ (Espresso Machine) และการดริป (Drip Brewing) โดยที่การสกัดผ่านเครื่องเอสเปรสโซจะสามารถสกัดกาแฟที่มีปริมาณคาเฟอีนมากกว่าการดริป เนื่องจากการสกัดผ่านเครื่องเอสเปรสโซใช้แรงดันที่สูงกว่าการดริปในการสกัดและใช้ระยะเวลาในการสกัดที่น้อยกว่า จึงทำให้มีปริมาณคาเฟอีนสูงกว่า และกาแฟที่ผ่านการสกัดมีรสชาติที่ขมกว่าการสกัดผ่านกระบวนการดริป



ประโยชน์คาเฟอีนต่อร่างกายมนุษย์

1) อาการตื่นตัวและสมาธิ: สารคาเฟอีนส่งผลโดยตรงกับระบบประสาทส่วนกลาง หากร่างกายได้รับคาเฟอีนเข้าสู่ร่างกายจะทำให้ร่างกายมีอาการตื่นตัว เพิ่มสมาธิ และยับยั้งการทำงานของสารอะดีโนซีน (Adenosine) ส่งผลให้เพิ่มกระบวนการเผาผลาญพลังงานภายในร่างกาย

2) ประสิทธิภาพทางกายภาพของร่างกาย: สารคาเฟอีนส่งผลโดยตรงกับระบบประสาทส่วนกลาง หากร่างกายได้รับคาเฟอีนเข้าสู่ร่างกายจะกระตุ้นให้ร่างกายหลั่งสารอะดรีนาลีน (Adrenaline) ส่งผลให้เพิ่มความสามารถในการเผาผลาญพลังงานภายในร่างกาย และเพิ่มความสามารถทางกายภาพของร่างกาย

3) โรคเบาหวานประเภทที่ 2: การที่ร่างกายได้รับคาเฟอีนจะสามารถช่วยลดความเสี่ยงในการเกิดโรคเบาหวานประเภทที่ 2 ได้ เนื่องจากคาเฟอีนมีผลช่วยกระตุ้นการเผาผลาญพลังงาน ควบคุมระดับน้ำตาลกลูโคสภายในเลือด และช่วยลดการดูดซึมน้ำตาลภายในลำไส้

4) ช่วยป้องกันโรคพาร์กินสันและอัลไซเมอร์: การที่ร่างกายได้รับคาเฟอีนสามารถช่วยลดความเสี่ยงในการเกิดโรคพาร์กินสัน (Parkinson's Disease) และโรคอัลไซเมอร์ (Alzheimer's Disease) เนื่องจากคาเฟอีนมีฤทธิ์ในการกระตุ้นสมองและมีส่วนช่วยในการป้องกันการเสื่อมของเซลล์ภายในสมอง

5) คุณสมบัติด้านการต้านอนุมูลอิสระ: คาเฟอีนมีคุณสมบัติในการต้านอนุมูลอิสระ ซึ่งช่วยลดการเกิดความเสียหายของเซลล์ และช่วยลดความเสี่ยงในการเกิดโรคเรื้อรัง เช่น โรคหัวใจและหลอดเลือด รวมถึงมะเร็งบางชนิด

ผลข้างเคียงของคาเฟอีนต่อร่างกาย

1) ปัญหาการนอนหลับ: เนื่องจากการบริโภคคาเฟอีนช่วยในการทำให้ร่างกายตื่นตัว ดังนั้นการบริโภคคาเฟอีนในปริมาณมากเกินไปที่ร่างกายต้องการส่งผลทำให้นอนหลับยาก และทำให้ร่างกายเกิดความเหนื่อยล้า

2) ผลกระทบต่อสุขภาพของกระดูก: การที่ร่างกายได้รับปริมาณคาเฟอีนในปริมาณที่มากเกินไปกว่าที่ร่างกายต้องการส่งผลต่อการดูดซึม แคลเซียม ซึ่งส่งผลทำให้ความหนาแน่นของมวลกระดูกลดลง ทำให้เพิ่มความเสี่ยงในการเกิดโรคกระดูกพรุน

3) อาการเสพติดและการถอนคาเฟอีน: การบริโภคคาเฟอีนอย่างต่อเนื่องส่งผลให้ร่างกายเกิดการเสพติด เมื่อร่างกายไม่ได้รับคาเฟอีนเข้าสู่ร่างกายทำให้เกิดอาการถอนคาเฟอีน โดยมีอาการปวดศีรษะ อ่อนเพลีย อารมณ์แปรปรวน หรืออาจมีอาการซึมเศร้า

จากประโยชน์และผลข้างเคียงของการบริโภคคาเฟอีนและคลอโรจีนิก จึงทำให้ตรวจวัดปริมาณคาเฟอีนมีความสำคัญต่อร่างกายมนุษย์โดยในปัจจุบันแต่ในปัจจุบันการตรวจวัดปริมาณสารสำคัญดังกล่าวจำเป็นต้องใช้เทคนิคทางเคมีมาตรฐาน เช่น Gas Chromatography Mass-Spectrometer (GC-MS) และ High Performance Liquid Chromatography (HPLC) [37] ซึ่งเป็นเทคนิคที่มีความแม่นยำในการตรวจวัดสูงแต่มีข้อจำกัดเรื่องของระยะเวลาและราคาในการตรวจวัด นอกจากนั้นในปัจจุบันยังมี q-grader ซึ่งเป็นผู้ที่ผ่านกระบวนการอบรมและทดสอบจากสถาบัน Coffee quality institute (CQI) แต่อย่างไรก็ตาม q-grader ซึ่งเป็นมนุษย์จึงทำให้สามารถเกิด Human error ที่สูง ดังนั้นจึงจำเป็นในการพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดปริมาณสารสำคัญในกาแฟที่มีความรวดเร็วและมีค่าใช้จ่ายในการตรวจวัดที่ต่ำกว่าเทคนิคมาตรฐาน งานวิจัยนี้จึงได้มีการเลือกใช้การวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

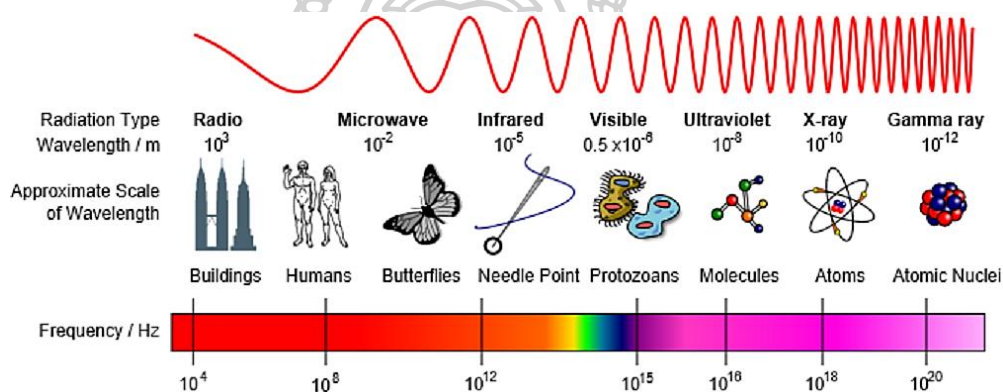
2.2 การวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

สเปกโทรสโกปี (Spectroscopy) เป็นการศึกษาปฏิสัมพันธ์ระหว่างแสงหรือคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ในแต่ละความยาวคลื่นกับสสาร ดังแสดงในรูปที่ 4 โดยมุ่งเน้นไปที่การศึกษาลักษณะการเปลี่ยนแปลงของพลังงานภายในสสารซึ่งมีสาเหตุจากการมีปฏิสัมพันธ์กับแสง หรือคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ประกอบด้วยโฟตอน ซึ่งมีพลังงานที่สามารถทำให้อิเล็กตรอนภายในอะตอมหรือโมเลกุลเกิดการเปลี่ยนแปลงสถานะพลังงาน ภายในสสารอิเล็กตรอนภายในอะตอมจะถูกจัดเรียงให้อยู่ในระดับพลังงานที่แตกต่างกันในแต่ละระดับพลังงาน (Energy Band) และมีช่องว่างของพลังงาน (Energy Band Gap) ซึ่งการเปลี่ยนแปลงพลังงานเหล่านี้เกิดจากสสารถูกกระทบด้วยแสงหรือคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีพลังงานที่เหมาะสม เมื่อสารดูดกลืนโฟตอนที่มีพลังงานมากเพียงพอ อิเล็กตรอนจะถูกกระตุ้นให้ออกจากสถานะพื้น (Ground State) ไปยังสถานะถูกกระตุ้น (Excited State) ซึ่งเป็น

สถานะที่สูงขึ้นจากเดิม อย่างไรก็ตามการเกิดการเปลี่ยนแปลงพลังงานสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 กรณีหลัก ได้แก่

1) การเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานอิเล็กตรอน: คือการที่สสารดูดซับพลังงานจากแสงหรือคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ามากพอที่จะทำให้อิเล็กตรอนข้ามจากระดับชั้นพลังงานที่ต่ำกว่าไปยังระดับชั้นพลังงานที่สูงกว่า

2) การเปลี่ยนแปลงการสั่นและการหมุนของโมเลกุล: คือการที่สสารดูดซับพลังงานจากแสงหรือคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในรูปแบบที่ทำให้เกิดการสั่นหรือการหมุนของพันธะเคมีภายในสสาร นอกจากการที่เปลี่ยนแปลงระดับชั้นพลังงานของอิเล็กตรอน



รูปที่ 4 สเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าและการศึกษาลักษณะการเปลี่ยนแปลงในช่วงความยาวคลื่นต่างๆ

ที่มา : <https://chembam.com/definitions/spectroscopy-vs-spectrometry/>

โดยหลักการของสเปกโทรสโกปีขึ้นอยู่กับช่วงความถี่ของแสงหรือคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในแต่ละความยาวคลื่นที่มีปฏิสัมพันธ์กับสสารในแต่ละรูปแบบ โดยสามารถแบ่งหลักการทำงานของสเปกโทรสโกปีได้ดังนี้

- 1) สเปกโทรสโกปีแบบการดูดกลืนแสง (Absorption Spectroscopy)
- 2) สเปกโทรสโกปีแบบการปล่อยแสง (Emission Spectroscopy)
- 3) สเปกโทรสโกปีแบบการกระเจิงแสง (Scattering Spectroscopy)

อย่างไรก็ตามการใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีเป็นเทคนิคที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้ในหลากหลายสาขาวิชา ยิ่งไปกว่านั้นยังสามารถประยุกต์ใช้ในการศึกษาโครงสร้างคุณสมบัติของสารในระดับพันธะของสาร [38] โดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปี ซึ่งเทคนิคสเปกโทรสโกปีแต่ละย่านความถี่ได้มีการประยุกต์ใช้และให้ข้อมูลจากการวัดที่แตกต่างกันในแต่ละเทคนิค ขึ้นอยู่กับระดับพลังงานของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าและสารที่ทำการตรวจวัด การประยุกต์ใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีแต่ละย่านความถี่ดังนี้

1) สเปกโทรสโกปีในย่านรังสีเอ็กซ์ (X-ray Spectroscopy): สเปกโทรสโกปีย่านรังสีเอ็กซ์ใช้หลักการการเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของอิเล็กตรอน เนื่องจากรังสีเอ็กซ์มีพลังงานสูงมากพอที่จะกระตุ้นให้อิเล็กตรอนภายในสารเปลี่ยนระดับชั้นพลังงานไปยังระดับชั้นพลังงานที่สูงขึ้น และเมื่ออิเล็กตรอนกลับมาสู่ระดับชั้นพลังงานเดิมจะปล่อยพลังงานในรูปของรังสีเอ็กซ์ออกมา ตัวอย่างการประยุกต์คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในย่านรังสีเอ็กซ์ในเทคนิคสเปกโทรสโกปี ตัวอย่างเช่น X-ray Fluorescence (XRF), X-ray Absorption Spectroscopy (XAS), และ X-ray Crystallography

2) สเปกโทรสโกปีย่านอัลตราไวโอเลตและแสงที่ตามนุษย์สามารถมองเห็นได้ (UV-Visible Spectroscopy): สเปกโทรสโกปีย่านอัลตราไวโอเลตและแสงที่ตามนุษย์สามารถมองเห็นได้ใช้หลักการการเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของอิเล็กตรอน ตัวอย่างการประยุกต์คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในย่านอัลตราไวโอเลตและแสงที่ตามนุษย์สามารถมองเห็นได้ในเทคนิคสเปกโทรสโกปี ตัวอย่างเช่น UV-Vis Spectroscopy, และ Biological Applications

3) สเปกโทรสโกปีในย่านความถี่อินฟราเรด (Infrared Spectroscopy: IR): สเปกโทรสโกปีในย่านความถี่อินฟราเรดใช้หลักการการเปลี่ยนแปลงการสั่นและการหมุนของโมเลกุล เนื่องจากรังสีในย่านความถี่อินฟราเรดมีคุณสมบัติในการกระตุ้นการสั่นสะเทือนภายในพันธะเคมีในโมเลกุล โดยที่ความถี่ของการดูดกลืนแสงสามารถระบุคุณลักษณะของพันธะและหมู่ฟังก์ชันในโมเลกุลได้ ตัวอย่างการประยุกต์ใช้สเปกโทรสโกปีในย่านความถี่อินฟราเรด ตัวอย่างเช่น Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR), Gas Analysis, Raman Spectroscopy, และ Pharmaceutical Applications

4) สเปกโทรสโกปีในย่านไมโครเวฟ (Microwave Spectroscopy): สเปกโทรสโกปีในย่านคลื่นไมโครเวฟใช้หลักการการเปลี่ยนการสั่นและการหมุนของโมเลกุล ซึ่งคลื่นไมโครเวฟเป็นคลื่นความถี่ที่มีพลังงานต่ำแต่มีคุณสมบัติในการกระตุ้นการหมุนของโมเลกุลที่มีขนาดเล็ก ตัวอย่างการประยุกต์สเปกโทรสโกปีในย่านความถี่ไมโครเวฟ ตัวอย่างเช่น Rotational Spectroscopy, และ Remote Sensing

5) สเปกโทรสโกปีในย่านคลื่นวิทยุ (Radiofrequency Spectroscopy): สเปกโทรสโกปีในย่านคลื่นวิทยุใช้หลักการการเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของอิเล็กตรอน ซึ่งคลื่นที่มีความถี่วิทยุเป็นคลื่นมีพลังงานต่ำ แต่มีคุณสมบัติในการกระตุ้นนิวเคลียสในสนามแม่เหล็ก โดยนิวเคลียสภายในโมเลกุลจะตอบสนองต่อสนามแม่เหล็กภายนอกในรูปแบบที่เป็นเอกลักษณ์ ตัวอย่างการประยุกต์สเปกโทรสโกปีในย่านคลื่นวิทยุ ตัวอย่างเช่น Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectroscopy และ Medical Resonance Imaging (MRI)

2.2.1 สเปกโทรสโกปีแบบการดูดกลืนแสง (Absorption Spectroscopy)

สเปกโทรสโกปีแบบการดูดกลืนแสง (Absorption Spectroscopy) เป็นเทคนิคการวัดเชิงแสงที่ใช้หลักการการดูดกลืนแสง (Absorption) ซึ่งเป็นกระบวนการที่เกิดขึ้นเมื่อแสงหรือรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าทำกระตุ้นสสารทำให้อิเล็กตรอนภายในสสารโดยการเพิ่มพลังงานศักย์ให้แก่อิเล็กตรอนและทำให้อิเล็กตรอนเกิดการเปลี่ยนแปลงระดับชั้นพลังงานไปยังระดับพลังงานที่สูงขึ้น อย่างไรก็ตามอิเล็กตรอนที่เกิดการเปลี่ยนสถานะไม่มีความเสถียร ทำให้ต้องปรับให้สู่สภาวะสมดุลโดยการพยายามปรับสู่สภาวะพื้น และพลังงานของแสงตรงกับค่าความแตกต่างของการเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของสสารนั้น นอกจากการที่อิเล็กตรอนถูกกระตุ้นให้เกิดการเปลี่ยนแปลงสถานะ ยังทำให้โมเลกุลเกิดการสั่นและการหมุนของโมเลกุลไปในทิศทางที่ต่างกัน ทำให้ได้ผลลัพธ์จากการวัดเป็นสเปกตรัมของการดูดกลืนแสง (Absorption Spectrum) โดยที่สเปกตรัมดังกล่าวจะแสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่างความยาวคลื่นกับการเปลี่ยนแปลงพลังงานภายในอะตอมหรือโมเลกุลของสสาร โดยในงานวิจัยนี้ได้เลือกใช้เทคนิคการวัดโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีแบบการดูดกลืนแสง ดังนี้

2.2.1.1 เครื่องฟูเรียร์ทรานส์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FTIR)

เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FT-IR) เป็นเทคนิคที่ได้รับการพัฒนามาจากเครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบดั้งเดิม แสดงดังรูปที่ 5 FTIR equipment ซึ่งเป็นเทคนิคการวิเคราะห์เชิงแสงที่ใช้ในการศึกษาการดูดกลืนแสง หรือรังสีในช่วงความถี่อินฟราเรดเพื่อให้ได้ข้อมูลเกี่ยวกับโครงสร้างและคุณสมบัติทางเคมีของโมเลกุล ซึ่งเทคนิคดังกล่าวมีความสามารถที่จะตรวจวัดสารตัวอย่างได้อย่างรวดเร็ว และมีความสามารถในการวิเคราะห์สารตัวอย่างโดยใช้ปริมาณสารตัวอย่างน้อยได้อย่างมีประสิทธิภาพ นอกจากนี้ยังสามารถเก็บข้อมูลสเปกตรัมในช่วงความถี่อินฟราเรด



รูปที่ 5 เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FT-IR)

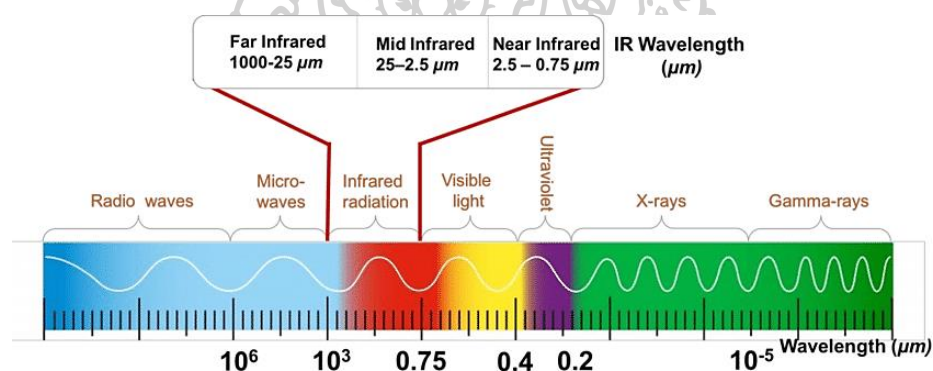
ที่มา : <https://www.bruker.com/en/products-and-solutions/infrared-and-raman/ft-ir-research-spectrometers/vertex-research-ft-ir-spectrometer/vertex-80-80v-ft-ir-spectrometer.html>

คลื่นอินฟราเรด เป็นแสงที่อยู่ระหว่างย่านที่ตามนุษย์สามารถมองเห็นได้ (Visible Region) กับย่านไมโครเวฟ (Microwave Region) ซึ่งเป็นย่านที่มนุษย์ไม่สามารถมองเห็นได้ด้วยตาเปล่า มีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง 700 นาโนเมตร ถึง 1 มิลลิเมตร แสดงดังรูปที่ 6 Wave Region โดยที่คลื่นอินฟราเรดสามารถแบ่งออกได้เป็น 3 ช่วงหลัก ได้แก่ ย่านอินฟราเรดใกล้ (Near Infrared: Near-IR), ย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared: Mid-IR), และย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared: Far-IR) ซึ่งในแต่ละช่วงมีความสามารถในการนำไปประยุกต์ใช้งานที่แตกต่างกันโดยเฉพาะการวิเคราะห์ทางเคมี

ย่านอินฟราเรดใกล้ (Near Infrared: Near-IR): ย่านอินฟราเรดใกล้มีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง $400 - 12800 \text{ cm}^{-1}$ การประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ทางเคมีของย่านคลื่นนี้ มักจะถูกใช้ในการวิเคราะห์ประกอบทางเคมีแบบภาพรวมของตัวอย่าง

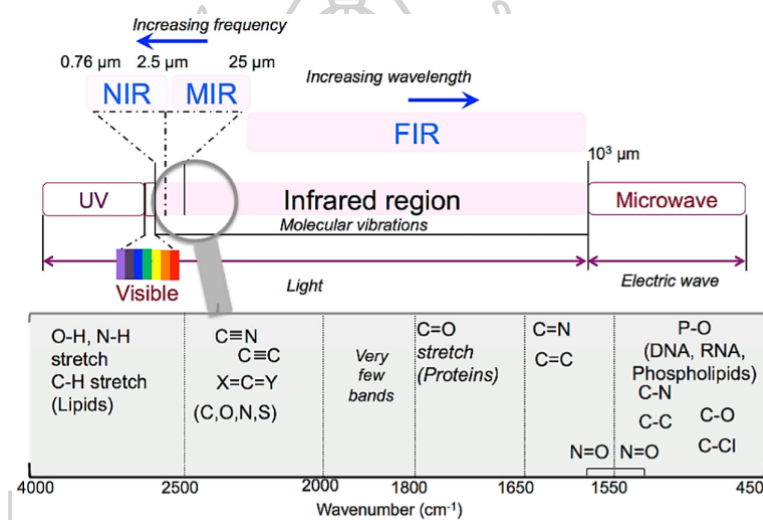
ย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared: Mid-IR): ย่านอินฟราเรดกลางมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง $200 - 4000 \text{ cm}^{-1}$ มีการประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ทางเคมีในการตรวจวัดการสั่นของพันธะเคมีภายในของโมเลกุล โดยในปัจจุบันได้มีการนิยมใช้ในการตรวจวัดความบริสุทธิ์ของสาร

ย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared: Far-IR): ย่านอินฟราเรดไกลมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง $10 - 300 \text{ cm}^{-1}$ มีการประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ทางเคมีในการตรวจวัดการสั่นของพันธะระหว่างโมเลกุล โดยในปัจจุบันได้มีการนิยมใช้ในการตรวจวัดโพลีเมอร์



รูปที่ 6 สเปกตรัมแม่เหล็กไฟฟ้าบริเวณย่านคลื่นอินฟราเรด แบ่งเป็นบริเวณไกล กลาง และใกล้
ที่มา : https://www.researchgate.net/figure/Electromagnetic-spectrum-Showing-IR-divided-into-the-far-mid-and-near-regions-and-their_fig8_333338321

เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีสามารถตรวจวัดสารตัวอย่างได้ถึงสองช่วงความถี่ ได้แก่ 1. ช่วงความถี่อินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Regions: Mid-IR) และ 2. ช่วงความถี่อินฟราเรดไกล (Far Infrared Regions: Far-IR) อย่างไรก็ตามคลื่นรังสีแม่เหล็กในย่านความถี่อินฟราเรดเป็นย่านความถี่ที่สามารถจำแนกและระบุ สารอินทรีย์และสารอนินทรีย์ พันธะภายในและพันธะระหว่างโมเลกุล โดยการวัดในย่านความถี่อินฟราเรดกลางจะเป็นการศึกษาพันธะเคมีภายในโมเลกุล (Intramolecular) และการวัดในย่านความถี่อินฟราเรดไกลจะเป็นการศึกษาพันธะเคมีระหว่างโมเลกุล (Intermolecular) แสดงดังรูปที่ 7 จากการวัดทั้งสองย่านนี้ช่วยในการตรวจสอบและระบุคุณลักษณะสเปกตรัมของสารประกอบภายในกาแฟ



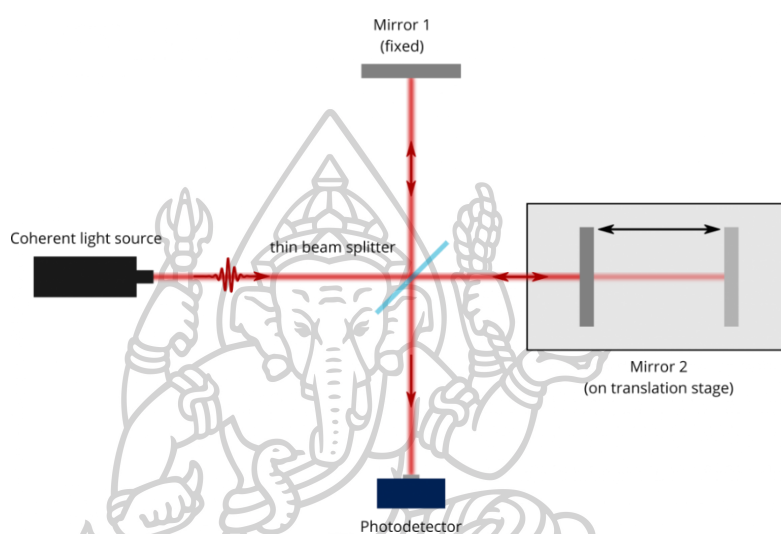
รูปที่ 7 range infrared beam จากการวัดทั้งสองย่านนี้ช่วยในการตรวจสอบและระบุคุณลักษณะสเปกตรัมของสารประกอบภายในกาแฟ

ที่มา : Vibrational Spectroscopy Fingerprinting in Medicine: from Molecular to Clinical Practice (mdpi.com)

องค์ประกอบหลักของเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในการวัดประกอบด้วย 4 อย่าง ดังนี้

1) แหล่งกำเนิดแสงอินฟราเรด (Infrared Light Source): แหล่งกำเนิดแสงอินฟราเรดทำหน้าที่ปล่อยแสงอินฟราเรดไปยังตัวอย่าง โดยแหล่งกำเนิดนี้มักจะเป็นหลอดไฟที่ทำจากซิลิคอนคาร์ไบด์ (Silicon Carbide) เนื่องจากทำให้แสงที่ได้อยู่ในช่วงความถี่อินฟรา

2) อินเตอร์ฟีโรมิเตอร์ (Interferometer): อินเตอร์ฟีโรมิเตอร์เป็นองค์ประกอบหลักของเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีที่ทำหน้าที่ในการแบ่งและรวมแสงอินฟราเรด โดยภายในจะประกอบด้วยกระจกทั้งหมด 2 ชิ้น ได้แก่ กระจกที่สามารถเคลื่อนที่ได้ (Planner Mirrors) และกระจกที่ถูกกำหนดตำแหน่งที่แน่นอน (Fixed Mirror) ซึ่งกระจกทั้งสองจะถูกวางตั้งฉากกัน และวางทำมุม 45 องศา กับอุปกรณ์ในการแยกลำแสง (Beam Splitter) แสดงดังรูปที่ 8 Interferometer

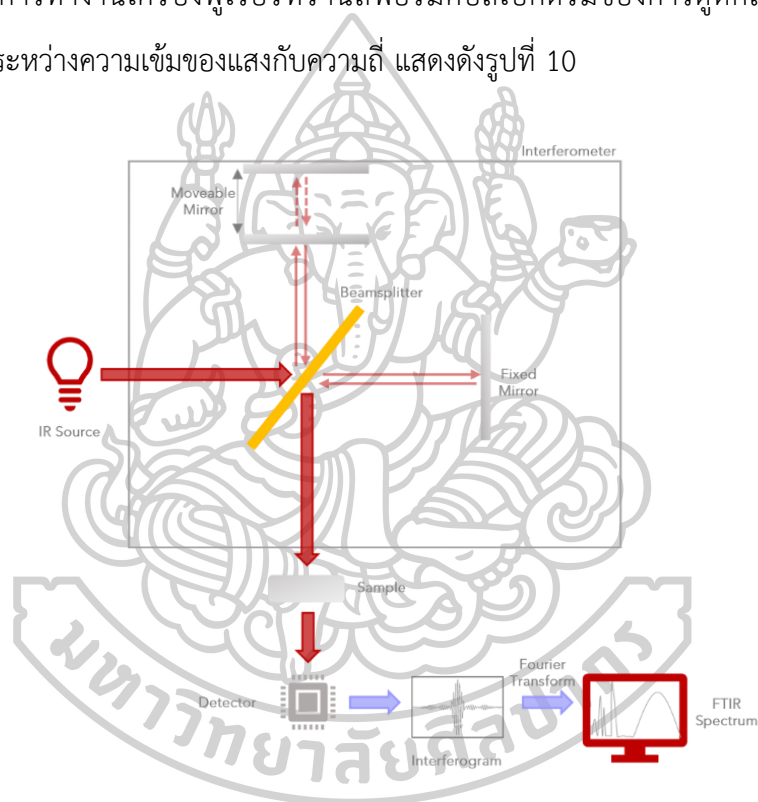


รูปที่ 8 หลักการทำงานของอินเตอร์ฟีโรมิเตอร์ภายในเครื่อง FT-IR

- 3) ตัวอย่าง (Sample): ตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์โดยในงานวิจัยนี้จะเป็นตัวอย่างสารประกอบที่สำคัญภายในกาแฟโดยใช้เป็นลักษณะสารมาตรฐาน
- 4) เครื่องตรวจวัด (Detector): เครื่องตรวจวัดจะรับแสงที่อยู่ในย่านอินฟราเรดที่ส่องผ่านตัวอย่าง ซึ่งทำหน้าที่ในการแปลงแสงเป็นข้อมูลทางไฟฟ้า และข้อมูลทางไฟฟ้าดังกล่าวจะถูกแปลงเป็นสัญญาณสเปกตรัมด้วยทำฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม (Fourier Transform)

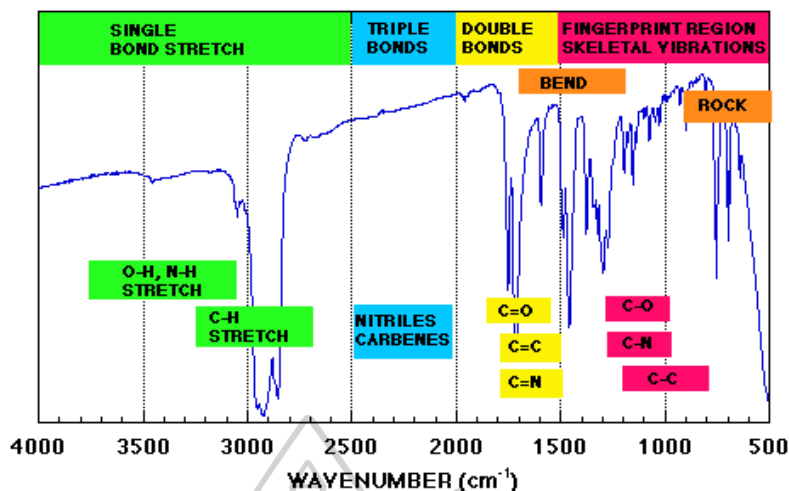
หลักการทำงานของเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี จากรูปที่ 9 เริ่มจากการแหล่งกำเนิดแสงส่องแสงที่ความยาวคลื่นในย่านอินฟราเรดไปยังอินเตอร์ฟีโรมิเตอร์ ในขณะที่แสงส่องไปยังอุปกรณ์อินเตอร์ฟีโรมิเตอร์แสงจะถูกส่งไปยังอุปกรณ์ในการแยกลำแสง (Beam Splitter) จากนั้นแสงจะถูกแบ่งออกเป็น 2 ส่วนเท่ากัน โดยที่ส่วนที่หนึ่งจะสามารถผ่านอุปกรณ์แยกลำแสงไปสู่กระจกที่ถูกกำหนดตำแหน่งคงที่ (Fixed Mirror) และส่วนที่สองจะถูกสะท้อนไปยังกระจกที่สามารถเคลื่อนที่ได้ (Planner Mirror) หลังจากนั้นแสงทั้งสองส่วนจะสะท้อนกระจกทั้งสองกลับมาที่อุปกรณ์

ในการแยกลำแสงโดยในการที่แสงสะท้อนกลับมาแสงทั้งสองส่วนจะมีความถี่ที่แตกต่างกัน เนื่องจากแสงที่สะท้อนมีระยะในการสะท้อนที่แตกต่างจากแผ่นกระจกแผ่นที่สามารถเคลื่อนที่ได้ (Planner Mirror) จึงทำให้เกิดการแทรกสอดของแสงที่แตกต่างตามลักษณะโครงสร้างและองค์ประกอบของโมเลกุลของสารตัวอย่างที่ทำการตรวจวัด และสะท้อนผ่านตัวอย่างเข้าสู่อุปกรณ์ตรวจวัดซึ่งหลังจากที่เครื่องตรวจวัดได้รับแสงที่ส่องผ่านสารตัวอย่าง อุปกรณ์ตรวจวัดจะทำหน้าที่ในการแปลงข้อมูลทางไฟฟ้าดังกล่าว เป็นสัญญาณสเปกตรัมโดยใช้ฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม (Fourier Transform) ผลลัพธ์ที่ได้จากกระบวนการทำงานเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มคือสเปกตรัมของการดูดกลืนแสงที่แสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มของแสงกับความถี่ แสดงดังรูปที่ 10



รูปที่ 9 หลักการทำงานของเครื่อง FT-IR

ที่มา : <https://www.edinst.com/us/blog/what-is-ftir-spectroscopy/>



รูปที่ 10 ตำแหน่งสเปกตรัมของการดูดซับ IR ของสารประกอบที่วัดได้จากเครื่อง FT-IR
ที่มา : <https://photometrics.net/fourier-transform-infrared-ftir-spectroscopy/>

ข้อดีของการตรวจวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

- 1) ไม่ทำลายตัวอย่าง: การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีไม่มีการทำลายตัวอย่างให้เสียหาย
- 2) ข้อมูลละเอียดแม่นยำ: การวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสามารถให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับการสั่นสะเทือนของพันธะภายในโมเลกุลได้อย่างแม่นยำ

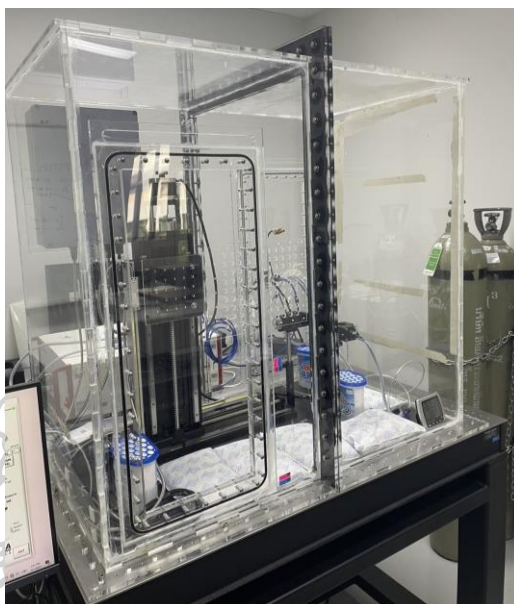
ข้อจำกัดของการตรวจวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

- 1) การซ้อนทับของจุดยอด (Peaks Overlap): การวัดสารที่มีความซับซ้อนของโมเลกุลสารที่ประกอบด้วยสารประกอบจำนวนมาก อาจก่อให้เกิดการซ้อนทับกันของจุดยอดของสัญญาณ
- 2) ความไวต่อสัญญาณรบกวน (Sensitivity): การดูดกลืนของน้ำหรือสารที่มีการเรืองแสง อาจก่อให้เกิดสัญญาณรบกวน

2.2.1.2 เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS)

เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS) แสดงดังรูปที่ 11 เป็นเทคนิคการวิเคราะห์เชิงแสงที่ใช้ในการศึกษาการดูดกลืนแสง หรือ

คลื่นที่มีความยาวคลื่นอยู่ในช่วงเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz: THz) เพื่อให้ได้ข้อมูลพันธะเคมีระหว่างโมเลกุล เช่นเดียวคลื่นความถี่ในช่วงอินฟราเรดไกล (Far Infrared) เครื่องเทราเฮิร์ตซ์

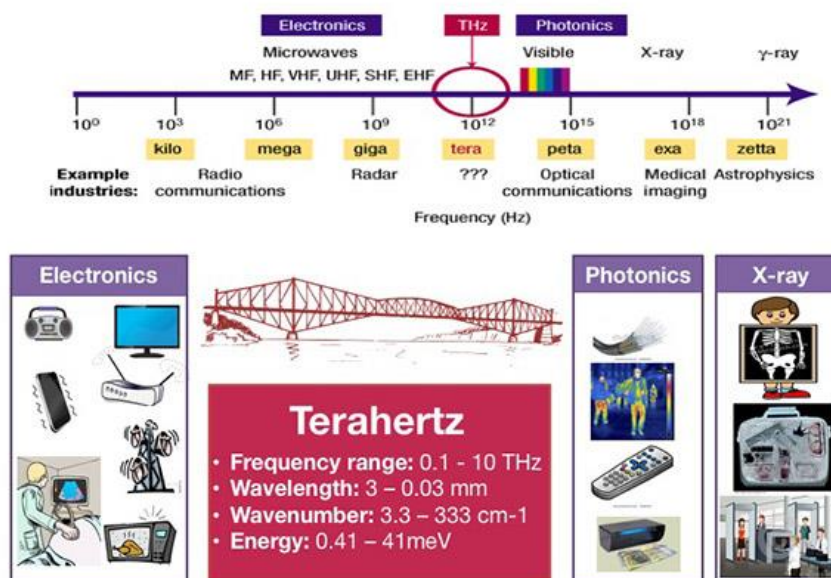


รูปที่ 11 เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS)

คลื่นเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz Waves) คือคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่มีความถี่อยู่ในช่วง 0.1 ถึง 10 เทราเฮิร์ตซ์ มีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง 3.3 ถึง 333 มิลลิเมตร ซึ่งเป็นช่วงความถี่ที่อยู่ระหว่างคลื่นไมโครเวฟและอินฟราเรด และเป็นความถี่ที่ซ้อนทับกับช่วงความถี่ในช่วงของอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region) ดังแสดงรูปที่ 12 โดยคลื่นเทราเฮิร์ตซ์เป็นคลื่นที่คุณสมบัติที่เป็นเอกลักษณ์ ดังนี้

1) ความถี่และพลังงานต่ำ: คลื่นในย่านความถี่เทราเฮิร์ตซ์เป็นคลื่นที่มีพลังงานต่ำรังสีเอ็กซ์เรย์ ทำให้มีความปลอดภัยต่อสิ่งมีชีวิต (non-ionizing) เมื่อทำการเปรียบเทียบกับคลื่นในช่วงความถี่อื่น และเนื่องจากเป็นคลื่นที่มีพลังงานต่ำจึงมีคุณสมบัติในการผ่านวัสดุที่เป็นฉนวนไฟฟ้า (Dielectric Materials) และไม่มีการทำลายวัสดุที่ส่องผ่านให้เกิดความเสียหาย

2) ความสามารถในการระบุพันธะระหว่างโมเลกุล: คลื่นความถี่เทราเฮิร์ตซ์มีคุณสมบัติในการสามารถใช้ในการตรวจวัดการดูดกลืนพลังงานในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์ และระบุการสั่นของพันธะระหว่างโมเลกุล (Intermolecular Vibrations)



รูปที่ 12 ความสามารถในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์

ที่มา : <https://www.nectec.or.th/en/research/ssdrg/ssdrg-trt.html>

องค์ประกอบหลักของการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี ประกอบด้วย

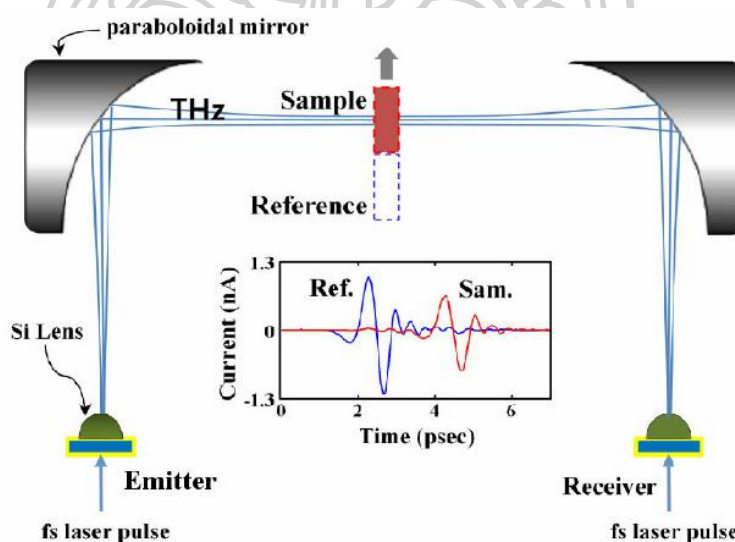
1) แหล่งกำเนิดแสงเลเซอร์ (Laser Source): แหล่งกำเนิดแสงเลเซอร์เป็นส่วนที่สำคัญในการผลิตพัลส์และปล่อยพัลส์ของแสงที่มีความสั้นมากในระดับเฟมโตวินาที (Femtosecond) ซึ่งโดยส่วนใหญ่เป็นเลเซอร์ชนิดไทเทเนียม เพื่อใช้ในการกระตุ้นวัสดุเชิงเส้นหรือสายอากาศโฟโตคอนดักทีฟ (Photoconductive Antenna) สำหรับในการสร้างพัลส์เทราเฮิร์ตซ์

2) อุปกรณ์สร้างพัลส์เทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz Pulse Generation): เป็นอุปกรณ์ที่ใช้ในการแปลงพัลส์แสงที่ปล่อยออกมาจากแหล่งกำเนิดเลเซอร์ให้เป็นพัลส์เทราเฮิร์ตซ์ โดยใช้กระบวนการเชิงแสงที่ไม่เป็นเชิงเส้น (Nonlinear Optical Processes)

3) อุปกรณ์ตรวจจับคลื่นเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz Detector): หลังจากพัลส์แสงถูกแปลงเป็นพัลส์เทราเฮิร์ตซ์จากอุปกรณ์สร้างพัลส์ ส่งผ่านตัวอย่างแล้วอุปกรณ์ตรวจจับคลื่นเทราเฮิร์ตซ์จะทำหน้าที่ในการรับพัลส์ที่ผ่านจากตัวอย่าง โดยอุปกรณ์ดังกล่าวจะทำหน้าที่ในการตรวจจับสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ผ่านกระบวนการ Photoconductive detection และนอกจากนั้นทำการแปลงพัลส์เทราเฮิร์ตซ์เป็นสัญญาณไฟฟ้าที่สามารถนำไปประมวลผลในกระบวนการต่อได้

4) ระบบกำหนดหน่วงเวลา (Delay Line): ระบบกำหนดหน่วงเวลาเป็นระบบที่ควบคุมเวลาของพัลส์แสงเลเซอร์เพื่อให้ตรงกับพัลส์เทราเฮิร์ตซ์ไปยังอุปกรณ์ตรวจวัด โดยการเลื่อนเวลาการส่งพัลส์เลเซอร์ไปยังอุปกรณ์ตรวจวัด ทำให้สามารถบันทึกสัญญาณของพัลส์เทราเฮิร์ตซ์ในช่วงเวลาที่แตกต่างกันทำให้สามารถสร้างข้อมูลสเปกตรัมอยู่ในรูปของโดเมนเวลา (Time Domain)

หลักการทำงานของเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี เริ่มจากการที่แหล่งกำเนิดแสงเลเซอร์สร้างสัญญาณพัลส์และปล่อยสัญญาณพัลส์แบบช่วงสั้นๆ ในระดับเฟมโตวินาที (Femtosecond) จากนั้นสัญญาณพัลส์ถูกส่งผ่านตัวอย่างที่ต้องการวัดทำให้คลื่นเกิดการเปลี่ยนแปลงแอมพลิจูด (Amplitude) และเฟส (Phase) เนื่องจากการดูดกลืนพลังงานเมื่อผ่านตัวอย่าง จากนั้นสัญญาณพัลส์ที่ผ่านตัวอย่าง และใช้ระบบกำหนดหน่วงเวลาในการควบคุมเวลาของสัญญาณพัลส์แสงเลเซอร์เพื่อให้สัญญาณพัลส์ตรงกับความถี่เทราเฮิร์ตซ์ไปยังเครื่องตรวจวัดทำให้สามารถบันทึกสัญญาณพัลส์เทราเฮิร์ตซ์ในช่วงเวลาที่แตกต่างกัน ทำให้สามารถสร้างสัญญาณข้อมูลสเปกตรัมให้อยู่ในโดเมนเวลา (Time Domain) ที่มีความถี่อยู่ในช่วงเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz Frequency) แสดงดังรูปที่ 13



รูปที่ 13 หลักการทำงานของเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (THz-TDS)

ที่มา : https://www.researchgate.net/figure/A-schematic-diagram-of-a-typical-THz-TDS-system-The-inset-shows-a-measured-THz-pulse-for_fig1_230662177

ข้อดีของการตรวจวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี

- 1) ความสามารถในการวัดโดเมนเวลา: เนื่องจากการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนเป็นการวัดสัญญาณสเปกตรัมอยู่ในโดเมนเวลา (Time Domain) จึงทำให้การแปลงสัญญาณให้อยู่ในโดเมนความถี่ (Frequency Domain) ทำให้มีข้อมูลทั้งแอมพลิจูด (Amplitude) และเฟส (Phase) ที่การวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีในโดเมนความถี่เทคนิคอื่นมีเพียงแอมพลิจูด (Amplitude)
- 2) ไม่ทำลายตัวอย่าง: การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีไม่มีการทำลายตัวอย่างให้เสียหาย

ข้อจำกัดของการตรวจวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี

- 1) การทะลุผ่านวัสดุบางชนิด: คลื่นในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์ไม่สามารถส่องทะลุผ่านวัสดุที่เป็นโลหะหรือมีน้ำเป็นองค์ประกอบได้ ส่งผลให้การวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปีไม่สามารถวัดตัวอย่างที่อยู่ในสถานะของเหลวได้
- 2) มีความไวต่อความชื้น: คลื่นเทราเฮิร์ตซ์มีความสามารถดูดกลืนโดยโมเลกุลของน้ำในอากาศทำให้ไม่สามารถวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปีในสภาพแวดล้อมที่มีความชื้นสูงได้

2.2.2 สเปกโทรสโกปีแบบการกระเจิงแสง (Scattering Spectroscopy)

สเปกโทรสโกปีแบบการกระเจิงแสง (Scattering Spectroscopy) เป็นเทคนิคการวัดเชิงแสงที่ใช้หลักการการกระเจิงของแสง (Scattering) ซึ่งเป็นกระบวนการที่เกิดขึ้นก็ต่อเมื่อสสารถูกยิงด้วยแสงหรือรังสีคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าและโมเลกุลหรืออิเล็กตรอนภายในสสารถูกกระตุ้นทำให้โมเลกุลภายในสสารถูกกระตุ้นทำให้เกิดสถานะมีขั้ว (Polarizability) หลักจากถูกกระตุ้นอิเล็กตรอนหรือโมเลกุลภายในสสารที่ถูกกระตุ้นไม่มีความเสถียร จึงทำให้อิเล็กตรอนหรือโมเลกุลภายในสสารปรับเข้าสู่สภาวะสมดุลที่มีพลังงานต่ำและสถานะไม่มีขั้ว (Dipole Moment) จึงทำให้เกิดการกระเจิงแสง (Scattering Light) ซึ่งการกระเจิงแสงสามารถจำแนกได้ออกเป็น 2 ประเภท ได้แก่ การกระเจิงแสงที่กระเจิงออกไปไม่มีการเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานของอิเล็กตรอน (Elastic Scattering) และการกระเจิงแสงที่พลังงานที่กระเจิงออกไปเกิดการเปลี่ยนแปลงของพลังงาน (Inelastic Scattering) โดยในงานวิจัยนี้เลือกใช้เทคนิคการวัดโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีแบบการกระเจิงแสงดังนี้

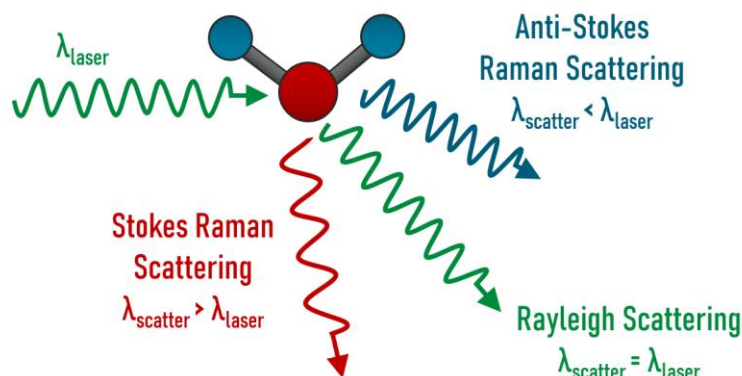
2.2.2.1 การตรวจวัดสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีแบบการกระเจิงแสงโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy)

ในการตรวจวัดสารสำคัญในกาแฟด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้เครื่องรามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) แสดงดังรูปที่ 14 ซึ่งเป็นเทคนิคสเปกโทรสโกปีที่ใช้หลักการการกระเจิงของแสง โดยมีพื้นฐานมาจากปรากฏการณ์รามาน (Raman) โดยที่ปรากฏการณ์รามานเป็นปรากฏการณ์ในการกระเจิงแสงที่การกระเจิงเกิดการเปลี่ยนแปลงพลังงาน (Inelastic Scattering) ที่เกิดจากการที่แสงที่ตกกระทบกับวัตถุหรือวัสดุ ส่งผลทำให้โมเลกุลภายในวัสดุหรือวัตถุถูกกระตุ้นทำให้พันธะระหว่างอะตอมภายในโมเลกุลเปลี่ยนเป็นสถานะมีขั้ว (Polarizability) ซึ่งเกิดการเปลี่ยนแปลงหลังจากที่โมเลกุลถูกกระตุ้นนั้น โมเลกุลหรืออิเล็กตรอนที่ถูกกระตุ้นไม่มีความเสถียร จึงทำให้อิเล็กตรอนหรือโมเลกุลภายในวัสดุหรือวัตถุพยายามปรับเข้าสู่สภาวะสมดุลที่มีพลังงานต่ำกว่าและไม่มีขั้ว (Dipole Moment) จึงทำให้เกิดการกระเจิงแสง ซึ่งการกระเจิงแสงรามาน คือการกระเจิงแสงที่เกิดการเปลี่ยนแปลงพลังงานและความยาวคลื่น จึงถูกเรียกว่าการกระเจิงแสงรามาน (Raman Scattering) ส่วนแสงที่กระเจิงและไม่มีการเปลี่ยนแปลงความยาวคลื่นจะถูกเรียกว่า การกระเจิงแสงเลย์ไร (Rayleigh Scattering) อย่างไรก็ตามการกระเจิงแสงเลย์ไร และการกระเจิงแสงรามานคิดเป็นอัตราส่วนของ 99.9999 และ 0.00015% ของแสงที่เกิดการกระเจิงทั้งหมด ซึ่งการเปลี่ยนแปลงพลังงานหรือความยาวคลื่นของแสงที่ตกกระทบนั้นมีความเป็นไปได้ที่จะสามารถลดและเพิ่มของพลังงานหรือความยาวคลื่น ในกรณีที่มีการเปลี่ยนแปลงมีความยาวคลื่นที่เพิ่มขึ้นจะเรียกว่าการกระเจิงแสงแบบแอนติสโตค (Anti-Stoke Scattering) ในทางตรงข้ามหากการเปลี่ยนแปลงความยาวคลื่นที่ลดลงจะถูกเรียกว่าการกระเจิงแสงแบบสโตค (Stoke Scattering) แสดงดังรูปที่ 15



รูปที่ 14 เครื่องรามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy)

ที่มา : <https://www.labmanager.com/renishaw-launches-raman-system-for-forensic-analysis-22679>

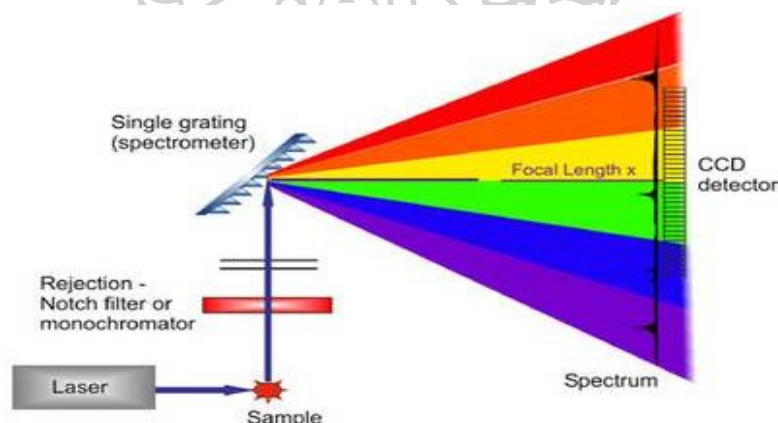


รูปที่ 15 การกระเจิงแสงแบบสโตค (Stoke Scattering) ในเครื่องรามานสเปกโทรสโคปี
ที่มา : <https://www.edmundoptics.eu/knowledge-center/application-notes/lasers/basic-principles-of-raman-scattering-and-spectroscopy/>

องค์ประกอบหลักของเครื่องรามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy)

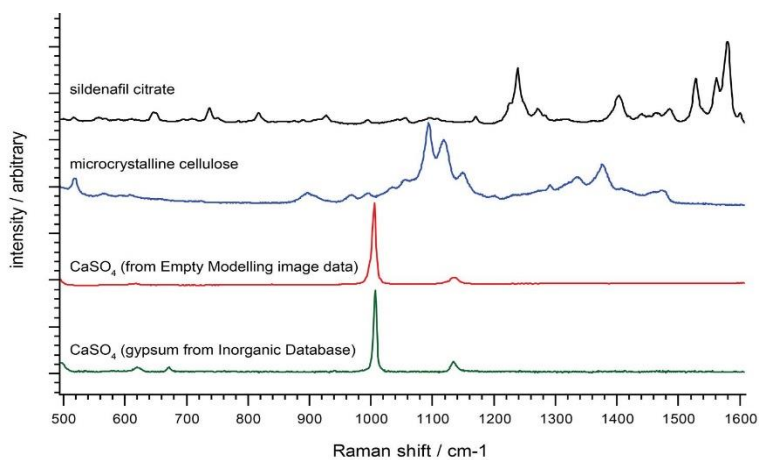
- 1) แหล่งกำเนิดแสงเลเซอร์ (Laser Light Source): แหล่งกำเนิดแสงเลเซอร์เป็นแหล่งกำเนิดแสงที่มีความถี่เฉพาะและมีพลังงานสูง ซึ่งเป็นแหล่งกระตุ้นการกระเจิงแสงในโมเลกุล
- 2) ออปติกส์ (Optics): เป็นระบบเลนส์และกระจกที่ใช้ในการโฟกัสแสงเลเซอร์ไปยังสารตัวอย่าง และยังทำหน้าที่รวบรวมแสงที่กระเจิงออกจากวัสดุ
- 3) เครื่องตรวจจับ (Detector): เครื่องตรวจจับทำหน้าที่ในการตรวจจับและอ่านสัญญาณทางไฟฟ้าของแสงที่กระเจิงออกมาให้อยู่ในรูปแบบของสเปกตรัม โดยในงานวิจัยนี้ได้ใช้เครื่องตรวจจับเป็น Charge Couple Device Detector (CCD)
- 4) ตัวกรองแสง (Optical Filter): ใช้ในการกรองแสงเลเซอร์ที่กระเจิงแบบที่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงความยาวคลื่น (Rayleigh Scattering) เพื่อให้เหลือเพียงแสงที่กระเจิงและเกิดการเปลี่ยนแปลงความยาวคลื่น (Raman Scattering)

รูปที่ 16 แสดงหลักการทำงานของเครื่องรามานสเปกโทรสโกปี เริ่มจากแหล่งกำเนิดแสงส่องแสงไปยังวัสดุหรือสารที่ต้องการตรวจวัดจากนั้นตัวอย่างเมื่อโมเลกุลภายในตัวอย่างถูกกระตุ้นทำให้โมเลกุลภายในวัสดุหรือวัตถุถูกกระตุ้นทำให้พันธะระหว่างอะตอมภายในโมเลกุลเปลี่ยนเป็นสถานะมีขั้ว (Polarizability) ซึ่งเกิดการเปลี่ยนแปลง หลังจากที่มีโมเลกุลถูกกระตุ้นนั้น โมเลกุลหรืออิเล็กตรอนที่ถูกกระตุ้นไม่มีความเสถียร จึงทำให้อิเล็กตรอนหรือโมเลกุลภายในวัสดุหรือวัตถุพยายามปรับเข้าสู่สภาวะสมดุลที่มีพลังงานต่ำกว่าและไม่มีขั้ว (Dipole Moment) จึงทำให้เกิดการกระเจิงแสง และแสงที่เกิดจากการกระเจิงถูกกรองโดยใช้ตัวกรองแสง (Optical Filter) ที่ใช้เป็น Single Grating เพื่อกรองการกระเจิงแสงให้ตรวจวัดได้โดยใช้เครื่องตรวจวัด (Detector) ที่ใช้เป็น Charge-Couple Detector เฉพาะแสงที่มีการเปลี่ยนแปลงความยาวคลื่น (Raman Scattering) และขั้นตอนสุดท้ายทำการแปลงสัญญาณทางไฟฟ้าให้อยู่ในรูปของสเปกตรัม แสดงดังรูปที่ 17



รูปที่ 16 หลักการทำงานของเครื่องรามานสเปกโทรสโกปี

ที่มา : <https://3dprint.com/26711/3d-printed-raman-spectroscopy/>



รูปที่ 17 ตัวอย่างสเปกตรัมที่วัดจากรามานแสดงสารเคมีบางชนิดในแท็บเล็ตที่สงสัยว่าเป็นของปลอม เราระบุสเปกตรัมสีแดงว่าเป็น CaSO_4 โดยค้นหาจากคลังข้อมูลวัสดุอนินทรีย์และแร่ธาตุของเครื่อง Renishaw Raman Spectroscopy

ที่มา : <https://www.renishaw.com/es/what-raman-spectroscopy-can-tell-you-->

25800

ข้อดีของการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

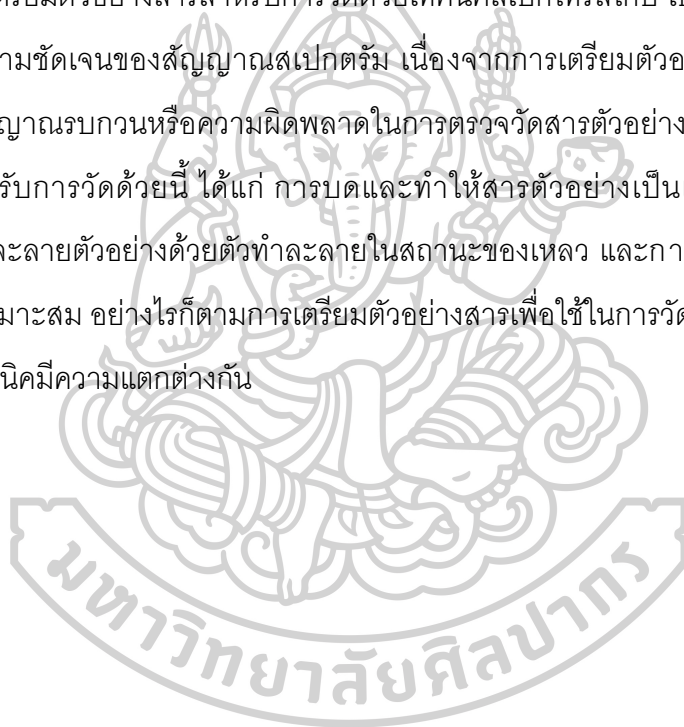
- 1) ไม่ทำลายตัวอย่าง: การวิเคราะห์ด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีไม่มีการทำลายตัวอย่างให้เสียหาย
- 2) การเตรียมตัวอย่างที่ไม่ซับซ้อน: สารตัวอย่างที่นำมาวัดด้วยเทคนิคสามารถเตรียมสารได้โดยไม่ซับซ้อนและสามารถวัดสารตัวอย่างได้ทั้งสถานะของแข็งและของเหลว
- 3) สามารถวัดข้อมูลในปริมาณมากได้อย่างรวดเร็ว: รามานสเปกโทรสโกปีให้ข้อมูลการวัดที่ละเอียดและสามารถตรวจวัดในปริมาณมากได้อย่างรวดเร็วและง่าย

ข้อจำกัดของการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

1) การเรืองแสง: ในบางตัวอย่างอาจเกิดปรากฏการณ์การเรืองแสง (Fluorescence) ซึ่งคือการที่สัญญาณพื้นหลังกลบสัญญาณรามานทำให้ไม่สามารถตรวจวัดสัญญาณรามานได้

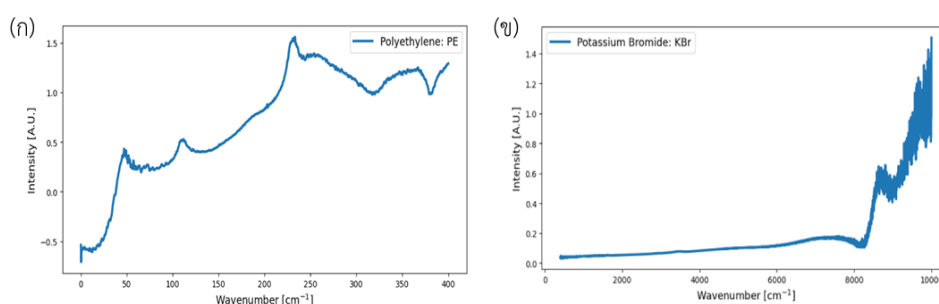
2.3. การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

การเตรียมตัวอย่างสารสำหรับการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี เป็นขั้นตอนตอนที่สำคัญที่ส่งผลต่อความชัดเจนของสัญญาณสเปกตรัม เนื่องจากการเตรียมตัวอย่างที่ไม่เหมาะสมอาจก่อให้เกิดสัญญาณรบกวนหรือความผิดพลาดในการตรวจวัดสารตัวอย่างได้ โดยหลักการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยนี้ ได้แก่ การบดและทำให้สารตัวอย่างเป็นเนื้อเดียวกันในสถานะของแข็ง การละลายตัวอย่างด้วยตัวทำละลายในสถานะของเหลว และการเลือกความเข้มข้นของตัวอย่างให้เหมาะสม อย่างไรก็ตามการเตรียมตัวอย่างสารเพื่อใช้ในการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีแต่ละเทคนิคมีความแตกต่างกัน



2.3.1 การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดเทคนิคด้วยฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

เนื่องจากการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีจำเป็นต้องเตรียมตัวอย่างให้อยู่ลักษณะเม็ดกลม และเนื่องจากเทคนิคการตรวจวัดดังกล่าวเป็นเทคนิคที่ให้หลักการจากการดูดกลืนแสง ซึ่งมีความไวต่อรอยแตกร้าวบนสารตัวอย่างทำให้ก่อให้เกิดสัญญาณรบกวนที่สูงได้ จึงจำเป็นต้องนำสารตัวอย่างที่ต้องการตรวจวัดมาผสมสารยึดเกาะ เพื่อให้สารตัวอย่างที่ต้องการตรวจวัดเพื่อเพิ่มการยึดเกาะและลดการแตกร้าวและต้องเป็นสารที่คลื่นความถี่ที่ตรวจวัดสามารถส่องผ่านได้โดยไม่มีการทำปฏิกิริยากับสารยึดเกาะโดยที่สารยึดเกาะ แต่ในการทดลองจริงก็สามารถตรวจวัดสัญญาณได้ ดังแสดงในรูปที่ 18 ในย่านความถี่อินฟราเรดไกลใช้เป็นโพลิเอทิลีน (Polyethylene: PE) และย่านความถี่อินฟราเรดกลางจะใช้เป็นโพแทสเซียมโบรไมด์ (Potassium Bromide: KBr)



รูปที่ 18 ตัวอย่างสเปกตรัมสารยึดเกาะที่ใช้ผสมกับตัวอย่าง (ก) โพลิเอทิลีน (Polyethylene: PE) ในย่านความถี่อินฟราเรดไกล (ข) โพแทสเซียมโบรไมด์ (Potassium Bromide: KBr) ในย่านความถี่อินฟราเรดกลาง

2.3.2 การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี

เนื่องจากการเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปีจำเป็นต้องเตรียมตัวอย่างให้อยู่ลักษณะเม็ดกลม และเนื่องจากเทคนิคการตรวจวัดดังกล่าวเป็นเทคนิคที่ให้หลักการจากการดูดกลืนแสง ซึ่งมีความไวต่อรอยแตกร้าวบนสารตัวอย่างทำให้ก่อให้เกิดสัญญาณรบกวนที่สูงได้ จึงจำเป็นต้องนำสารตัวอย่างที่ต้องการตรวจวัดมาผสมสารยึดเกาะ เพื่อให้สารตัวอย่างที่ต้องการตรวจวัดเพื่อเพิ่มการยึดเกาะและลดการแตกร้าวและต้องเป็นสารที่คลื่นความถี่ที่ตรวจวัดสามารถส่องผ่านได้โดยไม่มีการทำปฏิกิริยากับสารยึดเกาะโดยที่ใช้เป็น โพลิเอทิลีน (Polyethylene: PE) ซึ่งไม่ทำปฏิกิริยากับคลื่นในย่านความถี่เทราเฮิร์ตซ์

2.3.3 การเตรียมตัวอย่างสำหรับการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

โดยปกติสามารถเตรียมตัวอย่างที่อยู่ในสถานะของแข็งให้อยู่ในรูปแบบผงและสามารถทำการตรวจวัดได้ แต่ในงานวิจัยนี้ถูกแบ่งออกเป็นสองส่วน ได้แก่ ส่วนที่ 1 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานโดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี และส่วนที่ 2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟโดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

1) การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานโดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานโดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีเนื่องจากเป็นการตรวจวัดเพื่อใช้ในการวิเคราะห์เชิงปริมาณ ดังนั้นการเตรียมสารให้อยู่ในสถานะของแข็งในการวัดรามานจะต้องผสมสารอื่นเพื่อให้ได้ค่าความเข้มข้นที่ต้องการตรวจวัด แต่เนื่องจากการตรวจวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีเป็นการตรวจวัดโดยใช้หลักการกระเจิงของแสง ดังนั้นการผสมสารเพื่อลดปริมาณความเข้มข้นจึงทำให้เกิดความแปรปรวนของจุดยอดที่มาซ้อนทับกับข้อมูลของสัญญาณรามานที่ต้องการตรวจวัด ดังนั้นจึงต้องทำการเตรียมสารให้อยู่ในสภาพของเหลว โดยการละลายตัวอย่างด้วยตัวทำละลายให้อยู่ในรูปของเหลวตามความเข้มข้นที่กำหนด

2) การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟโดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟโดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี เนื่องจากตัวอย่างกาแฟมีความเข้มข้นของสีที่สูงทำให้เกิดปรากฏการณ์เรืองแสง (Fluorescence) [39] ซึ่งปรากฏการณ์ที่ทำให้ค่าสัญญาณรบกวนกลบสัญญาณรามานที่ตรวจวัดได้จริง ทำให้ไม่ตรวจวัดสัญญาณรามานในตัวอย่างกาแฟได้ ดังนั้นจึงต้องใช้ในการเตรียมตัวอย่างด้วยเทคนิค QuEChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, and Safe) ซึ่งเป็นเทคนิคการเตรียมตัวอย่างที่พัฒนาครั้งแรกโดย Anastassiades และคณะ [40] เพื่อใช้ในการสกัดสารสกัดใช้ในการฆ่าแมลงในทางเกษตรกรรม โดยในปัจจุบันได้มีการนำเทคนิค QuEChERS มาประยุกต์ใช้ในระบบการสกัดสารอย่างแพร่หลายในหลากหลายด้านรวมถึงกาแฟ [41] โดยหลักการของเทคนิคดังกล่าวจะประกอบด้วยสองส่วนหลัก คือ 1. การสกัด (Extraction) จะเป็นขั้นตอนที่ใช้เกลือและตัวทำละลายที่เหมาะสมผสมเข้ากับตัวอย่าง เพื่อให้เกิดการสกัด และเกิดการแยกชั้นของ Analytes ภายในตัวทำละลาย และ 2. การทำความสะอาดตัวอย่าง (Clean-up) โดยการใช้ตัวดูดซับ (Sorbent)

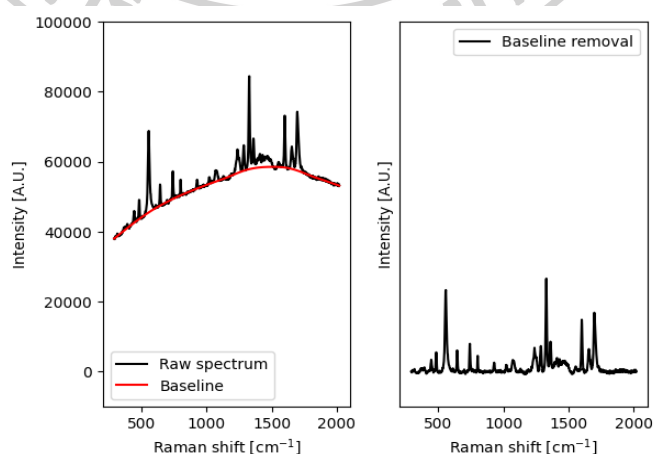
ที่จำเพาะผสมเข้ากับตัวอย่างเพื่อทำการกำจัดสิ่งรบกวน (Interferences) ออก

2.4 การประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing)

การประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นเป็นวิธีการลดสิ่งรบกวน, ข้อมูลที่เกิดจากข้อผิดพลาดจากการวัดของอุปกรณ์ หรือสัญญาณที่รบกวนที่เป็นสัญญาณที่ไม่เกี่ยวข้องออกจากข้อมูลสเปกตรัม โดยมีเป้าหมายเพื่อปรับปรุงคุณภาพโดยรวมของชุดข้อมูล อย่างไรก็ตามเทคนิคดังกล่าวไม่ได้เป็นการปรับปรุงให้ประสิทธิภาพของชุดข้อมูลสูงขึ้นเสมอไป แต่อาจจะเป็นการลบข้อมูลสัญญาณที่สำคัญออกจากข้อมูลสเปกตรัมทำให้คุณภาพของชุดข้อมูลมีประสิทธิภาพลดลง ดังนั้นการเลือกวิธีการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้นจึงจำเป็นต้องเลือกใช้ให้มีความเหมาะสมกับชุดข้อมูล สำหรับกระบวนการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้นที่ในงานวิจัยนี้เลือกใช้มี ดังนี้

2.4.1 การปรับฐานของสเปกตรัม (Baseline Removal)

สัญญาณสเปกตรัมการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีมักจะเกิดสัญญาณรบกวนพื้นหลัง (Background Noise) ซึ่งมันจะเกิดการกระเจิงแสงและการดูดกลืนแสง ทำให้ค่าสัญญาณสเปกตรัมที่ได้จากการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีมีค่าฐานสูงขึ้นตามความถี่ [42] แสดงดังรูปที่ 19ก การปรับฐานของสเปกตรัมเป็นกระบวนการที่ทำปรับพื้นฐานที่ไม่เกี่ยวข้องที่ปรากฏอยู่ในสัญญาณสเปกตรัม ทำให้วิเคราะห์สัญญาณสเปกตรัมได้อย่างชัดเจน



รูปที่ 19 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการปรับพื้นฐานที่ไม่เกี่ยวข้องที่ปรากฏอยู่ในสัญญาณสเปกตรัม

โดยหลักการปรับฐานของสเปกตรัม เริ่มด้วยการเลือกช่วงความถี่ของสัญญาณที่ต้องการปรับฐาน จากนั้นจะใช้ฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์เพื่อทำการหาฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์ที่เหมาะสมที่สามารถบรรยายเส้นฐานของสเปกตรัมในช่วงความถี่ที่ต้องการได้ จากนั้นจะทำการลบเส้นฐานที่ได้จากการหาโดยใช้ฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์ออกจากสเปกตรัม สัญญาณที่ได้จากการวัด (Raw Spectrum) โดยการหักลบค่าความเข้มของสัญญาณกับเส้นฐานดังกล่าวในแต่ละจุดข้อมูล และจากนั้นจะได้ผลลัพธ์สเปกตรัมที่เส้นฐานถูกปรับด้วยฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์เป็นศูนย์ แสดงดังรูปที่ 19x โดยที่ฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์สามารถเลือกได้ดังนี้

1) Linear Baseline Removal (Linear): การปรับเส้นฐานด้วยเส้นตรง เหมาะสำหรับการปรับฐานของสเปกตรัมที่มีเส้นฐานตรงหรือมีความชันเป็นเส้นตรงเล็กน้อย

2) Polynomial Baseline Removal (Polynomial): การปรับเส้นฐานด้วยฟังก์ชันโพลิโนเมียลเหมาะกับการปรับสเปกตรัมที่มีเส้นฐานโค้ง ฟังก์ชันดังกล่าวสามารถปรับลำดับโพลิโนเมียลได้ (Higher Order Polynomial) เพื่อให้ฟังก์ชันเส้นฐานเหมาะสมกับสัญญาณสเปกตรัมสูงขึ้น

3) Spline Baseline Removal: การปรับเส้นฐานด้วย Spline Baseline Removal เป็นการปรับเส้นฐานโดยใช้ Spline interpolation เพื่อสร้างเส้นฐาน ซึ่งวิธีดังกล่าวสามารถใช้กับสัญญาณสเปกตรัมที่มีเส้นฐานไม่สม่ำเสมอได้ดี โดยประกอบด้วย unispline และ gcsspline baseline removal

4) Asymmetric Least Squares (ALS) Baseline Removal: การปรับเส้นฐานด้วย ALS Baseline Removal เป็นการปรับเส้นฐานโดยใช้การแก้สมการเชิงเส้นแบบอสมการ วิธีดังกล่าวเหมาะสมกับสัญญาณสเปกตรัมที่มีจุดยอด (Peaks) ที่อยู่บริเวณตำแหน่งเส้นฐานที่มีความโค้ง

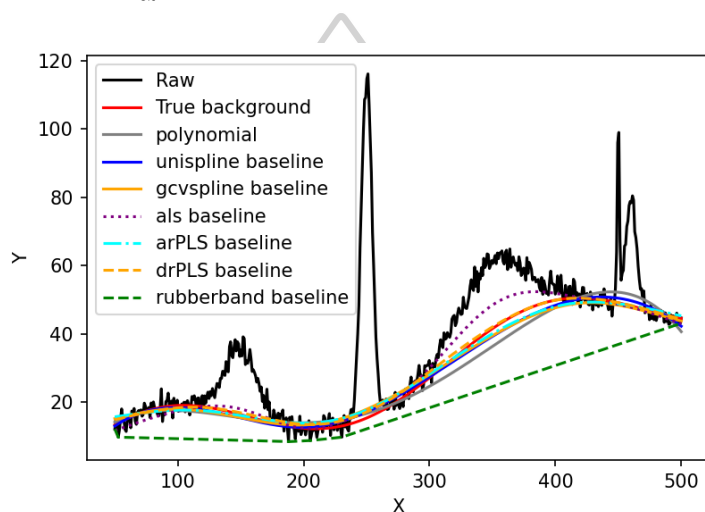
5) Rubber Band Baseline Removal: การปรับเส้นฐานด้วย Rubber Band Baseline Removal เป็นวิธีการคำนวณเส้นฐานโดยการวางเส้นที่เชื่อมจุดที่มีค่าสัญญาณต่ำที่สุดในสเปกตรัม วิธีดังกล่าวเหมาะสมกับสเปกตรัมที่ไม่มีความซับซ้อนของเส้นฐานที่สูง

6) Penalized Least Squares (PLS): การปรับเส้นฐานด้วย PLS โดยเป็นการหาค่าเส้นฐานโดยใช้การแก้สมการ Least Squares โดยมีการปรับค่า Penalty Term ซึ่งเป็นค่าที่กำหนดความ

เรียบของเส้นฐาน และป้องกันการฟิตเส้นฐานให้มีความซับซ้อนสูงเกินไป หรือการฟิตเส้นฐานตามสัญญาณรบกวน

7) Drift-correct Penalized Least Squares Baseline Removal (drPLS):

การปรับเส้นฐานด้วย drPLS เป็นวิธีการที่ผสมวิธีการปรับเส้นฐาน PLS และการแก้การลอยของเส้น (Drift Correction) โดยวิธีการดังกล่าวเหมาะกับสัญญาณสเปกตรัมที่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงของเส้นฐานอย่างฉับพลัน



รูปที่ 20 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการการปรับฐานของสเปกตรัมต่างๆ โดยอาศัยฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์

2.4.2 การลบรังสีคอสมิก (Cosmic Ray Removal)

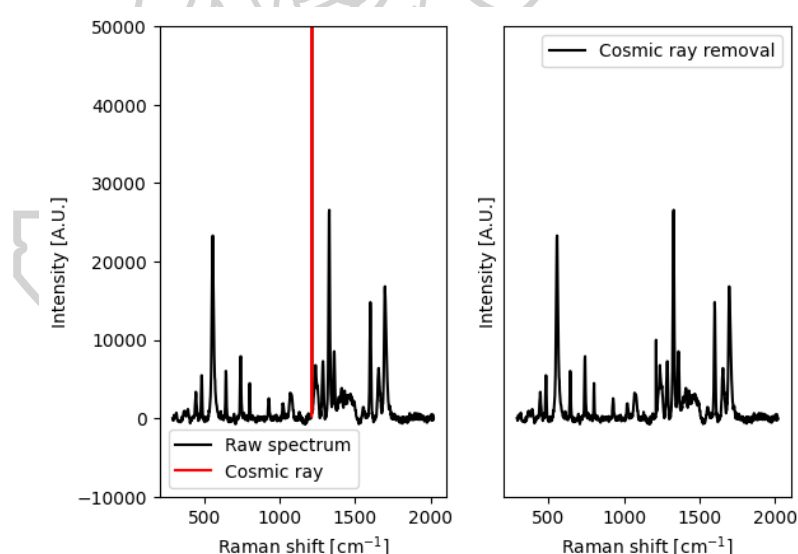
การลบรังสีคอสมิกจะเกิดขึ้นในการวัดด้วยเทคนิครามสเปกโตรสโกปี แต่ไม่มีการเกิดรังสีคอสมิกในการวัดด้วยเทคนิคฟลูออเรสเซนซ์ฟอรัมอินฟราเรดสเปกโตรสโกปี และการวัดด้วยเทราเฮิร์ตซ์โทมโดเมนสเปกโตรสโกปี เนื่องจากการวัดสัญญาณด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปีวัดอุปกรณ์ตรวจวัดเป็น Charge-Couple Device Detector (CCD Detector) ในการตรวจวัดสัญญาณทางไฟฟ้าและแปลงสัญญาณเหล่านั้นให้อยู่ในรูปแบบของสเปกตรัม ซึ่งอุปกรณ์ดังกล่าวมีความไว (Sensitive) ต่อรังสีคอสมิกส่งผลให้เกิดการพุ่งขึ้นของสัญญาณอย่างรวดเร็วในขณะที่ทำการวัดสัญญาณสเปกตรัม (Spikes) [44] ซึ่งลักษณะของการพุ่งขึ้นดังกล่าวมีลักษณะคล้ายกับจุดยอดของสัญญาณ (Peaks) ที่แสดงถึงคุณลักษณะที่สำคัญของสารที่ทำการตรวจวัด แสดงดังรูปที่ 21 ทำให้เกิด

ความแปรปรวนในการวิเคราะห์ข้อมูลจุดยอดของสัญญาณสเปกตรัม โดยวิธีในการลบรังสีคอสมิกในสัญญาณสเปกตรัมรามานสามารถทำได้หลากหลายเทคนิค ตัวอย่างเช่น

1) การวัดตัวอย่างซ้ำหลายครั้ง (Multiple Scans): เป็นเทคนิคพื้นฐานในการลบรังสีคอสมิกที่เกิดขึ้นภายในสัญญาณรามานคือการวัดสัญญาณรามานโดยใช้ตัวอย่างเดียวกันและตำแหน่งการวัดเดียวกันหลายครั้งและนำผลลัพธ์จากการวัดทั้งหมดมาทำการหาสเปกตรัมสัญญาณรามานเฉลี่ย

2) การใช้วิธีการกรองแบบคณิตศาสตร์ (Mathematical Filtering): เป็นเทคนิคการใช้ฟิลเตอร์ (Filter) ในการประมวลผลสเปกตรัม ตัวอย่างเช่นการใช้ Median Filter หรือการใช้ Savitzky-Golay Filter

3) การใช้การเปรียบเทียบระหว่างจุดข้อมูลและจุดรอบข้าง (Peak-to-Neighbor Comparison): เป็นการเปรียบเทียบค่าจุดของข้อมูลแต่ละตำแหน่งเปรียบเทียบเพื่อหาการเปลี่ยนแปลงของความเข้มสัญญาณที่ผิดปกติ



รูปที่ 21 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการลบรังสีคอสมิกจะเกิดขึ้นในการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

2.4.3 การกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติ (Outlier Removal)

การกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติจากการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเป็นกระบวนการในการปรับปรุงคุณภาพและความถูกต้องของสเปกตรัมที่วัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีในแต่ละชุดข้อมูลการวัด ดังแสดงในรูปที่ 22 สาเหตุของการเกิดข้อมูลผิดปกติในชุดข้อมูลสามารถเกิดได้จากหลายสาเหตุ เช่น

1) การเตรียมตัวอย่าง: จากการเตรียมตัวอย่างในการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีสารตัวอย่างที่อธิบายในหัวข้อที่ 2.3 ซึ่งอาจทำให้เกิดความไม่เป็นเนื้อเดียวกันของสารตัวอย่าง (Heterogeneity) ทำให้ในบางบริเวณของสารตัวอย่างที่วัดมีค่าความเข้มของสัญญาณที่ไม่ถูกต้อง

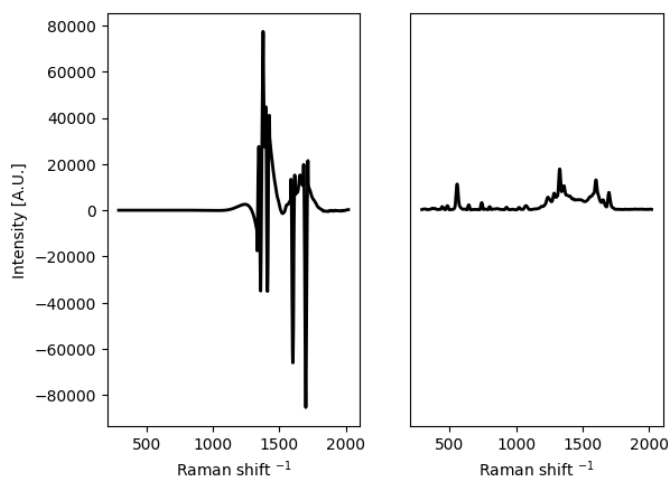
2) การเกิดสัญญาณรบกวน (Noise): การเกิดสัญญาณรบกวนที่สูงผิดปกติอาจจะเกิดการรบกวนทางไฟฟ้า ความไม่สมบูรณ์ของเครื่องมือการวัด หรือแม้กระทั่งจากแหล่งกำเนิดแสงในแต่ละเทคนิค ส่งผลให้สัญญาณสเปกตรัมมีสัญญาณรบกวนที่สูงผิดปกติ

จากสาเหตุที่กล่าวมาข้างต้นส่งผลให้ชุดข้อมูลการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีแต่ละเทคนิคเกิดความแปรปรวนส่งผลให้คุณภาพของชุดข้อมูลลดลง โดยวิธีการในการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติออกจากชุดข้อมูลนั้นสามารถทำได้โดยใช้การวิเคราะห์เชิงสถิติ (Statistical Analysis)

1) Z-score: การคำนวณค่า Z-score ในแต่ละจุดข้อมูลในสัญญาณสเปกตรัมและทำการกำหนดค่าเกณฑ์เพื่อใช้ในการระบุความเป็นไปได้ของแต่ละสเปกตรัมในการข้อมูลผิดปกติ

2) การวิเคราะห์ค่าเฉลี่ยและส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐาน: การวิเคราะห์ค่าเฉลี่ยและส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานเป็นการวิเคราะห์ข้อมูลเพื่อหาค่าเฉลี่ยของสเปกตรัมจากข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดในแต่ละชุดข้อมูล จากนั้นจะทำการกำจัดข้อมูลสเปกตรัมที่อยู่ค่าไม่ใกล้เคียงกับค่าเฉลี่ยของสเปกตรัม

3) Signal-to-Noise Threshold: การคำนวณค่าสัญญาณสเปกตรัมต่อสัญญาณรบกวน (Signal-to-Noise Threshold) จากนั้นทำการกำจัดสัญญาณสเปกตรัมที่มีค่าสัญญาณสเปกตรัมต่อสัญญาณรบกวนสูงเกินกว่าเกณฑ์ที่กำหนด



รูปที่ 22 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการกำจัดข้อมูลที่มีความผิดปกติจากการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

2.4.4 การปรับสัญญาณให้เรียบ (Signal Smoothing)

การปรับสัญญาณสเปกตรัมจากการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีให้เรียบเป็นกระบวนการที่ใช้เพื่อลดสัญญาณรบกวน (Noise) และทำให้สัญญาณสเปกตรัมมีความต่อเนื่องและทำให้สเปกตรัมแสดงข้อมูลคุณลักษณะจุดยอดได้ดีขึ้น แสดงดังรูปที่ 23 สาเหตุของการเกิดสัญญาณรบกวนในสเปกตรัมสามารถเกิดได้จากหลายสาเหตุ ตัวอย่างเช่น

1) สัญญาณรบกวนที่เกิดจากเครื่องมือวัด (Instrumental Noise): สัญญาณรบกวนที่เกิดจากเครื่องมือวัดอาจจะเกิดได้จากอุปกรณ์ตรวจวัดตัวอย่างเช่นการเกิดสัญญาณรบกวนจากความร้อนสะสมในตัวขยายประจุ (Charge Amplifier) ของตัว Charge-Couple Device Detector (CCD Detector) ในการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี [32]

2) ความผันผวนของตัวอย่างที่ทำการวัด: ความผันผวนของตัวอย่างที่ทำการวัดไม่ว่าจะเป็นอุณหภูมิ ความกดอากาศ หรือความชื้น ล้วนอาจก่อให้เกิดสัญญาณรบกวน

จากสาเหตุที่กล่าวมาข้างต้นส่งผลให้สัญญาณสเปกตรัมที่จากการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีสามารถเกิดสัญญาณรบกวนทำให้กลบสัญญาณสเปกตรัมและทำให้อาจก่อให้เกิดความแปรปรวนในการวิเคราะห์สัญญาณ โดยวิธีการในการปรับสัญญาณให้เรียบสามารถทำได้หลากหลายวิธี ตัวอย่างเช่น

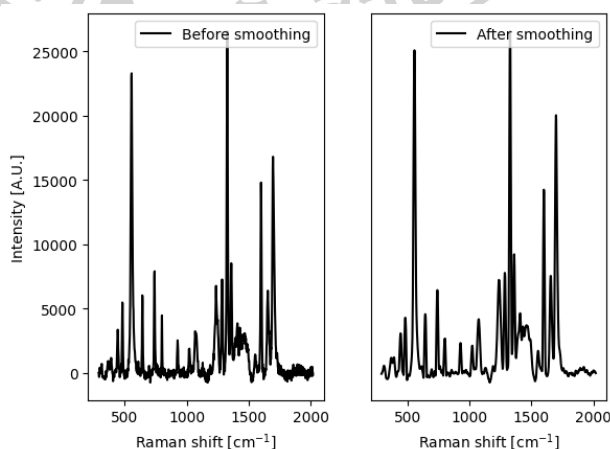
1) Savitzky-Golay-Filter: การปรับสัญญาณสเปกตรัมให้เรียบโดยใช้ Savitzky-Golay-Filter เป็นวิธีการปรับให้สัญญาณเรียบโดยไม่ส่งผลให้รูปร่างของจุดยอดของสัญญาณเกิดการเปลี่ยนแปลง โดยใช้หลักการการปรับให้เข้ากับพหุนาม (Polynomial Fitting) กับจุดข้อมูลในบริเวณรอบข้าง และทำการปรับสัญญาณใหม่

2) Moving Average Filter: การปรับสัญญาณสเปกตรัมให้เรียบโดยใช้ Moving Average Filter เป็นวิธีการปรับสัญญาณให้โดยการหาค่าเฉลี่ย ณ จุดข้อมูลกับจุดข้อมูลบริเวณรอบจุดข้อมูลนั้น

3) Gaussian Smoothing: การปรับสัญญาณสเปกตรัมให้เรียบโดยใช้ Gaussian Smoothing เป็นวิธีการใช้เทคนิค convolute กับข้อมูลสเปกตรัมร่วมกับฟังก์ชัน Gaussian เพื่อทำการลดสัญญาณรบกวน (Noise Signal)

4) Fourier Transform Smoothing: การปรับสัญญาณสเปกตรัมให้เรียบโดยใช้ Fourier Transform เป็นเทคนิคที่จะทำการแยกสัญญาณที่มีความถี่ต่ำ (Signal) และความถี่สูง (Noise Signal) จากนั้นใช้การกำจัดสัญญาณที่มีความถี่สูงออก

5) Wavelet Transform: การปรับสัญญาณสเปกตรัมให้เรียบโดยใช้ Wavelet Transform เป็นเทคนิคที่ใช้ Wavelet Decompositions เพื่อลดสัญญาณรบกวน (Noise Signal) โดยการแยกสัญญาณออกเป็นช่วงความถี่ย่อย จากนั้นใช้ Wavelet Thresholding ในการลบสัญญาณรบกวนให้ช่วงความถี่ที่ไม่ต้องการ

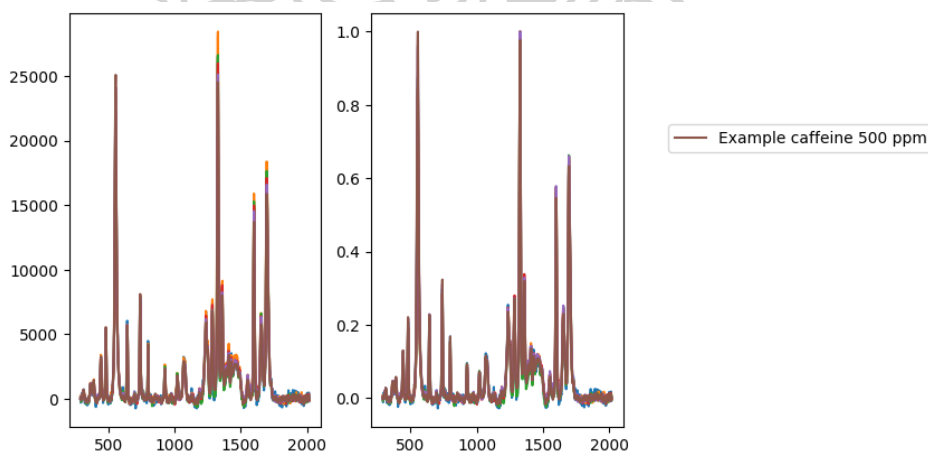


รูปที่ 23 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการปรับสัญญาณสเปกตรัมให้เรียบโดยใช้ Savitzky-Golay-Filter จากการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

2.4.5 การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (Normalization)

การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐานมักจะเกิดขึ้นกับการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีเนื่องจากในงานวิจัยนี้เป็นการวิเคราะห์สัญญาณสเปกตรัมโดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ซึ่งการที่จะนำข้อมูลสเปกตรัมใช้ในกระบวนการเรียนรู้ของเครื่องเป็นการให้การเรียนรู้ของเครื่องฝึกอบรม (Training) โดยการใช้ข้อมูลค่าความเข้มข้นของแต่ละตำแหน่งของสัญญาณสเปกตรัม เนื่องจากการวัดในช่วงเดียวกันทำให้ข้อมูลความถี่แต่ละตำแหน่งของแต่ละสัญญาณสเปกตรัมเป็นตำแหน่งข้อมูลความถี่เดียวกัน ดังนั้นปัจจัยที่ส่งผลต่อความเข้มของสัญญาณไม่ว่าจะเป็น ปริมาณของสาร การระเหยของสาร และการเลือกตำแหน่งการวัดของสาร ล้วนส่งผลต่อความเข้มข้นของสัญญาณและทำให้สัญญาณสเปกตรัมรามานของชุดข้อมูล หรือจากตัวอย่างเดียวกันมีความไม่คงเส้นคงวา (Consistency) โดยวิธีในการปรับสัญญาณของสเปกตรัมให้เป็นมาตรฐานนี้โดยการหาตำแหน่งอ้างอิงหนึ่งความถี่ที่มีความเข้มสัญญาณสูงสุดในสเปกตรัมเป็นความถี่เดียวกันในทุกสเปกตรัม และทำการหาอัตราส่วนของสัญญาณเทียบกับตำแหน่งดังกล่าว ทำให้ข้อมูลสเปกตรัมเป็นข้อมูลอัตราส่วนความเข้มของสัญญาณเทียบกับความเข้มสัญญาณ ณ ตำแหน่งอ้างอิง แสดงดังรูปที่

24



รูปที่ 24 ตัวอย่างสเปกตรัมที่เข้าสู่กระบวนการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน

2.5. การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกโทรสโกปีด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

การวิเคราะห์ข้อมูลโดยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ในปัจจุบันได้มีการนำ การเรียนรู้ของเครื่องประยุกต์ใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี อย่างกว้างขวาง โดยที่การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) เป็นองค์ประกอบหนึ่งของ ปัญญาประดิษฐ์ โดยที่ มีความแตกต่างกับการเขียนโปรแกรมพื้นฐานในคอมพิวเตอร์ (Traditional Programming) การเขียนโปรแกรมพื้นฐานจะเป็นการป้อนข้อมูลและโปรแกรมให้แก่คอมพิวเตอร์ หลังจากนั้นคอมพิวเตอร์จะมีการคำนวณผลลัพธ์ (Output) โดยใช้โปรแกรมที่ได้มีการป้อนให้แก่ คอมพิวเตอร์ แต่ในทางตรงกันข้ามการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) จะเป็นลักษณะการ ป้อนข้อมูล และผลลัพธ์การคำนวณให้แก่คอมพิวเตอร์ หลังจากนั้นคอมพิวเตอร์จะมีการเรียนรู้ ระหว่างข้อมูลและผลลัพธ์จากนั้นคอมพิวเตอร์จะได้โปรแกรมในการคำนวณข้อมูลดังกล่าวออกมา อย่างไรก็ตามการใช้การเรียนรู้ของเครื่องในแง่ของการวิเคราะห์ข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปก โตรสโกปีโดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่องสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 ประเภท ได้แก่ 1. การวิเคราะห์ เชิงปริมาณ (Quantitative Analysis) และ 2. การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (Qualitative Analysis)

2.5.1 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดย การใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Qualitative Analysis)

การวิเคราะห์เชิงปริมาณของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยการเรียนรู้ ของเครื่อง เป็นการคำนวณหาปริมาณของสารตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์โดยการอาศัยความเข้มของ สัญญาณและลักษณะเฉพาะของการดูดกลืน หรือการกระเจิงแสง โดยการสร้างและหาความสัมพันธ์ ระหว่างความเข้มข้นของสัญญาณสเปกตรัมและปริมาณของสารที่ต้องการวิเคราะห์ภายในสาร ตัวอย่าง โดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) มีความสามารถในการสร้าง แบบจำลอง (Model) ที่ประสิทธิภาพในการทำนายปริมาณของสารในตัวอย่างจากข้อมูลสัญญาณ อย่างไรก็ตามการประเมินประสิทธิภาพแบบจำลองจะถูกประเมินผ่านตัวชี้วัดดังต่อไปนี้ 1. ค่าความ ผิดพลาดเฉลี่ยสมบูรณ์ (Mean Absolute Error: MAE) 2. ค่ารากที่สองเฉลี่ยสมบูรณ์ (Root Mean Square Error: RMSE) และ 3. ค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจพหุคูณ (Coefficient of Multiple Determinations: R^2)

1) ค่าความผิดพลาดเฉลี่ยสมบูรณ์ (Mean Absolute Error: MAE) คำนวณได้จากสมการ (1) ดังนี้

$$MAE = \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (1)$$

โดยที่ y_i : ค่าความเข้มข้นจริงของสารตัวอย่าง

$\hat{y}_i$: ค่าความเข้มข้นของสารที่อย่างที่ทำนายได้

2) ค่ารากที่สองเฉลี่ยสมบูรณ์ (Root Mean Square Error: RMSE) คำนวณได้จากสมการ (2)

$$RMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (2)$$

โดยที่ y_i : ค่าความเข้มข้นจริงของสารตัวอย่าง

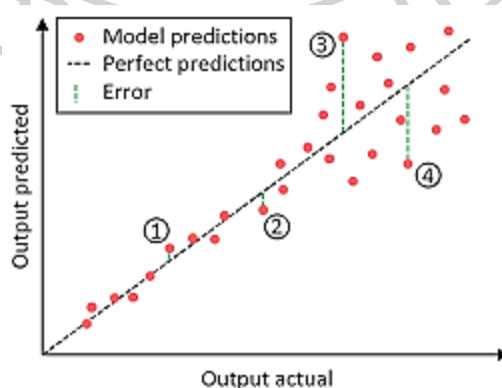
$\hat{y}_i$: ค่าความเข้มข้นของสารที่อย่างที่ทำนายได้

3) ค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจพหุคูณ (Coefficient of Multiple Determinations: R^2)

คำนวณได้จากสมการ (3)

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}} \quad (3)$$

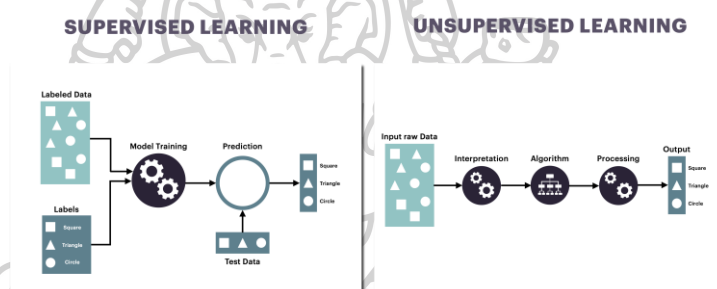
นอกจากการวิเคราะห์ประสิทธิภาพในการวิเคราะห์ของแบบจำลองผ่านตัวชี้วัดทั้ง 3 ตัวชี้วัดที่ได้กล่าวไปข้างต้นในการวิจัยนี้ได้มีการตรวจสอบผลลัพธ์ของการทำนายของแบบจำลองผ่านกราฟ Prediction Plot ที่แสดงถึงความแม่นยำของแบบจำลองที่ได้ แสดงดังรูปที่ 25



รูปที่ 25 การตรวจสอบผลลัพธ์ของการทำนายของแบบจำลองผ่านกราฟ Prediction Plot เพื่อบอกความแม่นยำของแบบจำลองที่ได้

2.5.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Quantitative Analysis)

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง เป็นการคำนวณเพื่อทำการระบุชนิดของสารประกอบเคมีที่อยู่ในตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์โดยการอาศัยความเข้มของสัญญาณและลักษณะเฉพาะของการดูดกลืน หรือการกระเจิงแสง โดยเป็นการหาความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มของสัญญาณสเปกตรัมและชนิดของสารประกอบเคมีที่อยู่ในตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์ โดยที่การใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ในการทำนายชนิดของสารประกอบเคมีภายในตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์ได้โดยสามารถแบ่งตามประเภทของการเรียนรู้ของเครื่องออกเป็น 2 ประเภท ได้แก่ การเรียนรู้โดยมีการกำกับ (Supervised Learning) และการเรียนรู้โดยไม่มีการกำกับ (Unsupervised Learning) แสดงดังรูปที่ 26



รูปที่ 26 การใช้การเรียนรู้ของเครื่องการเรียนรู้โดยมีการกำกับ (Supervised Learning) และการเรียนรู้โดยไม่มีการกำกับ (Unsupervised Learning)

2.5.2.1 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ (Supervised Learning)

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีการกำกับ (Supervised Learning) เป็นการคำนวณหาชนิดของสารประกอบเคมีภายในสารตัวอย่าง โดยการสร้างและหาความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของสัญญาณสเปกตรัมและชนิดของสารประกอบเคมีภายในสารตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์ โดยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) มีความสามารถในการสร้างแบบจำลอง (Model) ที่มีประสิทธิภาพในการทำนายชนิดของสารประกอบเคมีภายในสารตัวอย่าง อย่างไรก็ตามการประเมินประสิทธิภาพแบบจำลองจะถูกประเมินผ่านตัวชี้วัดดังต่อไปนี้ 1. ค่าความแม่นยำ (Accuracy) 2. ค่าความถูกต้อง (Precision) 3. ค่าความไว (Recall) 4. ค่าคะแนน F-1 (F-1 score)

1) ค่าความแม่นยำ (Accuracy) สามารถคำนวณได้จากสมการ (4) ดังต่อไปนี้

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{True Positives} + \text{True Negative}}{\text{Total Samples}} \quad (4)$$

โดยที่

True Positive: จำนวนที่โมเดลทำนายว่าเป็นถูกและเป็นจริง

True Negative: จำนวนที่โมเดลทำนายว่าเป็นผิดและเป็นจริง

2) ค่าความถูกต้อง (Precision) สามารถคำนวณได้จากสมการ (5) ดังต่อไปนี้

$$\text{Precision} = \frac{\text{True Positives}}{\text{True Positives} + \text{False Positives}} \quad (5)$$

โดยที่

True Positive: จำนวนที่โมเดลทำนายว่าเป็นถูกและเป็นจริง

False Positive: จำนวนที่โมเดลทำนายว่าเป็นถูกแต่ในความเป็นจริงผิด

3) ค่าความไว (Recall) สามารถคำนวณได้จากสมการ (6) ดังต่อไปนี้

$$\text{Accuracy} = \frac{\text{True Positives}}{\text{True Positives} + \text{False Negatives}} \quad (6)$$

โดยที่

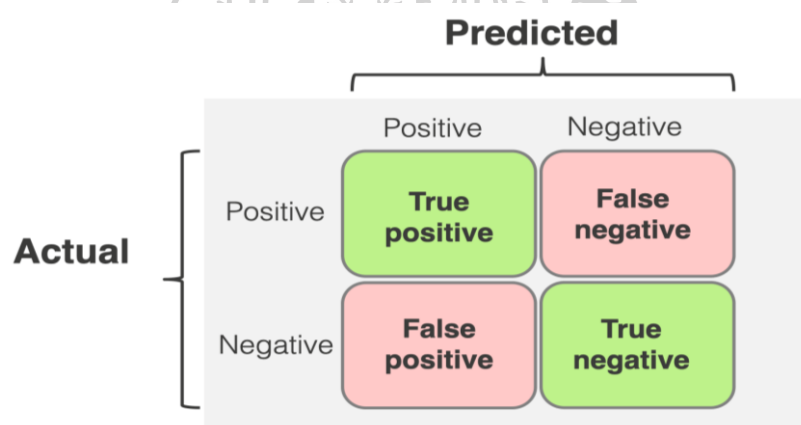
True Positive: จำนวนที่โมเดลทำนายว่าเป็นถูกและเป็นจริง

False Negative: จำนวนที่โมเดลทำนายว่าเป็นผิดและเป็นจริง

4) ค่าคะแนน F-1 (F-1 score) สามารถคำนวณได้จากสมการ (7) ดังต่อไปนี้

$$F1 - Score = 2 \times \frac{Precision \times Recall}{Precision + Recall} \quad (7)$$

นอกจากนี้ การวิเคราะห์ประสิทธิภาพของแบบจำลองเชิงคุณภาพแบบมีป้ายกำกับผ่านตัวชี้วัดที่กล่าวไปข้างต้นในงานวิจัยนี้ได้มีการวิเคราะห์ผลลัพธ์การทำนายของแบบจำลองผ่านเมทริกซ์ความแปรปรวน (Confusion Matrix) ซึ่งเป็นเทริกซ์ที่แสดงผลการทำนายของแบบจำลองเทียบกับผลลัพธ์จริง โดยแบ่งกลุ่มออกเป็น 4 กลุ่ม ได้แก่ 1) True Positive (TP): จำนวนที่โมเดลทำนายว่าถูกและเป็นจริง 2) True Negative (TN): จำนวนที่โมเดลทำนายว่าผิดและเป็นจริง 3) False Positive (FP): จำนวนที่โมเดลทำนายว่าถูกแต่ความจริงเป็นผิดและ 4) False Negative (FN): จำนวนที่โมเดลทำนายว่าผิดแต่ความจริงเป็นถูก แสดงดังรูปที่ 27



รูปที่ 27 การวิเคราะห์ผลลัพธ์การทำนายของแบบจำลองผ่านเมทริกซ์ความแปรปรวน (confusion matrix)

2.5.2.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ (Unsupervised Learning)

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ (Unsupervised Learning) เป็นการมุ่งเน้นไปที่การจัดกลุ่มรูปแบบโครงสร้าง หรือกลุ่มภายในชุดข้อมูล หรือการจัดกลุ่ม (Clustering) โดยไม่มีการใช้ข้อมูลป้ายกำกับในการใช้วิเคราะห์ (Label) ซึ่งการเรียนรู้แบบไม่มีป้ายกำกับ เหมาะสมในการทำความเข้าใจคุณสมบัติของข้อมูล โดยเทคนิคการวิเคราะห์โดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ ที่นิยมใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรส คือการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis: PCA)

การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis: PCA) เป็นเทคนิคทางคณิตศาสตร์ที่ใช้ในการลดมิติ (Dimensionality Reduction) ของข้อมูล เพื่อค้นหาโครงสร้างสำคัญภายในข้อมูลหลายมิติ (High-dimensional data) และแปลงข้อมูลไปให้อยู่ในรูปแบบส่วนประกอบหลัก (Principal Components) ซึ่งตัวแปรเหล่านี้จะมีความสัมพันธ์กันที่อิสระต่อกัน (Orthogonal) และยังคงรักษาความแปรปรวน (Variance) ของข้อมูล โดยมีหลักการ ดังต่อไปนี้

1) การคำนวณเมทริกซ์ความแปรปรวนร่วม (Covariance Matrix) ซึ่งเป็นเมทริกซ์ที่แสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรของข้อมูล ซึ่งแสดงถึงความคล้ายคลึงกันของข้อมูล

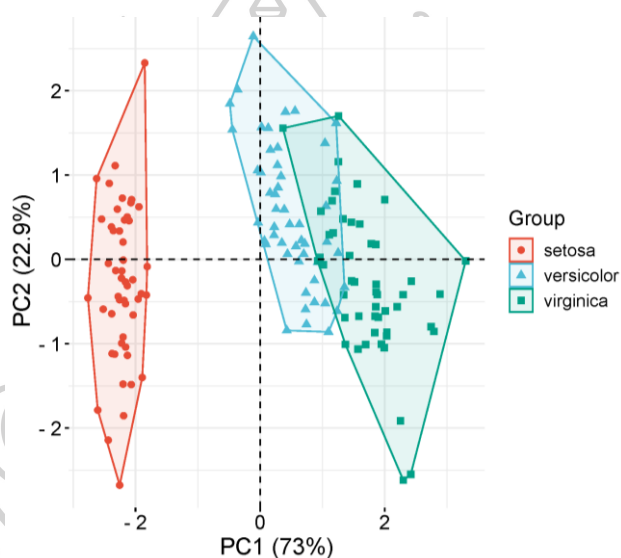
2) การคำนวณค่าลักษณะเฉพาะ (Eigenvalues) และเวกเตอร์ลักษณะเฉพาะ (Eigenvectors) โดยที่ค่าลักษณะเฉพาะ และเวกเตอร์ลักษณะเฉพาะของเมทริกซ์ความแปรปรวนร่วมจะถูกคำนวณ ซึ่งเวกเตอร์ลักษณะเฉพาะแสดงถึงทิศทางของส่วนประกอบหลัก (Principal Components) และค่าลักษณะเฉพาะจะแสดงถึงความสำคัญ หรือความแปรปรวนที่เกิดขึ้นในทิศทางดังกล่าว

3) เลือกจำนวนองค์ประกอบหลัก (Principal Components) โดยการเลือกจำนวนองค์ประกอบหลักจะขึ้นอยู่กับความแปรปรวนที่ต้องการ

4) การแปลงข้อมูลไปยังส่วนประกอบหลัก (Principal Component Transformation) ข้อมูลดั้งเดิมที่ถูกแปลงไปสู่มิติองค์ประกอบหลักโดยการคูณข้อมูลกับเวกเตอร์ลักษณะเฉพาะ

(Eigenvectors) ของส่วนประกอบหลักที่เลือกไว้ เพื่อสร้างข้อมูลใหม่ในระบบพิกัดของส่วนประกอบหลัก

อย่างไรก็ตามเทคนิคการวิเคราะห์หองค์ประกอบหลักมีประโยชน์นอกจากการที่สามารถจัดกลุ่มของข้อมูล ยังมีสามารถลดมิติข้อมูลที่มีความซับซ้อน ซึ่งมีความสามารถในการรักษาความแปรปรวนของลักษณะเฉพาะของข้อมูล ดังแสดงในรูปที่ 28 แต่เนื่องจากเทคนิคการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ ดังนั้นจึงไม่มีตัวแปรในการเปรียบเทียบทางคณิตศาสตร์ในการจัดกลุ่มว่าสามารถจัดกลุ่มได้ดีแค่ไหน



รูปที่ 28 ตัวอย่างการวิเคราะห์หองค์ประกอบหลักที่สามารถจัดกลุ่มของข้อมูลและลดมิติข้อมูลที่มีความซับซ้อน

ที่มา : https://bioinformatics.com.cn/plot_basic_PCA_plot_034_en

2.6 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.6.1 งานวิจัยของ ES Alamri, GA Altarawneh, HM Bayomy, AB Hassanat เรื่อง “Machine learning Classification of Roasted Arabica Coffee: Integrating Color, Chemical Compositions, and Antioxidants” [43]

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาการจำแนกประเภทของกาแฟอาราบิก้าออกเป็น 3 ประเภท ได้แก่ ระดับการคั่วอ่อน กลาง และเข้ม โดยใช้ข้อมูลจำลองที่ได้จากการวัดค่าสี (Color Information) การต้านอนุมูลอิสระที่ทดสอบในห้องปฏิบัติการ (Antioxidant Laboratory Testing) และจากการทดสอบองค์ประกอบเคมี (Chemical Composition Test) โดยในงานวิจัยนี้มีเป้าหมายในการลดข้อจำกัดในความพร้อมเรื่องข้อมูลในความเป็นจริง และค่าใช้จ่ายที่สูงในการทดสอบตัวอย่างในห้องปฏิบัติการ โดยวิธีการดังกล่าวถูกใช้เพื่อสร้างตัวอย่างใหม่สำหรับกาแฟอาราบิก้าในแต่ละประเภท จากนั้นใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ในการจำแนกประเภทของกาแฟอาราบิก้า และนอกจากนั้นยังได้ทำการตรวจสอบความสำคัญ (Feature Important) ในการระบุส่วนประกอบทางเคมีที่สำคัญ ผลการศึกษาพบว่าข้อมูลการวัดค่าสี และข้อมูลองค์ประกอบทางเคมีมีความสำคัญในการแบ่งประเภทของกาแฟอาราบิก้า โดยที่ข้อมูลองค์ประกอบทางเคมีมีความสำคัญอย่างมาก ทำให้สามารถจำแนกประเภทกาแฟอาราบิก้าได้โดยไม่มีผลผิดพลาด อย่างไรก็ตามข้อมูลการต้านอนุมูลอิสระเพียงอย่างเดียวส่งผลให้ประสิทธิภาพในการจำแนกต่ำ เนื่องจากความซับซ้อนของข้อมูลที่เพิ่มขึ้นและความแปรปรวนของตัวแยกประเภท จากการศึกษาวิจัยดังกล่าวได้มีการเสนอแนะให้พัฒนาแอปพลิเคชันบนมือถือที่ใช้การจดจำรูปภาพเพื่อตรวจสอบสีของกาแฟ และให้ข้อมูลองค์ประกอบทางเคมีด้วย ทำให้ผู้ใช้บริการสามารถตัดสินใจประกอบการตัดสินใจบริโภค

อย่างไรก็ตามงานวิจัยดังกล่าวมีข้อจำกัดในการใช้ข้อมูลในการตรวจวัดสารตัวอย่างโดยการใช้ข้อมูลค่าความเข้มสีของเมล็ดกาแฟในการตรวจวัดทำให้มีประสิทธิภาพในการตรวจวัดแต่ไม่สามารถบอกองค์ประกอบทางเคมีภายในตัวอย่างกาแฟในการทดสอบได้ และการเพิ่มข้อมูลสารประกอบเคมีโดยการใช้เทคนิคการวัดที่เป็นมาตรฐาน ซึ่งข้อมูลสารประกอบเคมีโดยที่ใช้เทคนิคการวัดที่เป็นมาตรฐานมีความสามารถในการระบุสารประกอบทางเคมีและจำแนกประเภทได้อย่างชัดเจนด้วยตัวข้อมูลเอง ดังนั้นจึงไม่จำเป็นต้องใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

2.6.2 งานวิจัยของ Phatham Loahavilai, Sopanant Datta, Kiattiwut Prasertsuk, Rungroj Jintamethasawat, Patharakorn Rattanawan, Jia Yi Chia, Cherdsak Kingkan, Chayut Thanapirom และ Taweetham Limpanuparb เรื่อง “Chemometric Analysis of a Ternary Mixture of Caffeine, Quinic Acid, and Nicotinic Acid by Terahertz Spectroscopy” [44]

งานวิจัยนี้เป็นการพัฒนาแบบจำลองทางเคมีเพื่อหาปริมาณสารประกอบทางเคมีที่สำคัญต่อคุณภาพกาแฟ ได้แก่ คาเฟอีน (Caffeine), กรดควินิก (Quinic Acid), และกรดนิโคตินิก (Nicotinic Acid) โดยใช้การวิเคราะห์โดยใช้ชุดข้อมูลเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy) จากตัวอย่างทั้งหมด 80 ตัวอย่าง จำนวน 480 สเปกตรัม ใช้กระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) ได้แก่ การทำให้เป็นมาตรฐาน (Normalization), การคำนวณค่า Z (Z-score), และ Max-min scaling และเทคนิคการลดมิติของข้อมูล (Dimension Reduction) ได้แก่ การหาองค์ประกอบหลัก (Principal Components Analysis: PCA), การวิเคราะห์ปัจจัย (Factor Analysis: FA), การวิเคราะห์องค์ประกอบอิสระ (Independent Components Analysis: ICA), การฝังเชิงเส้นเฉพาะ (Locally Linear Embedding: LLE), เมทริกซ์ที่ไม่เป็นลบการแยกตัวประกอบ (Non-negative matrix: NMF) และเลือกใช้แบบจำลองการทำนาย (Prediction Models) ได้แก่ Partial least-squares regression (PLSR), Support Vector Regression (SVR), Multilayer perceptron (MLP), Convolutional Neural Network (CNN), Gradient Boosting จากเทคนิคการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น, เทคนิคการลดมิติข้อมูล, และการเลือกใช้แบบจำลองในการทำนายทั้งหมดที่กล่าวมาข้างต้นทำให้ในงานวิจัยนี้ได้ทำการวิเคราะห์ทั้งหมด 4,711, 685 ชุดการวิเคราะห์ ผลลัพธ์แสดงให้เห็นถึงประสิทธิภาพสูงสุดในการวิเคราะห์ปริมาณโดยประเมินผ่านตัวชี้วัด รากที่สองความผิดพลาดเฉลี่ย (Root Mean Square Error: RMSE) โดยมีค่าอยู่ที่ 0.0254 โดยการใช้ Max-mix scaling และ Factor Analysis ในกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น และใช้ Multilayer Perceptron ในการทำนาย

อย่างไรก็ตามงานวิจัยดังกล่าวมีข้อจำกัดในการเลือกใช้ตัวอย่างโดยในงานวิจัยนี้เลือกใช้ตัวอย่างที่จากสารมาตรฐานทุกชนิดดังนั้นจึงทำให้ความซับซ้อนและความแปรปรวนของข้อมูลต่ำ ดังนั้นหากงานวิจัยนี้เลือกใช้ตัวอย่างกาแฟจริงอาจจะทำให้ชุดข้อมูลมีความแปรปรวนที่สูงและมีประสิทธิภาพในการทำนายปริมาณที่ต่ำ

2.6.3 งานวิจัยของ Niya Wang, Yucheng Fu, Loong-Tak Lim เรื่อง “Feasibility Study on Chemometric Discrimination of Roasted Arabica Coffee by Solvent Extraction and Fourier Transform Infrared Spectroscopy” [15]

งานวิจัยนี้เป็นการศึกษาความเป็นไปได้ในการวิเคราะห์แหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์ที่และระดับการคั่วที่แตกต่างกันของตัวอย่างกาแฟโดยใช้ฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ซึ่งใช้ตัวอย่างเป็นกากกาแฟหลังจากการสกัดโดยสกัด 2 วิธี ได้แก่ 1) ตัวทำละลายเพียงอย่างเดียว ตัวอย่างเช่นเอทานอล (Ethanol), ไดคลอโรมีเทน (Dichloromethane), เอทิลอะซิเตต (Ethyl Acetate), เฮกเซน (Hexane), อะซิโตน (Acetone), หรือกรดอะซิติก (Acetic Acid) และ 2) การสกัดร่วมตัวทำละลายร่วมกับน้ำในปริมาณที่เท่ากัน โดยใช้การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principle Components Analysis: PCA) ซึ่งผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าวิธีการสกัดร่วมส่งผลให้ได้สารสกัดที่สะอาดกว่า และให้ข้อมูลสเปกตรัมในปริมาณที่มากขึ้น โดยการวิเคราะห์องค์ประกอบหลักของสเปกตรัมอินฟราเรดของสารสกัดเอทิลอะซิเตต (Ethyl Acetate) สำหรับกาแฟระดับการคั่วเข้มและคั่วกลาง แสดงให้เห็นถึงกลุ่มที่สามารถแยกกันได้ตามแหล่งกำเนิดทางภูมิศาสตร์และระดับการคั่ว โดยใช้แบบจำลองในการจำแนกโดยมีพื้นฐานจากการวิเคราะห์เชิงเปรียบเทียบระดับ (Soft Independent modeling of class analogy) ถูกนำมาใช้ในการจำแนกตัวอย่างกาแฟจากทั้งหมด 4 แหล่งที่มาที่มีระดับการคั่วเดียวกันนั้นคือคั่วเข้มสามารถจำแนกได้โดยมีประสิทธิภาพสูง โดยมีความแม่นยำอยู่ที่ 100%

อย่างไรก็ตามงานวิจัยดังกล่าวมีข้อจำกัดในการตรวจวัดตัวอย่างกาแฟที่มีจำนวนค่อนข้างน้อย และใช้ตัวอย่างกาแฟเพียงแค่ 2 ระดับการคั่วที่มีความแตกต่างกันชัดเจน จึงทำให้อาจจะเกิดการที่แบบจำลองดังกล่าวสามารถเข้ากับเข้ากับชุดข้อมูลที่ทำให้การจำแนกมากเกินไป (Overfitting)

2.6.4 งานวิจัยของ S Yang, C Li, Y Mei, W Liu, R Liu, W Chen, D Han และ K Xu เรื่อง “Determination of the Geographical Origin of Coffee Beans Using Terahertz Spectroscopy Combined With Machine Learning Methods” [14]

งานวิจัยนี้ได้ใช้เทคนิคเทราเฮิร์ตซ์สเปกโทรสโกปี ร่วมกับการวิเคราะห์ข้อมูลโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ในการจำแนกแหล่งที่มาทางภูมิศาสตร์ของกาแฟ ซึ่งความแตกต่างทางภูมิศาสตร์นำไปสู่ความแตกต่างด้านคุณภาพ รสชาติ และมูลค่าทางการค้าของกาแฟ ดังนั้นการจำแนกแหล่งที่มาจึงมีความสำคัญทั้งผู้ผลิตและผู้บริโภค โดยงานวิจัยนี้ได้ทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพการเรียนรู้ของเครื่องในการจำแนก ได้แก่ Convolution Neural Network (CNN), Linear Discriminant Analysis (LDA), และ Support Vector Machine (SVM) ซึ่งสำหรับ Linear Discriminant Analysis (LDA) และ Support Vector Machine (SVM) จะใช้วิธีการลดมิติของข้อมูล (Dimension decomposition) โดยใช้ Principal Component Analysis (PCA) และ Genetic Algorithm (GA) ซึ่งโดยที่ในองค์ประกอบหลัก 9 อันดับแรกของการหาองค์ประกอบหลังมีค่าอัตราการสนับสนุนสะสม (Accumulative Contribution rate) 99.99% และ Genetic Algorithm ได้มีการเลือกตัวแปรได้ทั้งหมด 21 ตัวแปร จากผลการทดลองแสดงให้เห็นว่า Convolution Neural Networks มีความแม่นยำถึง 90% ในชุดข้อมูลทดสอบ และการเลือกตัวแปรโดยใช้ PCA และ GA ยังเพิ่มประสิทธิภาพจากการจำแนกโดยปราศจากการลดมิติของข้อมูล

อย่างไรก็ตามในงานวิจัยดังกล่าวได้มีการใช้ความต่างของสเปกตรัมในการทำนายซึ่งข้อมูลสเปกตรัมที่ถูกใช้ในการฝึกอบรมมีความแปรปรวนของข้อมูลค่อนข้างน้อย และการทำนายดังกล่าวยังไม่มีการแสดงถึงสารประกอบทางเคมีภายในกาแฟว่าแสดงถึงสารประกอบชนิดใด นอกจากนั้นแบบจำลองที่ใช้เป็น Convolutional Neural Network ยังมีจำนวนพารามิเตอร์จำนวนมาก และเนื่องจากจำนวนข้อมูลที่มีจำกัด จึงอาจจะก่อให้เกิดการที่แบบจำลองเหมาะกับชุดข้อมูลที่ใช้มากเกินไป (Overfitting)

2.6.5 งานวิจัย Munawar, Agus Arip, Kusumiyati,, Andasuryani,, Yusmanizar, และ Adrizal เรื่อง “Near Infrared Technology Coupled with Different Spectra Correction Approaches for Fast and Non-Destructive Prediction of Chlorogenic Acid on Intact Coffee Beans”[45]

งานวิจัยนี้ใช้สเปกโตรสโกปีแบบการสะท้อนแสง (Reflectance) ในย่านความถี่อินฟราเรดใกล้ (Near-Infrared) ในช่วงความยาวคลื่น $1000 - 2500 \text{ cm}^{-1}$ ในการวิเคราะห์ปริมาณของสารคลอโรจีนิกในเมล็ดกาแฟทั้งเมล็ด โดยใช้แบบจำลอง Partial Least Square (PLS) โดยใช้ High Performance Liquid Chromatography (HPLC) ในการตรวจสอบปริมาณกรดคลอโรจีนิกเพื่อทำการสร้างข้อมูลหลักให้แก่แบบจำลอง ผลลัพธ์การวิจัยแสดงให้เห็นถึงสัมประสิทธิ์การกำหนดสูงสุด (Coefficient of determination: R^2) อยู่ที่ 0.97 และค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยรากที่สอง (Root Mean Square Error: RMSE) เท่ากับ 0.31% เมื่อทดสอบในชุดข้อมูลตรวจสอบ แต่ในชุดข้อมูลทดสอบมีค่าสัมประสิทธิ์การกำหนดสูงสุด และ ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยกำลังสอง เท่ากับ 0.91 และ 11.56% ตามลำดับ โดยจากผลลัพธ์ดังกล่าวแสดงให้เห็นถึงความสามารถในการใช้ข้อมูลสเปกตรัมย่านความถี่อินฟราเรดใกล้ในการระบุปริมาณสารคลอโรจีนิกในตัวอย่างกาแฟได้

อย่างไรก็ตามงานวิจัยดังกล่าวมีข้อจำกัดในเรื่องของจำนวนตัวอย่างที่จำกัด โดยในงานวิจัยนี้มีเพียง 152 ตัวอย่าง และไม่ได้ทำการวัดซ้ำจำนวนมาก ทำให้ชุดข้อมูลที่ไม่มีความหลากหลายและความแปรปรวนของข้อมูลที่น้อย โดยในงานวิจัยนี้ได้ทำการวิจัยและลดข้อจำกัดของงานวิจัยที่ได้โดยใช้เทคนิคการวัดที่ไม่ซับซ้อนใช้ระยะเวลาสั้นกว่าเทคนิคที่ได้มีการนำเสนอ และใช้แบบจำลองที่มีจำนวนพารามิเตอร์ที่น้อยกว่า นอกจากนั้นยังทำการทดสอบกับตัวอย่างกาแฟจริง

บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

จากที่มาและความสำคัญของสาระสำคัญในพืชเศรษฐกิจโดยการตรวจวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี และการวิเคราะห์ข้อมูลที่กล่าวมาในบทที่ 1 และศึกษาทฤษฎีที่เกี่ยวข้องในบทที่ 2 ทางผู้ทำการวิจัยจึงได้เลือกเทคนิคการตรวจวัดสารสำคัญในพืชเศรษฐกิจด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีร่วมกับการผสานข้อมูล โดยการทดลองได้เลือกใช้อุปกรณ์การวัดเชิงแสงและช่วงความถี่ ดังนี้

1. เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FT-IR) โดยเลือกวัดในช่วงความถี่ดังต่อไปนี้
 - วัดในช่วงความถี่อินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region: Mid-IR) ช่วงความถี่ 12 -100 เทราเฮิร์ตซ์
 - วัดในช่วงความถี่อินฟราเรดไกล (Far Infrared Region: Far-IR) ช่วงความถี่ช่วง 0 – 3 เทราเฮิร์ตซ์
2. เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS) วัดในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์ โดยมีความถี่อยู่ในช่วง 0.3 – 3 เทราเฮิร์ตซ์
3. เครื่องรามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy)

ในบทความนี้จะกล่าวถึงการอธิบายลำดับขั้นตอนและวิธีการดำเนินงานวิจัยนี้ เป็นการอธิบายตั้งแต่การเริ่มทำการจัดเตรียมตัวอย่าง การออกแบบการทดลอง ขั้นตอนการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีจากอุปกรณ์ที่แตกต่าง การประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น และการวิเคราะห์ข้อมูลโดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง โดยในงานนี้จะแบ่งขั้นตอนและวิธีการดำเนินงานออกเป็น 5 ขั้นตอน ประกอบด้วย ขั้นตอนที่ 1 การทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐาน ขั้นตอนที่ 2 การเตรียมตัวอย่างสารประกอบกาแฟที่ต้องการตรวจสอบ (Sample Preparation) ขั้นตอนที่ 3 การวัดสเปกตรัมโดยใช้การวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี ขั้นตอนที่ 4 การประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) ขั้นตอนที่ 5 การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

3.1 การทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐาน

การทดลองในขั้นตอนที่ 1 เป็นการทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานในการวัดด้วยวิธีการวัดเชิงแสงโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปี โดยใช้สารมาตรฐานที่เป็นสารบริสุทธิ์ไม่มีการเจือปน ซึ่งมีวัตถุประสงค์ในการศึกษาถึงความเป็นไปได้ในงานตรวจวัดตัวอย่างได้หรือไม่ เริ่มจาก

3.1.1 การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐาน

ในการศึกษาครั้งนี้เราได้ทดลองใช้เลือกสารมาตรฐานที่เป็นสารประกอบสำคัญภายในกาแฟ ได้แก่ สารคาเฟอีน (Caffeine) ที่มีความบริสุทธิ์ 99.99% กรดคลอโรจีนิก (Chlorogenic Acid) ที่มีความบริสุทธิ์ 99.99% โดยในการทดลองขั้นตอนดังกล่าวได้ทำการแบ่งการเตรียมตัวอย่างออกเป็น 2 ส่วน ได้แก่ การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยไม่มีการผสมสารยึดเกาะ และการเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยทำการผสมสารยึดเกาะ

3.1.1.1 การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยไม่มีการผสมสารยึดเกาะ

การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยไม่มีการผสมสารยึดเกาะทั้งหมด 2 ชนิด ได้แก่ กรดคลอโรจีนิกและสารคาเฟอีน โดยสารตัวอย่างมาตรฐานทั้งหมด ที่ทำการจัดหามาจะอยู่ในลักษณะผง โดยการวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ที่ช่วงความถี่ อินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และช่วงความถี่อินฟราเรดไกล (Far-IR) จะทำการเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานปริมาณ 100 มิลลิกรัม และ 30 มิลลิกรัม ตามลำดับ ในการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไมโดเมนสเปกโทรสโกปี จะทำการเตรียมตัวอย่างมาตรฐานปริมาณ 100 มิลลิกรัม หลังจากที่ได้ตัวอย่างถูกเตรียมในปริมาณที่กำหนด จึงนำมาบรรจุใส่เครื่องอัดเม็ดกลม (Pellet Press) ที่มีเส้นผ่านศูนย์กลางขนาด 13 มิลลิเมตร จากนั้นจึงนำไปอัดด้วยแรงดันโดยใช้เครื่องอัดแรงดันระบบไฮดรอลิก (Hydraulic Pressures) ซึ่งกำหนดค่าแรงดันอยู่ที่ 7 ปอนด์ต่อตารางนิ้ว เป็นระยะเวลา 5 นาที หลังจากผ่านการอัดด้วยแรงดันทำให้สารตัวอย่างมาตรฐานที่ต้องการวัดมีลักษณะเป็นเม็ดวงกลมที่มีเส้นผ่านศูนย์กลาง 13 มิลลิเมตร และบรรจุใส่สำหรับวัดตัวอย่าง แต่เนื่องจากการวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีและการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไมโดเมนสเปกโทรสโกปีเป็นเทคนิคการวัดที่ใช้หลักการส่องผ่านตัวอย่าง (Transmission) ดังนั้นขนาดและความหนาของตัวอย่างจึงเป็นตัวแปรสำคัญที่ส่งผลต่อสัญญาณสเปกตรัม แต่เนื่องจากการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีเป็นการวัดที่ใช้หลักการการกระเจิงแสงดังที่กล่าวไว้ในบทที่ 2 ดังนั้น ปริมาณของตัวอย่างและรูปร่างของตัวอย่างจึงไม่มีผล

กับสัญญาณสเปกตรัม จึงสามารถเตรียมตัวอย่างสารปริมาณที่เหมาะสม วางบนกระจก (Glass Slide) สำหรับการวัด

3.1.1.2 การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยทำการผสมสารยึดเกาะ

การเตรียมตัวอย่างสารมาตรฐานโดยทำการผสมสารยึดเกาะ โดยใช้กับการวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี และเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี เนื่องจากการวัดด้วยเทคนิคดังกล่าวเป็นเทคนิคการวัดโดยอาศัยหลักการการส่องผ่าน (Transmission) จึงทำให้เกิดจำกัดของอุปกรณ์ในการวัดที่จำเป็นต้องเตรียมตัวอย่างมีลักษณะเป็นวงกลมและไม่มีเกิดรอยแตกร้าว โดยสารตัวอย่างส่วนใหญ่ความสามารถในการยึดเกาะที่ต่ำทำให้หลังจากการดักด้วยเครื่องอัดแรงดันระบบไฮดรอลิกเกิดรอยแตกร้าว ทำให้การวัดเกิดสัญญาณรบกวน ดังนั้นจึงได้มีการพัฒนาในการผสมการยึดเกาะเพื่อเพิ่มความสามารถในการยึดเกาะให้มีลักษณะเม็ดวงกลมไม่เกิดรอยแตกร้าวของตัวอย่าง อย่างไรก็ตามสารยึดเกาะจำเป็นที่จะต้องไม่มีการดูดกลืนแสงในช่วงความถี่ที่ทำการตรวจวัด เพื่อป้องกันสัญญาณรบกวนจากสารยึดเกาะ โดยสารยึดเกาะเป็นโพลีเอทิลีน (Polyethylene: PE) (Sigma-Aldrich, MO, USA) ในการวัดในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz) และอินฟราเรดไกล (Far-IR) เนื่องจากอินฟราเรดไกลเป็นช่วงความถี่ที่มีการซ้อนทับกับช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์ และใช้โพแทสเซียมโบรไมด์ (Potassium Bromide: KBr) (Sigma-Aldrich, USA) ในการวัดในช่วงความถี่อินฟราเรดกลาง (Mid-IR) เนื่องจากสารดังกล่าวไม่มีการดูดกลืนในช่วงความถี่นั้นๆ โดยการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปีที่นำสารตัวอย่างมาผสมกับสารยึดเกาะเป็นสารโพลีเอทิลีน ด้วยอัตราส่วนสารตัวอย่างต่อสารยึดเกาะเป็น 15 ต่อ 85 โดยมวลต่อมวล มีปริมาณสุทธิ 100 มิลลิกรัม และเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีวัดด้วยช่วงความถี่อินฟราเรดไกลที่นำสารตัวอย่างมาผสมกับสารยึดเกาะเป็นสารโพลีเอทิลีน ด้วยอัตราส่วนสารตัวอย่างต่อสารยึดเกาะเป็น 30 ต่อ 70 โดยมวลต่อมวล มีปริมาณสุทธิ 30 มิลลิกรัม และที่ช่วงความถี่อินฟราเรดกลางที่นำสารตัวอย่างมาผสมกับสารยึดเกาะเป็นสารโพแทสเซียมโบรไมด์ ด้วยอัตราส่วนสารตัวอย่างต่อสารยึดเกาะเป็น 1 ต่อ 99 โดยมวลต่อมวล มีปริมาณสุทธิ 100 มิลลิกรัม หลังจากผสมสารตัวอย่างกับสารยึดเกาะในปริมาณและอัตราส่วนที่กำหนด จึงนำมาบรรจุใส่เครื่องอัดเม็ดกลม (Pellet Press) ที่มีเส้นผ่านศูนย์กลางขนาน 13 มิลลิเมตร จากนั้นจึงนำไปอัดด้วยแรงดันโดยใช้เครื่องอัดแรงดันแบบไฮดรอลิก (Hydraulic Pressures) ซึ่งกำหนดค่าแรงดันอยู่ที่ 7 ปอนด์ต่อตารางนิ้ว เป็นระยะเวลา 5 นาที หลังจากผ่านการอัดด้วยแรงดันทำให้สารตัวอย่างมาตรฐาน

ที่ต้องการวัดมีลักษณะเป็นเม็ดวงกลมที่มีเส้นผ่านศูนย์กลาง 13 มิลลิเมตร และบรรจุใส่สำหรับวัดตัวอย่าง

3.1.2 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

การวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FTIR)

ในการศึกษาครั้งนี้เราได้ใช้อุปกรณ์การวัดโดยใช้เทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FTIR) (VERTEX 80v, Bruker, MA, USA) ซึ่งเป็นเครื่องมือที่สามารถวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้แหล่งกำเนิดแสงในช่วงความถี่อินฟราเรด (Infrared Light) ที่พัฒนาต่อยอดมาจากเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์ (Infrared Spectrometer) โดยเป็นเทคนิคที่อาศัยหลักการส่องผ่านของแสงที่มีความถี่ส่องผ่านตัวอย่างที่ต้องการวัด (Transmission) ทำให้มีความสามารถตรวจวัดสารตัวอย่างในปริมาณน้อย แต่สามารถในการบ่งบอกคุณลักษณะของสัญญาณได้สูง นอกจากนั้นยังสามารถวัดสารตัวอย่างได้ตั้งแต่ช่วงความถี่อินฟราเรดกลาง (Mid-IR) ถึงช่วงความถี่อินฟราเรดไกล (Far-IR) โดยการทดลองขั้นตอนนี้ได้ทำการเก็บสเปกตรัมของสารตัวอย่างทั้งช่วงความถี่อินฟราเรดกลาง และอินฟราเรดไกล เพื่อศึกษาถึงความเป็นไปได้ในการวัดตัวอย่างที่เป็นสารประกอบหลักภายในกาแฟ โดยทำการวัดตัวอย่างที่มีตัวกลางในการวัดเดียวกัน แสดงให้เห็นว่ามีจุดยอดของสัญญาณ (Peaks) ที่แสดงถึงความสามารถในการดูดกลืนแสงในช่วงความถี่ต่างๆ ซึ่งส่งผลให้จุดยอดในแต่ละความถี่ มีขนาดที่แตกต่างกัน ซึ่งแสดงถึงการบ่งบอกคุณลักษณะทางพันธะของโมเลกุลภายในสารตัวอย่างที่ทำการตรวจวัด อย่างไรก็ตามในเทคนิคการวัดและความถี่ที่แตกต่างกันให้ข้อมูลแต่ละคุณลักษณะที่แตกต่างกัน

การตรวจสอบสารประกอบภายในตัวอย่างกาแฟโดยใช้สารมาตรฐาน โดยการใช้เทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy) ในช่วงความถี่อินฟราเรดกลาง (Middle Infrared) ซึ่งสเปกตรัมที่ได้จากการวัดในช่วงความถี่ดังกล่าว จะมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง $20 - 100 \text{ cm}^{-1}$ โดยเป็นช่วงความถี่ที่สามารถทำการตรวจจับการสั่นภายในโมเลกุลของสารตัวอย่างที่ตรวจวัดได้ (Inter Molecular Vibration) หลังจากที่กำหนดช่วงความถี่ของแหล่งกำเนิดแสง จึงนำตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมในขั้นตอนที่ 3.1.1. ทำการบรรจุในตำแหน่งการวัด ซึ่งเทคนิคนี้สามารถวัดตัวอย่างพร้อมกันได้สูงสุด 15 ตัวอย่างต่อการวัด 1 ครั้ง และทำการดูอากาศในระบบของเครื่องให้สภาพแวดล้อมในการวัดเป็นสุญญากาศ และกำหนดแหล่งกำเนิดแสง

เป็น Globar อุปกรณ์แยกลำแสง (Beam Splitter) เป็น T301 KBr และอุปกรณ์ตรวจวัด (Detector) เป็น KBr/ DLaTGS ตั้งค่าความละเอียด (resolution) เป็น 1 cm^{-1} โดยมีขนาดของลำแสงที่ส่องผ่าน (Aperture Setting) 4 มิลลิเมตร และจำนวนครั้งในการวัดเพื่อทำการเฉลี่ยของสเปกตรัม 4 ครั้งต่อการวัดหนึ่งตัวอย่าง

การตรวจสอบสารประกอบภายในตัวอย่างกาแฟโดยใช้สารมาตรฐาน โดยใช้เทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy) ในช่วงความถี่อินฟราเรดไกล (Far Infrared) ซึ่งสเปกตรัมที่ได้จากการวัดในช่วงความถี่ดังกล่าว จะมีความยาวคลื่นอยู่ในช่วง $100 - 2000\text{ cm}^{-1}$ โดยเป็นช่วงความถี่ที่สามารถทำการตรวจจับการสั่นระหว่างโมเลกุลของสารตัวอย่างที่ตรวจวัดได้ (Intra Molecular Vibration) หลังจากที่กำหนดช่วงความถี่ของแหล่งกำเนิดแสง จึงนำตัวอย่างที่ผ่านการเตรียมในขั้นตอนที่ 3.1.1. ทำการบรรจุในตำแหน่งการวัด ซึ่งเทคนิคนี้เป็นเทคนิคการใช้อุปกรณ์เดียวกันกับการวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีที่ใช้ช่วงความถี่อินฟราเรดกลาง ดังนั้นจึงสามารถวัดตัวอย่างพร้อมกันได้ 15 ตัวอย่างต่อการวัด 1 ครั้ง และทำการดูอากาศในระบบของเครื่องให้สภาพแวดล้อมในการวัดเป็นสุญญากาศ และกำหนดแหล่งกำเนิดแสงเป็น Hg-Ac อุปกรณ์แยกลำแสง (Beam Splitter) เป็น Multilayer T222 และอุปกรณ์การตรวจวัด (Detector) เป็น DLaTGS D201 ตั้งค่าความละเอียด (Resolution) เป็น 0.66713 cm^{-1} โดยมีขนาดของลำแสง (Aperture Setting) เป็น 8 มิลลิเมตร และจำนวนครั้งในการวัดเพื่อทำการเฉลี่ยของสเปกตรัม 5 ครั้งต่อการวัดหนึ่งตัวอย่าง

การวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS)

การตรวจวัดสารประกอบภายในตัวอย่างกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานโดยใช้เทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy: THz-TDS) เป็นเทคนิคที่มีความสำคัญในการศึกษาคุณสมบัติของวัสดุ ในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์ ซึ่งเป็นช่วงความถี่ที่อยู่ระหว่างความถี่ของคลื่นไมโครเวฟและอินฟราเรด โดยการวัดด้วยเทคนิคดังกล่าวจะมีลักษณะการวัดโดยเป็นเทคนิคที่อาศัยหลักการส่องผ่านของแสงที่มีความถี่ส่องผ่านตัวอย่างที่ต้องการวัด (Transmission) และสามารถแปลงข้อมูลให้เป็นสเปกตรัมของการดูดกลืนแสงได้เช่นเดียวกับการวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี แต่เนื่องจากหลักการวัดโดยใช้เทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปีเป็นเทคนิคที่ใช้การวัดตัวอย่างอยู่ในโดเมนของเวลา จึงต้องมีการแปลงสัญญาณที่วัดจาก

ตัวอย่างที่อยู่ในโดเมนเวลาเป็นโดเมนความถี่ ทำให้ข้อมูลจากเทคนิคดังกล่าวมีข้อมูลของเฟส (Phrase) ที่ไม่มีในสัญญาณจากการวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีที่มีเพียงข้อมูลขนาดของสัญญาณ (Amplitude) ทำให้ข้อมูลที่ได้จากการวัดด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ใหม่ โดเมนสเปกโทรสโกปีมีทั้งข้อมูลขนาด (Amplitude) และเฟส (Phrase) ของสัญญาณจากข้อมูลดังกล่าวจึงทำให้สามารถคำนวณหาค่าดัชนีการหักเห (Reflective Index) ของสารตัวอย่างที่ทำการตรวจวัดได้ อย่างไรก็ตาม จากการเตรียมตัวอย่างในขั้นตอนที่ 3.1.1. และนำตัวอย่างบรรจุในตำแหน่งการวัด แต่เนื่องจากเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ใหม่โดเมนสเปกโทรสโกปีเป็นเครื่องมือวัดที่ยังมีการพัฒนาโดยทีมวิจัยเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz Research Team) กลุ่มวิจัยสเปกโทรสโกปีและเซอร์เซอร์ (Spectroscopy and Sensor Device Research Group: SSDRG) ศูนย์อิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (The National Electronics and Computer Technology Center: NECTEC) จึงยังมีข้อจำกัดในการดูอากาศในการวัดให้เป็นสุญญากาศ ซึ่งใช้วิธีลดความชื้นสัมพัทธ์โดยการใช้แก๊สไนโตรเจนและควบคุมปริมาณความชื้นสัมพัทธ์ให้ต่ำกว่า 7% เนื่องจากสัญญาณในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์มีความไว (Sensitive) ต่อความชื้นจึงทำให้ง่ายให้เกิดสัญญาณรบกวน (Noise) นอกจากนั้นยังต้องตรวจสอบความเข้มของสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ไม่น้อยกว่า 250 นาโนแอมป์ เพื่อตรวจสอบความเข้มจากแหล่งกำเนิดของสัญญาณให้เพียงพอต่อการวัดและจึงทำการวัดตัวอย่าง



การวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy)

การตรวจวัดสารประกอบภายในตัวอย่างกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) เป็นเทคนิคที่อาศัยปรากฏการณ์กระเจิงแสงรามาน (Raman Scattering) เป็นการศึกษาสเปกตรัมการกระเจิงแสงจากปรากฏการณ์รามานที่เกิดจากการกระตุ้นโมเลกุลภายในวัสดุจากการยิงแสงเลเซอร์ทำให้โมเลกุลเกิดการสั่นและทำให้เกิดการกระเจิงแสง ซึ่งสามารถแบ่งการกระเจิงแสงเป็น 2 ประเภท ได้แก่ การกระเจิงแสงออกมาที่มีความยาวคลื่นเท่ากับ ความคลื่นของแสงเลเซอร์ (Rayleigh scattering) และการกระเจิงแสงที่กระเจิงออกมาเกิดการเปลี่ยนแปลงความยาวคลื่นไม่เท่ากับความยาวคลื่นของแสงเลเซอร์ (Raman Scattering) โดยการวัดสารประกอบตัวอย่างกาแฟมาตรฐานจะสามารถนำสารที่มีลักษณะเป็นผงมาวางบนกระจกสไลด์ (Glass Slide) จากนั้นทำการยิงแสงเลเซอร์จากเครื่อง Raman Spectroscopy (Renishaw New Mills, Gloucestershire, UK) โดยใช้เลเซอร์ที่มีความยาวคลื่น 785 นาโนเมตร กำลังเลเซอร์ 250 มิลลิวัตต์ ในการกระตุ้นสารตัวอย่าง และทำการเก็บสเปกตรัมรามานในช่วงเลขคลื่น 500 ถึง 1600 cm^{-1} เนื่องจาก [46] จุดยอด (peaks) ที่สำคัญของสารตัวอย่างในกาแฟอยู่บริเวณช่วงเลขคลื่นดังกล่าว ที่กำลังขยาย 50 เท่า และความละเอียดของสเปกตรัมอยู่ที่ 4 cm^{-1} สำหรับแต่ละตัวอย่าง โดยจะใช้ระยะเวลาในการเก็บสเปกตรัมละ 3 นาที

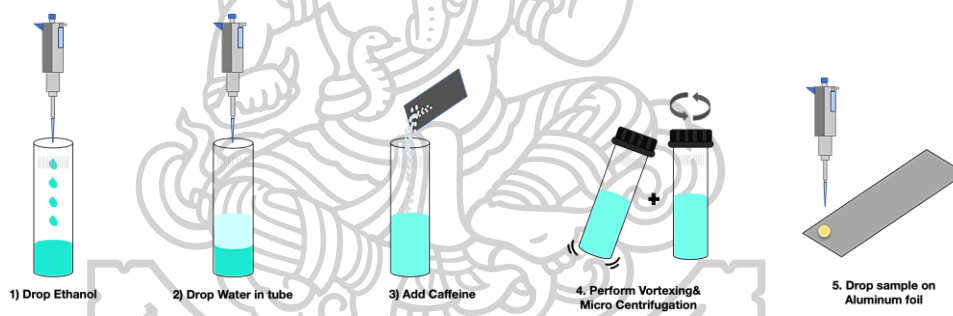
3.2 การเตรียมตัวอย่างสารประกอบกาแฟที่ต้องการตรวจสอบ (Sample Preparation)

ในการทำวิจัยนี้จะมีการเตรียมตัวอย่างสารประกอบกาแฟออกเป็น 2 ส่วน ประกอบด้วย ส่วนที่ 1: การเตรียมตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี และส่วนที่ 2: การเตรียมตัวอย่างกาแฟจริงสำหรับการวิเคราะห์เชิงคุณภาพโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

3.2.1 การเตรียมตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

การเตรียมตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี หลังจากการดำเนินงานวิจัยในขั้นตอนที่ 3.1 ทำให้เห็นถึงความเป็นไปได้ในการวิเคราะห์สารประกอบหลักในตัวอย่างกาแฟ ในการวิจัยนี้จะมีการเตรียมตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐาน เนื่องจากกาแฟประกอบด้วยสารประกอบทางเคมีมากกว่า 1000 ชนิด ดังที่กล่าวในบทที่

2. 1. 1 จึงทำการออกแบบการทดลองในการวิเคราะห์ปริมาณสารประกอบหลักภายในกาแฟ โดยการเตรียมสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความเข้มข้นแตกต่างกัน ซึ่งสารคาเฟอีนที่ใช้จะเป็นสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความบริสุทธิ์ 99.96% (Loba Chemic Pvt Ltd, Mumbai, India) โดยมีขั้นตอนแสดงดังรูปที่ 29 จากรูป สารคาเฟอีนมาตรฐานจะถูกนำมาผสมกับตัวทำละลาย โดยตัวทำละลายจะประกอบด้วยเอทานอล (Ethanol) ผสมกับน้ำที่มีความบริสุทธิ์ระดับ High Performance Liquid Chromatography (HPLC) ในอัตราส่วน 1 ต่อ 1 ในการผสมกับสารคาเฟอีนมาตรฐานกับตัวทำละลาย จะผสมโดยใช้สารคาเฟอีนมาตรฐานปริมาณ 500, 1000, 1500, 2000, 3000, และ 4000 กรัม กับปริมาณตัวทำละลาย 1000 มิลลิลิตร ผสมในหลอดทดลอง หลังจากนั้นจะทำการเขย่าเป็นเวลา 30 วินาที และทำการทำให้เกิดกระแสน้ำวน (Vortex) เพื่อให้สารคาเฟอีนมาตรฐานละลายในตัวทำละลายได้ดีขึ้น ทำให้ได้สารละลายคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความเข้มข้น 500, 1000, 1500, 2000, 3000 และ 4000 มิลลิกรัมต่อลิตร (Parts per million) และเตรียมนำไปวัดด้วยเทคนิคมานสเปกโทรสโกปีในขั้นตอนต่อไป



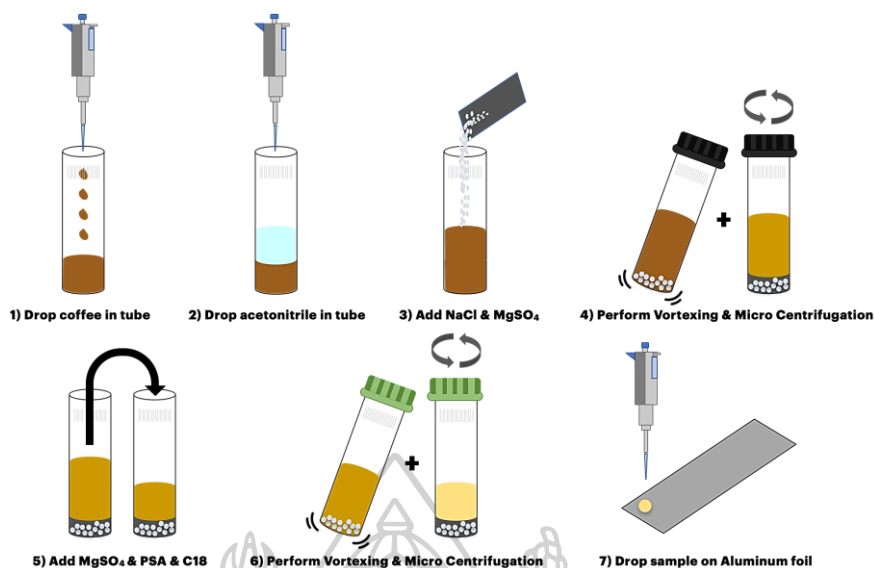
รูปที่ 29 วิธีการเตรียมตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานวัดโดยใช้เทคนิคมานสเปกโทรสโกปี

3.2.2 การเตรียมตัวอย่างกาแฟจริงสำหรับการวิเคราะห์เชิงคุณภาพโดยใช้เทคนิคมานสเปกโทรสโกปี

การเตรียมตัวอย่างกาแฟจริงสำหรับการวิเคราะห์เชิงคุณภาพโดยใช้เทคนิคมานสเปกโทรสโกปี หลังจากที่ได้ดำเนินงานวิจัยในขั้นตอนที่ 3.1 ทำให้เห็นถึงความเป็นไปได้ในการวิเคราะห์สารประกอบหลักในตัวอย่างกาแฟ ในขั้นตอนนี้จะเป็นการเตรียมตัวอย่างกาแฟจริง เนื่องจากการพัฒนาต่อยอดจากการวิเคราะห์ปริมาณจากสารคาเฟอีนมาตรฐานทำให้เห็นถึงความเป็นไปได้ในการวิเคราะห์ด้วยตัวอย่างกาแฟจริง โดยใช้ตัวอย่างกาแฟจริง ที่มาจากจังหวัดเชียงใหม่ ประเทศไทย จากนั้นนำมาผ่านกระบวนการคั่วกาแฟ ซึ่งทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงองค์ประกอบทางเคมีของเมล็ด

กาแฟดังกล่าวมาในบทที่ 2.1.1 จากนั้นทำการแบ่งระดับการคั่วออกเป็น 3 ระดับการคั่ว ได้แก่ระดับการคั่วอ่อน (Light Roast), ระดับการคั่วกลาง (Medium Roast), และระดับการคั่วเข้ม (Dark Roast) โดยมีอุณหภูมิ 180, 195, และ 210 องศาเซลเซียส ตามลำดับ เป็นระยะเวลา 10 ± 1 นาที หลังจากที่ไม่ลืตกาแฟผ่านการคั่วจะถูกแบ่งออกเป็น ส่วน โดยแต่ละส่วนจะมีปริมาณ 7 ± 3 กรัม และแต่ละส่วนจะถูกเก็บแยกกันในถุงอลูมิเนียมสุญญากาศ โดยในการทดลองจะได้นำกาแฟแต่ละส่วนที่จะใช้งานด้วยการชงโดยการจำลองการดริปของผู้บริโภค เริ่มจากการบดเมล็ดกาแฟให้มีขนาดใกล้เคียงน้ำตาลทรายแดงและเทลงบนกระดาษกรอง จากนั้นทำการเทน้ำที่มีอุณหภูมิ 98 องศาเซลเซียส โดยใช้อัตราส่วนกาแฟต่อน้ำที่อัตราส่วน 1 ต่อ 5 เป็นระยะเวลา 5 นาที แต่เนื่องจากกาแฟมีสารประกอบเคมีมากกว่า 1000 ชนิด จึงทำให้การวัดสเปกตรัมโดยใช้เทคนิครามานจุดยอดของสัญญาณ (Peaks) เกิดการซ้อนทับกัน (Overlap) จึงทำให้ไม่สามารถตรวจวัดได้จึงจำเป็นต้องใช้เทคนิค QuEChERS ซึ่งการเตรียมสารทางเคมี

การเตรียมตัวอย่างกาแฟสำหรับการวิเคราะห์เชิงคุณภาพโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปีด้วยการใช้เทคนิคการเตรียมตัวอย่าง QuEChERS เป็นการแยกสารประกอบทางเคมีให้เหลือเฉพาะสารประกอบที่ต้องการ และทำการสกัดสารประกอบอื่นออกจากตัวอย่าง แสดงดังรูปที่ 30 จากรูปโดยมีขั้นตอนแสดงดังนี้ 1. นำตัวอย่างกาแฟที่ผ่านการสกัดให้อยู่รูปเครื่องตีกาแฟปริมาณ 150 ไมโครลิตร ใส่ในหลอดทดลองสำหรับเครื่องปั่นเหวี่ยงขนาด 2 มิลลิลิตร 2. ทำการเติมสารอะซิโตนไนไตรล์ (Acetonitrile) และทำการผสมให้เข้ากัน โดยใช้เครื่อง Vortex ระยะเวลา 30 วินาที 3. ทำการเติมโซเดียมคลอไรด์ (Sodium Chloride: NaCl) ปริมาณ 15 มิลลิกรัม และแมกนีเซียมซัลเฟต (Magnesium Sulfate: MgSO_4) 4. ทำการผสมให้เข้ากันโดยใช้เครื่อง Vortex เป็นระยะเวลา 30 วินาที และทำการปั่นเหวี่ยงเพื่อให้สารเกิดการแยกชั้นของสารละลายด้วยเครื่องปั่นเหวี่ยงเป็นระยะเวลา 5 นาที 5. ทำการแยกสารละลายที่ไม่ตกตะกอนปริมาณ 15 ไมโครลิตรใส่หลอดทดลองใหม่ และทำการผสมกับคาร์บอน 18 (C18), PSA, และแมกนีเซียมซัลเฟต (Magnesium Sulfate: MgSO_4) ปริมาณ 15, 15, และ 45 มิลลิกรัมตามลำดับ เพื่อทำความสะอาดตัวอย่างตัวอย่างจากนั้นทำการผสมด้วยเครื่อง Vortex เป็นเวลา 30 วินาที และปั่นเหวี่ยงด้วยเครื่องปั่นเหวี่ยงระยะเวลา 5 นาทีและในการวัดจะนำส่วนที่ลอยเหนือตะกอนเป็นตัวอย่างในการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีต่อไปในขั้นตอนต่อไป



รูปที่ 30 การเตรียมตัวอย่างกาแฟจริงวัดโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

3.3 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

การตรวจวัดสารประกอบภายในตัวอย่างกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) เป็นเทคนิคที่อาศัยปรากฏการณ์กระเจิงแสงรามาน (Raman Scattering) เป็นการศึกษาสเปกตรัมการกระเจิงแสงจากปรากฏการณ์รามานที่เกิดจากการกระตุ้นโมเลกุลภายในวัสดุจากการยิงแสงเลเซอร์ทำให้โมเลกุลเกิดการสั่นและทำให้เกิดการกระเจิงแสง ซึ่งสามารถแบ่งการกระเจิงแสงเป็น 2 ประเภท ได้แก่ การกระเจิงแสงออกมามีความยาวคลื่นเท่ากับ ความคลื่นของแสงเลเซอร์ (Rayleigh scattering) และการกระเจิงแสงที่กระเจิงออกมาเกิดการเปลี่ยนแปลงความยาวคลื่นไม่เท่ากับความยาวคลื่นของแสงเลเซอร์ (Raman Scattering) และสามารถตรวจวัดได้โดยใช้ตัววัดแบบ Charge Coupled Device Detector (CCD Detector) แต่เนื่องจากสัญญาณรามานที่กระเจิงออกมานั้นสามารถมีค่าได้หลากหลายจึงจำเป็นต้องใช้อุปกรณ์ในการแยกความยาวคลื่น (Grating) ของสัญญาณรามานเพื่อให้สามารถเก็บข้อมูลในรูปแบบสเปกตรัมได้

3.3.1 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีเพื่อการวิเคราะห์เชิงปริมาณ

หลังจากกระบวนการเตรียมตัวอย่างสารที่ได้จากขั้นตอนที่ 3.2.1 โดยการวัดสารคาเฟอีนมาตรฐาน จำเป็นต้องนำสารมาหยดลงบนอลูมิเนียมฟอยล์ โดยใช้ปิเปตปริมาณหยดละ 2.5 ไมโครลิตร

และปล่อยตัวอย่างให้แห้งเป็นเวลา 30 นาที เนื่องจากสารตัวอย่างที่ถูกเตรียมอยู่ในสถานะของเหลว หลังจากนั้นจึงทำการเก็บข้อมูลสเปกตรัมรามานด้วยเครื่อง Raman Spectroscopy (Renishaw New Mills, Gloucestershire, UK) โดยใช้เลเซอร์ที่มีความยาวคลื่น 785 นาโนเมตร กำลังเลเซอร์ที่ 250 มิลลิวัตต์ ในการกระตุ้นสารตัวอย่าง และทำการเก็บสเปกตรัมรามานในช่วงเลขคลื่น 500 ถึง 1600 cm^{-1} ที่กำลังขยายภาพ 50 เท่า และความละเอียดของสเปกตรัมที่ 4 cm^{-1} สำหรับ การเก็บข้อมูลความเข้มข้นละ 3 ตัวอย่างต่อหนึ่งความเข้มข้น โดยที่แต่ละตัวอย่างเก็บข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด 50 สเปกตรัมต่อตัวอย่าง และแต่ละสเปกตรัมใช้ระยะเวลาในการเก็บสเปกตรัมละ 10 วินาที

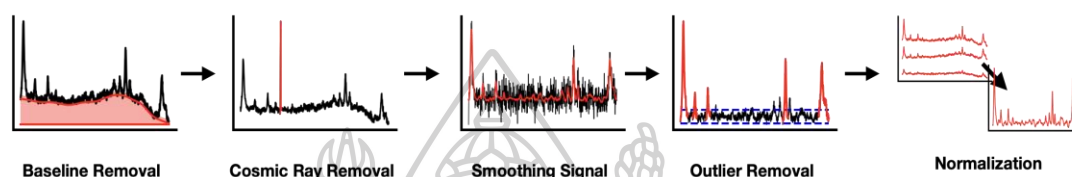
3.3.2 การวัดสเปกตรัมเชิงแสงของตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีเพื่อ การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ

หลังจากกระบวนการเตรียมตัวอย่างกาแฟที่ได้จากการเตรียมตัวอย่างด้วยเทคนิค QuEChERS ในขั้นตอนที่ 3.2.2 โดยการวัดตัวอย่างกาแฟจำเป็นต้องนำตัวอย่างมาหยดลงบนอลูมิเนียมฟอยล์ โดยใช้ปิเปตปริมาณหยดละ 2.5 ไมโครลิตร และปล่อยตัวอย่างให้แห้งเป็นเวลา 20 นาที เนื่องจากตัวอย่างกาแฟอยู่ในสถานะของเหลว หลังจากนั้นจึงทำการเก็บข้อมูลสเปกตรัมรามานด้วยเครื่อง Raman Spectroscopy (Renishaw New Mills, Gloucestershire, UK) โดยใช้เลเซอร์ที่มีความยาวคลื่น 785 นาโนเมตร กำลังเลเซอร์ที่ 250 มิลลิวัตต์ ในการกระตุ้นสารตัวอย่าง และทำการเก็บสเปกตรัมรามานในช่วงเลขคลื่น 500-1600 cm^{-1} ที่กำลังขยายภาพ 50 เท่า และความละเอียดของสเปกตรัมที่ 4 cm^{-1} สำหรับการเก็บข้อมูลโดยการแบ่งการเก็บสเปกตรัมจากตัวอย่างกาแฟทั้งหมด 9 วัน เพื่อเพิ่มความทนทานของการทดลอง (Robustness) โดยในแต่ละวันจะเก็บข้อมูลตัวอย่างกาแฟทั้ง 3 ระดับการคั่ว แต่ละระดับการคั่วจะเก็บใช้ตัวอย่างทั้งหมด 3 ตัวอย่างต่อหนึ่งระดับการคั่ว ซึ่งแต่ละตัวอย่างจะเก็บสเปกตรัมทั้งหมดตัวอย่างละ 90 สเปกตรัม และแต่ละสเปกตรัมใช้ระยะเวลาเก็บสเปกตรัมละ 10 วินาที

3.4 การประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing)

การประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น เป็นวิธีการในการลดสิ่งรบกวน ข้อมูลที่เกิดจากข้อผิดพลาดของอุปกรณ์ และข้อมูลที่ไม่เกี่ยวข้องออกจากข้อมูลสเปกตรัม โดยมีวัตถุประสงค์ในการปรับปรุงคุณภาพของชุดข้อมูลที่ได้จากการวัดให้เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการวิเคราะห์จากชุดข้อมูล อย่างไรก็ตามเทคนิคการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้นไม่ได้ก่อให้เกิดการเพิ่มประสิทธิภาพของข้อมูลเสมอไป แต่การก่อให้เกิดการตัดข้อมูลส่วนที่สำคัญของสัญญาณออก ซึ่งทำให้คุณภาพหรือ

ประสิทธิภาพในการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลลดลง ดังนั้นการเลือกวิธีการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น จึงมีความจำเป็นต้องทำการเลือกใช้ให้มีความเหมาะสมกับชุดข้อมูล สำหรับการศึกษาวิจัยนี้ได้ทำการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัม แสดงดังรูปที่ 31 โดยมีขั้นตอนต่อไปนี้ 1. การปรับฐานของสเปกตรัม (Baseline Removal) 2. การลบรังสีคอสมิก (Cosmic Ray Removal) 3.การปรับสัญญาณให้เรียบ (Signal Smoothing) 4. การกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (Outlier Removal) และ 5. การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (Normalization)



รูปที่ 31 ตัวอย่างสเปกตรัมที่ผ่านวิธีการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น

3.4.1 การปรับฐานของสเปกตรัม (Baseline Removal)

เนื่องจากสเปกตรัมที่วัดโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปีมักจะมีสัญญาณรบกวนพื้นหลัง (Background Noise) ซึ่งมักเกิดจากการปรากฏการณ์การกระเจิงแสงของรามาน ทำให้ค่าสัญญาณการกระเจิงแสงที่วัดได้มีค่าเพิ่มขึ้นตามความถี่ของแสงรามานดังที่กล่าวในบทที่ 2.1.2 กระบวนการปรับฐานของสเปกตรัมจึงกำจัดสัญญาณรบกวนพื้นหลังที่เกิดขึ้นโดยการวิเคราะห์เชิงปริมาณสารคาเฟอีนมาตรฐานเลือกใช้อัลกอริทึมปรับฐานของสเปกตรัมแบบพหุนามยกกำลังสอง (Second Order Polynomial Algorithm) และการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟจริงใช้อัลกอริทึมปรับฐานของสเปกตรัมแบบ drPLS ทั้งชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานของตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานและตัวอย่างกาแฟจริง

3.4.2 การลบรังสีคอสมิก (Cosmic Ray Removal)

เนื่องจากการวัดสัญญาณรามานจำเป็นต้องใช้อุปกรณ์ Charge Couple Device Detector (CCD Detector) ในการตรวจวัด ซึ่งอุปกรณ์ดังกล่าวมีความไวต่อรังสีคอสมิก ส่งผลให้เกิดการพุ่งขึ้นอย่างรวดเร็วในสัญญาณ (Spikes) ซึ่งมีลักษณะคล้ายกับจุดสูงสุดของสัญญาณ (Peaks) ที่แสดงถึงคุณลักษณะที่สำคัญของสารตัวอย่าง ดังที่กล่าวในบทที่ 2.1.2 ซึ่งทำให้เกิดความสับสนและก่อให้เกิดความผิดพลาดในการวิเคราะห์ข้อมูลได้ ดังนั้น งานวิจัยนี้จึงใช้การค่าผลต่างระหว่างสัญญาณสองตำแหน่งข้อมูลที่ติดกัน และกำหนดเกณฑ์ความต่างระหว่างสองจุดข้อมูล (Threshold) เพื่อทำการตรวจจับตำแหน่งที่มีความเป็นไปได้ที่จะเป็นผลกระทบจากรังสีคอสมิก (Cosmic Ray) หรือการเกิด

สัญญาณที่พุ่งขึ้นอย่างรวดเร็ว (Spikes) จากนั้นจะทำการแทนความเข้มของสัญญาณ ณ ตำแหน่งดังกล่าวด้วย ค่าความเข้มสัญญาณเฉลี่ยบริเวณรอบจุดนั้นภายในระยะหน้าต่าง (Window Size) โดยได้มีการกำหนดค่า เกณฑ์ระหว่างสองจุด (Threshold) และระยะหน้าต่าง (Window Size) เป็น 1500 และ 5 ตามลำดับ ทั้งชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานของตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานและตัวอย่างกาแฟจริง

3.4.3 การปรับสัญญาณให้เรียบ (Signal Smoothing)

เนื่องจากการวัดสัญญาณรามานความจำเป็นต้องใช้อุปกรณ์ Charge Couple Device (CCD Detector) ในขณะใช้งานการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีทำให้เกิดความร้อนสะสมในอุปกรณ์ขยายประจุ (Charge Amplifiers) ภายในอุปกรณ์ Charge Couple Device โดยในงานวิจัยนี้จะทำการปรับสัญญาณให้เรียบโดยใช้วิธีการ Savitzky and Golang Smoothing เพื่อลดสัญญาณรบกวนโดยการกำหนดค่าลำดับพหุนาม (Polynomial Order) และขนาดหน้าต่างตัวกรอง (Filter Window Size) เป็น 2 และ 15 ตามลำดับ ทั้งชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานของตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานและตัวอย่างกาแฟจริง

3.4.4 การกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (Outlier Removal)

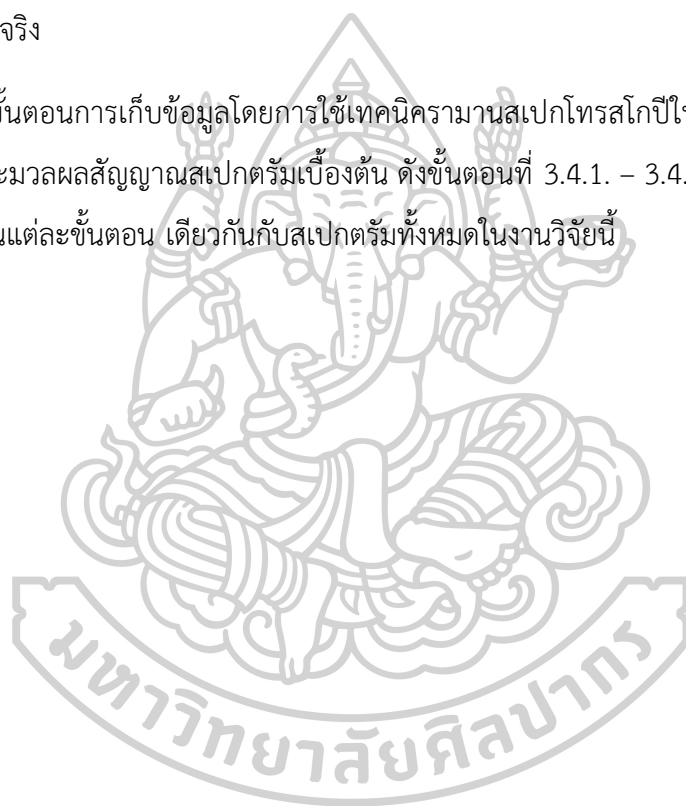
เนื่องจากในระหว่างการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีโดยการเก็บข้อมูลด้วยเทคนิคดังกล่าวใช้การเลือกตำแหน่งการวัดโดยผ่านกล้องไมโครสโคป 50x ดังนั้นการเลือกตำแหน่งการวัดบนสารตัวอย่าง ซึ่งความไม่เป็นเนื้อเดียวกันของตัวอย่าง (Heterogeneity) ทำให้ในบางตำแหน่งการวัดมีค่าความเข้มของสัญญาณรามานที่ไม่ถูกต้อง ส่งผลให้เกิดความแปรปรวน และคุณภาพของชุดข้อมูลลดลง ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงต้องทำการกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (Outlier Removal) โดยในงานวิจัยนี้ใช้วิธีการหาอัตราส่วนของความเข้มของสัญญาณต่อสัญญาณรบกวน (Signal-to-Noise Ratio: SNR) และทำการลบสเปกตรัมที่มีค่าความเข้มของสัญญาณต่อสัญญาณรบกวนสูงกว่าเกณฑ์ (Threshold) โดยในงานวิจัยนี้ได้กำหนดเกณฑ์อยู่ที่ 0.5 ทั้งชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานของตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานและตัวอย่างกาแฟจริง

3.4.5 การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (Normalization)

เนื่องจากสัญญาณรามานที่ถูกวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีที่มีเป้าหมายในการที่จะสามารถนำไปวิเคราะห์ด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง โดยประสิทธิภาพของการวิเคราะห์จะถูกกำหนดโดยคุณภาพของชุดข้อมูลที่ถูกเตรียมและผ่านการประมวลผลเบื้องต้น ดังนั้นในงานวิจัยนี้

ประสิทธิภาพของการเรียนรู้ของเครื่องจะขึ้นอยู่กับความแปรปรวนของความเข้มของสัญญาณรบกวน โดยที่ปริมาณ การระเหยของสาร การเลือกตำแหน่งการวัด ล้วนส่งผลต่อความเข้มของสัญญาณและ ทำให้สเปกตรัมรามานของตัวอย่างที่มาจากตัวอย่างเดียวกันเกิดความไม่คงเส้นคงวา (Inconsistency) โดยในงานวิจัยนี้ได้ทำการปรับค่าสัญญาณของสเปกตรัม โดยการใช้การหา อัตราส่วนระหว่างหนึ่งจุดข้อมูลตำแหน่งเทียบกับตำแหน่งจุดข้อมูลที่เหลือภายในสเปกตรัม โดยในงานวิจัยนี้ได้เลือกใช้ตำแหน่งความยาวคลื่นที่ 555 cm^{-1} เป็นตำแหน่งอ้างอิงในการหาอัตราส่วนเทียบกับจุดข้อมูลที่มีความยาวคลื่นอื่น ทั้งชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานของตัวอย่างสารคาเฟอีนมาตรฐานและตัวอย่างกาแฟจริง

จากขั้นตอนการเก็บข้อมูลโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปีใน ดังขั้นตอนที่ 3.3 ได้มีการใช้การประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น ดังขั้นตอนที่ 3.4.1. – 3.4.5 รวมถึงตัวแปรทั้งหมดที่ถูกกำหนดในแต่ละขั้นตอน เดียวกันกับสเปกตรัมทั้งหมดในงานวิจัยนี้

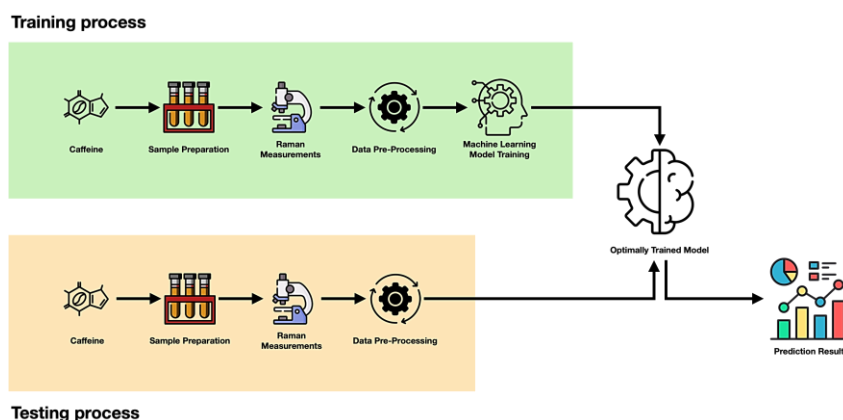


3.5 การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) เป็นการคำนวณหาความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลทางกายภาพของตัวอย่างและข้อมูลสเปกตรัมที่จากการวัดสัญญาณ โดยในงานวิจัยนี้ได้แบ่งออกเป็น 2 การทดลอง ได้แก่ การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง และการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

3.5.1 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง โดย จากรูปที่ 32 แสดงกระบวนการทำงานทั้งหมดในงานวิจัยนี้ เริ่มจากการแบ่งข้อมูลออกเป็น 2 ส่วน ดังนี้ ส่วนที่ 1 ข้อมูลส่วนที่ใช้ในกระบวนการฝึกสอนแบบจำลอง (Training Process) และส่วนที่ 2 ข้อมูลส่วนที่ใช้ในกระบวนการทดสอบแบบจำลอง (Testing Process) ได้มีการใช้ตัวอย่างในส่วนที่ 1 และส่วนที่ 2 จำนวน 27 และ 9 ตัวอย่างตามลำดับ หลังจากทำการแบ่งชุดข้อมูลออกเป็น 2 ชุด จากนั้นจึงทำขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสาร (Sample Preparation) ดังที่ได้อธิบายไว้ใน 3.2.1 และทำการวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี ดังที่ได้อธิบายไว้ใน 3.3.1 และทำการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้นดังที่ได้กล่าวไว้ใน 3.4 หลังจากที่ได้สเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น จากนั้นข้อมูลส่วนที่ 1 ข้อมูลส่วนที่ใช้ในกระบวนการฝึกสอนจะถูกป้อนให้แบบจำลองในการเรียนรู้เพื่อให้แบบจำลองได้เรียนรู้ถึงความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลความเข้มข้นของสัญญาณสเปกตรัมและความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐาน และหลังจากที่แบบจำลองได้ถูกฝึกสอนจากนั้นจะนำข้อมูลในส่วนที่ 2 ใช้ในการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐานเพื่อทดสอบประสิทธิภาพแบบจำลอง



รูปที่ 32 ภาพรวมการทำงานทั้งหมดของการวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

โดยในงานวิจัยนี้ในส่วนของการวิเคราะห์เชิงปริมาณของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง ได้มุ่งเน้นไปที่การเปรียบเทียบประสิทธิภาพแบบจำลองที่มีการวิเคราะห์ข้อมูลที่แตกต่างกันทั้งหมด 5 กลุ่ม ประกอบด้วย 1) Linear Models 2) Support Vector Machine 3) Naïve Bayes 4) Decision Trees และ 5) Ensemble Methods จากแบบประเภทของแบบจำลองทั้งหมดประกอบด้วยทั้งหมด 18 แบบจำลอง แสดงในตารางที่ 1

ตารางที่ 1 รายชื่อแบบจำลองโมเดลทั้งหมด 18 โมเดลที่ใช้ในการวิเคราะห์เชิงปริมาณ

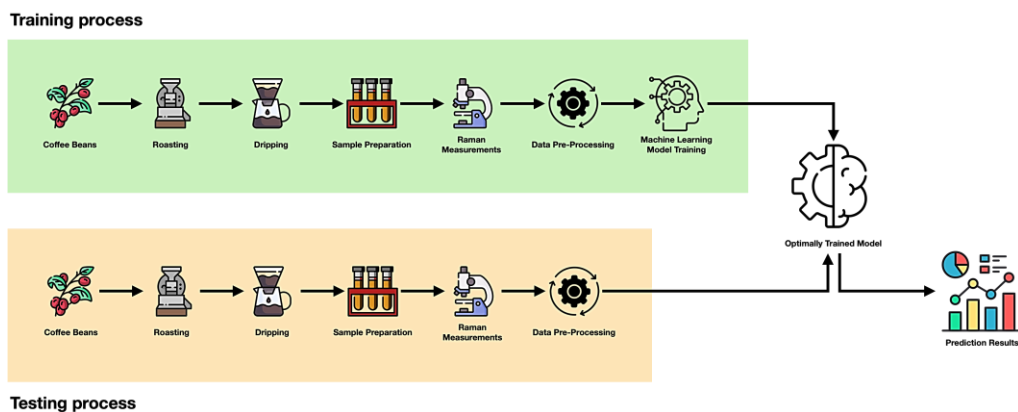
No.	Model
1.	Linear Regression
2.	Ridge Regression
3.	Gradient Boosting Regression
4.	Light Gradient Boosting Machine (Light GBM)
5.	Extreme Gradient Boosting
6.	Lasso Regression
7.	Lasso Least Angle Regression (LARS)
8.	Random Forest Regression
9.	Extra Trees Regression
10.	Decision Tree Regression

11.	AdaBoost Regression
12.	K Neighbors Regression
13.	Dummy Regression:
14.	Bayesian Ridge
15.	Elastic Net
16.	Huber Regression
17.	Passive Aggressive Regressor
18.	Orthogonal Matching Pursuit (OMP)

3.5.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟจริงด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

1) การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมรามานโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ จากรูปที่ 33 ในงานวิจัยนี้เริ่มจากการแบ่งข้อมูลออกเป็น 2 ส่วน ดังนี้ ส่วนที่ 1 ข้อมูลส่วนที่ใช้ในกระบวนการฝึกสอนแบบจำลอง (Training Process) และส่วนที่ 2 ข้อมูลส่วนที่ใช้ในกระบวนการทดสอบแบบจำลอง (Testing Process) ได้มีการใช้ตัวอย่างในส่วนที่ 1 และส่วนที่ 2 จำนวน 27 และ 9 ตัวอย่างตามลำดับ หลังจากทำการแบ่งชุดข้อมูลออกเป็น 2 ชุด จากนั้นจึงทำขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสาร (Sample Preparation) ด้วยเทคนิค QuEChERS ดังที่ได้อธิบายไว้ใน 3.2.2 และทำการวัดสเปกตรัมเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี ดังที่ได้อธิบายไว้ใน 3.3.1 และทำการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้นดังที่ได้กล่าวไว้ใน 3.4 หลังจากที่ได้สเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น จากนั้นข้อมูลส่วนที่ 1 ข้อมูลส่วนที่ใช้ในกระบวนการฝึกสอนจะถูกป้อนให้แบบจำลองในการเรียนรู้เพื่อให้แบบจำลองได้เรียนรู้ถึงความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลความเข้มข้นของสัญญาณสเปกตรัมและระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟ และหลังจากที่แบบจำลองได้ถูกฝึกสอนจากนั้นจะนำข้อมูลในส่วนที่ 2 ใช้ในการทำนายระดับการคั่วของกาแฟ เพื่อทดสอบประสิทธิภาพแบบจำลอง



รูปที่ 33 ภาพรวมการทำงานของกระบวนการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมรามาน โดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ

โดยในงานวิจัยนี้ในส่วนของการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของสารวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง ได้มุ่งเน้นไปที่การเปรียบเทียบประสิทธิภาพแบบจำลองที่มีการวิเคราะห์ข้อมูลที่แตกต่างกันทั้งหมด 5 กลุ่มประกอบด้วย 1) Linear Models 2) Support Vector Machine 3) Naïve Bayes 4) Decision Trees และ 5) Ensemble Methods จากแบบประเภทของแบบจำลองทั้งหมดประกอบด้วยทั้งหมด 16 แบบจำลอง แสดงในตารางที่ 2

ตารางที่ 2 รายชื่อแบบจำลองโมเดลทั้งหมด 16 โมเดลที่ใช้ในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพ

No.	Model
1.	Logistic Regression
2.	K Neighbors Classifier
3.	Quadratic Discriminant Analysis
4.	Linear Discriminant Analysis
5.	Light Gradient Boosting Machine
6.	Naïve Bayes
7.	Extra Trees Classifier
8.	Cat Boost Classifier

9.	Gradient Boosting Classifier
10.	Extreme Gradient Boosting
11.	Decision Tree Classifier
12.	Random Forest Classifier
13.	Ada Boost Classifier
14.	Ridge Classifier
15.	Support Vector Machine Kernel
16.	Dummy Classifier

2) การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมรามานโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ โดยการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis: PCA) ที่ทำการแปลงระบบพิกัดข้อมูลสเปกตรัมให้โดยข้อมูลที่ถูกละเปลี่ยนจะไม่มีการเปลี่ยนแปลงจำนวนมิติของข้อมูล แต่จะมีการเรียงลำดับความสำคัญของข้อมูลจากมากไปน้อย กล่าวคือจำนวนองค์ประกอบหลัก (Principal Components: PCs) อันดับต้นจะมีความสำคัญ และความสามารถในการแสดงข้อมูลมากกว่าองค์ประกอบหลักอันดับท้าย โดยปกติในการจัดกลุ่มผู้ใช้จึงนิยมเลือกใช้ องค์ประกอบหลัก (Principle Components: PCs) ที่ 1 และ 2 เนื่องจากเป็นองค์ประกอบหลักที่มีความสำคัญและความสามารถในการแสดงข้อมูลได้สูงที่สุด ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงได้เลือกใช้ องค์ประกอบหลัก 2 อันดับแรกในการจัดกลุ่มระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟ

บทที่ 4

ผลการทดลองของงานวิจัย

ในบทนี้จะกล่าวถึงผลการทดลองและวิเคราะห์จากการพัฒนาการตรวจวัดสารที่สำคัญในพืชเศรษฐกิจด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีร่วมกับการผสมข้อมูล โดยในงานวิจัยนี้ได้แบ่งการวิเคราะห์ออกเป็น 3 ส่วนหลักได้แก่ 1. การวิเคราะห์การทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี 2. การวิเคราะห์เชิงปริมาณของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี และ 3. การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

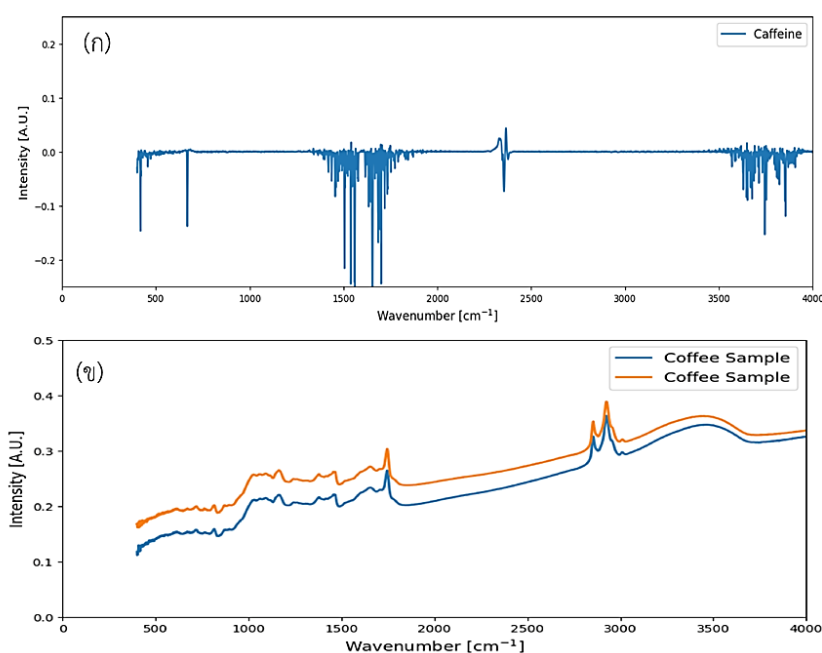
4.1 การวิเคราะห์ทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี

การวิเคราะห์ผลการทดลองวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีด้วยเทคนิคที่ต่างกัน โดยในงานวิจัยส่วนนี้จะเป็นการวัดสารประกอบกาแฟโดยใช้สารมาตรฐานและตัวอย่างกาแฟจริง เพื่อศึกษาถึงความเป็นไปได้ในที่จะพัฒนาต่อยอดการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีเพื่อนำชุดข้อมูลที่ได้จากการวัดมาทำการวิเคราะห์โดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องโดยประกอบด้วยทั้งหมด 3 เทคนิค ได้แก่ 1) เทคนิคฟูเรียร์อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี 2) เทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไมโดเมนสเปกโทรสโกปี และ 3) เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี

4.1.1. เทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy)

จากรูปที่ 34(ก) แสดงถึงตัวอย่างการวัดสัญญาณของสารคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐานด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในย่านความถี่อินฟราเรดกลาง (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FTIR Mid-IR) จากรูปแสดงให้เห็นว่าไม่สามารถวัดสารตัวอย่างได้ บ่งบอกถึงความท้าทายในการวัดสารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคดังกล่าวเนื่องจากกาแฟประกอบด้วยองค์ประกอบของสารเคมีมากกว่า 1000 ชนิด จึงแสดงถึงความเป็นไปได้ยากในการวัดตัวอย่างกาแฟโดยเทคนิคดังกล่าวสัญญาณสารดังกล่าว จึงไม่ได้ทำการวัดสารตัวอย่างมาตรฐานของสารคลอโรจีนิก

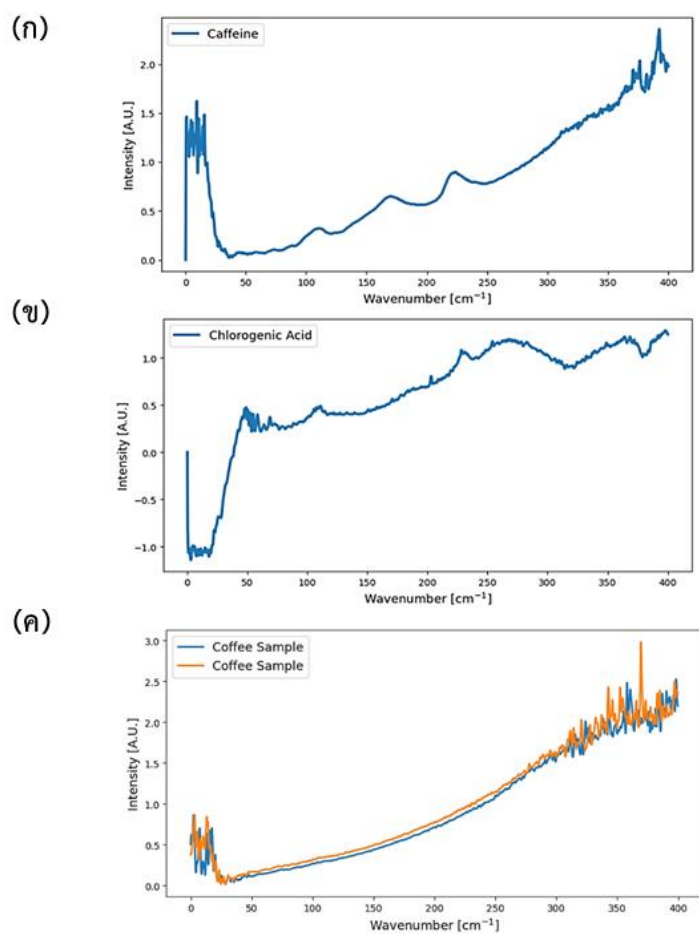
จากรูปที่ 34(ข) ยังแสดงถึงตัวอย่างการวัดสัญญาณของตัวอย่างกาแฟจริงด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในย่านความถี่อินฟราเรดกลาง จากรูปแสดงให้เห็นถึงการวัดตัวอย่างกาแฟที่ไม่มีสัญญาณความถี่ในย่านความถี่อินฟราเรดกลาง ซึ่งแสดงถึงความเป็นไปได้ยากในการวิเคราะห์สารสำคัญในตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในย่านความถี่อินฟราเรดกลาง



รูปที่ 34 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิค FT-IR ย่านอินฟราเรดกลาง (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมจากตัวอย่างกาแฟจริงเดียวกันในรอบการวัดที่แตกต่างกัน

รูปที่ 35 แสดงตัวอย่างสเปกตรัมที่ได้จากการวัดสัญญาณของสารมาตรฐาน โดยรูปที่ 35(ก) แสดงสเปกตรัมของสารคาเฟอีน และรูปที่ 35(ข) แสดงสเปกตรัมของกรดคลอโรจีนิก ซึ่งวัดด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในช่วงความถี่อินฟราเรดไกล (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FTIR Far-IR) จากรูปแสดงให้เห็นถึงสเปกตรัมที่ไม่สามารถตรวจวัดสารตัวอย่างที่เป็นสารมาตรฐานได้ ดังนั้นจึงส่งผลให้ไม่สามารถตรวจวัดตัวอย่างกาแฟจริงด้วยเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีในช่วงความถี่อินฟราเรดไกลได้ เนื่องจากไม่สามารถตรวจวัดสัญญาณด้วยตัวอย่างมาตรฐานได้ และในตัวอย่างกาแฟประกอบด้วยสารประกอบเคมีมากกว่า 1000 ชนิด จึงอาจทำให้เกิดการซ้อนทับกันของสัญญาณจุดยอด ทำให้เกิดความแปรปรวนของสัญญาณ นอกจากนี้กาแฟเป็นตัวอย่างที่มีความไวต่ออากาศและระยะเวลาในการตรวจวัดตัวอย่างเดิมแต่วัดซ้ำที่เวลาต่างกันทำให้ได้ผลลัพธ์ที่แตกต่างกัน แสดงดังรูปที่ 35(ค) ดังนั้นจึงจำเป็นต้องใช้เทคนิคการเตรียมตัวอย่างขั้นสูง แต่วิธีการดังกล่าวทำให้สารที่สกัดแล้วอยู่ในสถานะของเหลว ดังนั้นการวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีจึงมีความเป็นไปได้ยากในการต่อยอดเพื่อพัฒนาการวิเคราะห์ทั้งเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณในตัวอย่างกาแฟโดยใช้สเปกตรัมจากเทคนิคดังกล่าว

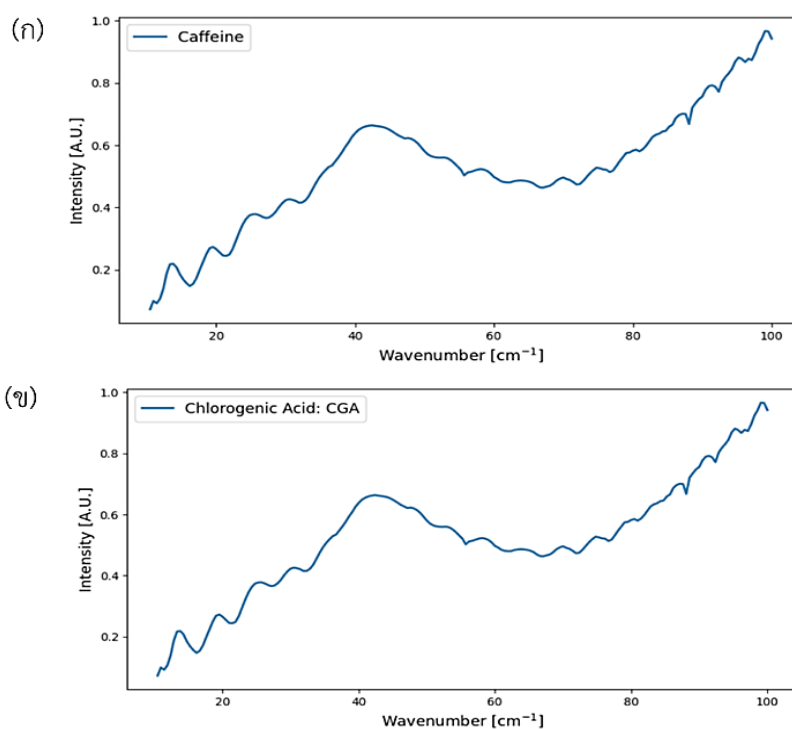




รูปที่ 35 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิค FT-IR ย่านอินฟราเรดไกล (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมกรดคลอโรจีนิกโดยใช้สารมาตรฐาน (ค) ตัวอย่างการวัดสัญญาณซ้ำของตัวอย่างกาแฟจริงจากตัวอย่างเดิมในเวลาที่แตกต่างกัน

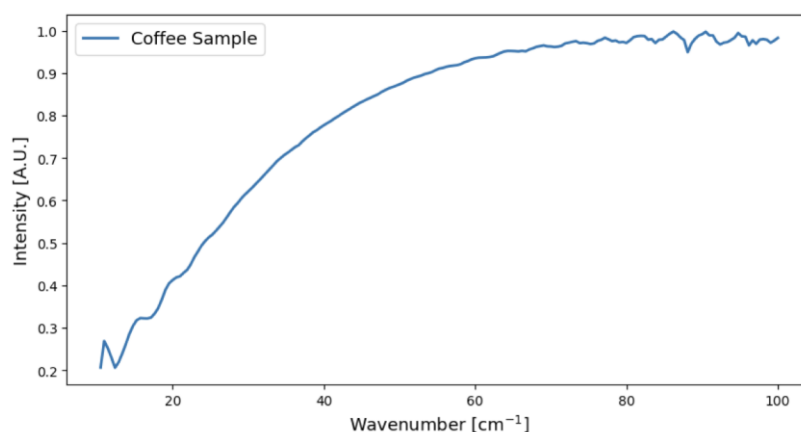
4.1.2 เทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy)

จากรูปที่ 36 แสดงตัวอย่างสเปกตรัมที่ได้จากการวัดสัญญาณของสารมาตรฐาน โดยรูปที่ 37(ก) สารคาเฟอีนมาตรฐาน และรูปที่ 37(ข) คลอโรจีนิกมาตรฐาน ด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy; THz-TDS) จากรูปแสดงให้เห็นถึงสเปกตรัมที่ไม่สามารถตรวจวัดสารตัวอย่างที่เป็นสารมาตรฐานได้ เนื่องจากตัวอย่างกาแฟประกอบด้วยสารประกอบเคมีมากกว่า 1000 ชนิด จึงอาจทำให้เกิดการซ้อนทับกันของสัญญาณจุดยอด ทำให้เกิดความแปรปรวนของสัญญาณ ดังนั้นจึงส่งผลให้ไม่สามารถตรวจวัดตัวอย่างกาแฟจริงด้วยเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี



รูปที่ 36 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิค THz-TDS (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน
(ข) สเปกตรัมกรดคลอโรจีนิกโดยใช้สารมาตรฐาน

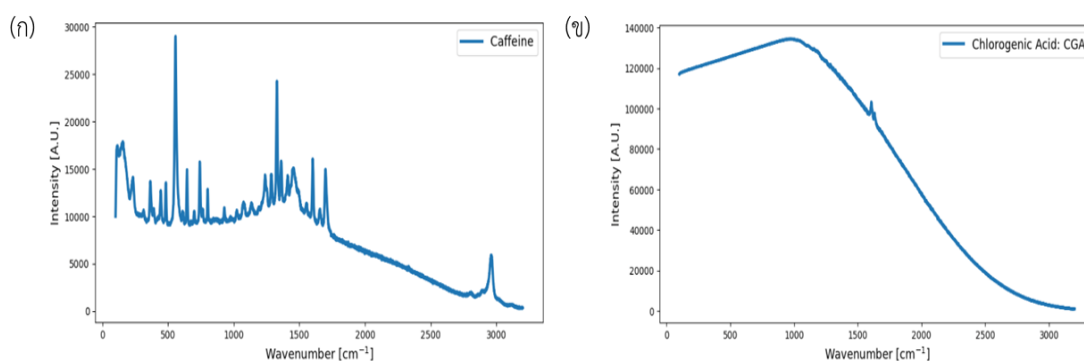
แสดงดังรูปที่ 37 แต่อย่างไรก็ตามลักษณะสัญญาณมีลักษณะของสัญญาณเป็นลูกคลื่นคล้ายกับจุดยอด เนื่องจากการเกิดปรากฏการณ์ Etalon ที่เกิดจากการที่แสงเกิดการสะท้อนไปกลับภายในตัวอย่างทำให้สัญญาณในย่านความถี่เทราเฮิรตซ์มีลักษณะเป็นลูกคลื่น



รูปที่ 37 ตัวอย่างการวัดสัญญาณของตัวอย่างกาแฟจริง โดยใช้เทคนิค THZ-TDS

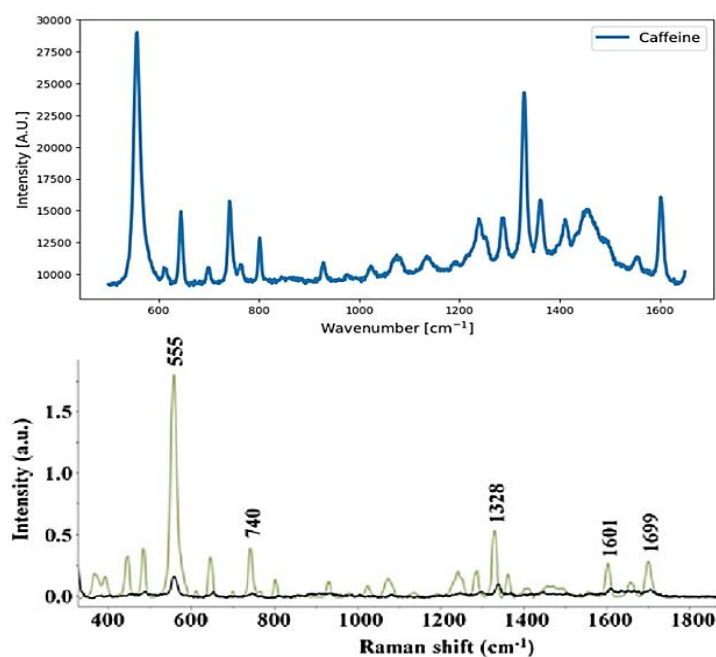
4.1.3 เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy)

จากรูป 38 แสดงถึงตัวอย่างการวัดสัญญาณสารคาเฟอีน และกรดคลอโรจินิกมาตรฐานด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี พบว่าเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีไม่สามารถตรวจวัดสัญญาณรามานของกรดคลอโรจินิกได้ เนื่องจากกรดคลอโรจินิกมีความสามารถในการดูดกลืนแสงที่สูงทำให้การกระเจิงแสงเกิดขึ้นได้ยาก แต่อย่างไรก็ตามการวัดสเปกตรัมด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีสามารถวัดสัญญาณรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานได้



รูปที่ 38 ตัวอย่างการวัดสัญญาณด้วยเทคนิครามาน (ก) สเปกตรัมคาเฟอีนโดยใช้สารมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมกรดคลอโรจินิกโดยใช้สารมาตรฐาน

รูปที่ 39(ก-ข) แสดงสัญญาณรามานที่เด่นของสารคาเฟอีนที่สามารถตรวจวัดได้มีลักษณะคล้ายกับงานวิจัยที่ได้มีการศึกษาและตรวจวัดสารคาเฟอีนมาตรฐานซึ่งอยู่บริเวณความถี่ 550 ถึง 1650 cm^{-1} ซึ่งจากการทดลองดังกล่าวแสดงให้เห็นถึงความเป็นไปได้ในการตรวจวัดสารคาเฟอีนในตัวอย่างกาแฟ ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงมุ่งเน้นไปที่การพัฒนาการวิเคราะห์เชิงปริมาณและเชิงคุณภาพของสารคาเฟอีนในตัวอย่างกาแฟโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี



รูปที่ 39 สัญญาณรามานที่เด่นของสารคาเฟอีนที่สามารถตรวจวัดได้มีลักษณะคล้ายกับงานวิจัยที่ได้มีการศึกษาและตรวจวัดสารคาเฟอีนมาตรฐาน

4.2 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

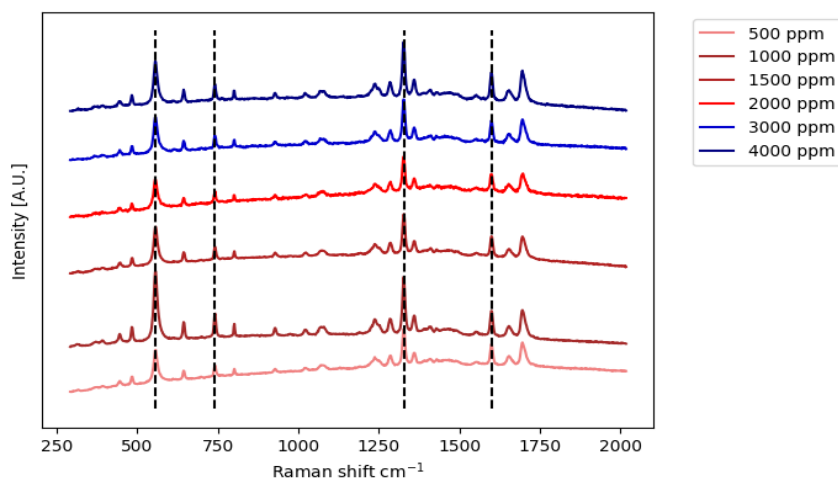
จากขั้นตอนกระบวนการวิเคราะห์เชิงปริมาณของข้อมูลการวัดสเปกตรัมสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีในบทที่ 3.5.2 งานวิจัยในส่วนนี้ได้ใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) ในการวัดสารคาเฟอีนมาตรฐาน เนื่องจากเรื่องข้อจำกัดของความสามารถในการเก็บข้อมูลในของเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy: FTIR) และเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy) ที่สามารถเก็บข้อมูลในสถานะของเหลวได้ แต่ในการวัดสารตัวอย่างที่อยู่ในสถานะของเหลวจำเป็นต้องใช้อุปกรณ์เพิ่ม (Liquid Cells) และไม่สามารถใช้ร่วมกับสารเคมีบางชนิดในการเตรียมตัวอย่างสารได้ โดยงานวิจัยในส่วนนี้จึงมุ่งเน้นการเก็บข้อมูลสเปกตรัมของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความเข้มข้นแตกต่างกัน โดยมีปริมาณ 500, 1000, 1500, 2000, 3000, และ 4000 มิลลิกรัมต่อลิตร (ppm) ซึ่งเป็นปริมาณคาเฟอีนที่สามารถพบในกาแฟที่ใช้บริโภคกันในชีวิตประจำวันหลังจากนั้นจึงนำสเปกตรัมเหล่านั้นผ่านกระบวนการการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) และวิเคราะห์ปริมาณสารคาเฟอีนมาตรฐานโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

4.2.1 ผลจากการวัดสัญญาณสเปกตรัมรามาน (Raman Measurements)

จากรูปที่ 40 แสดงตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความเข้มข้นแตกต่างกัน โดยไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น จากรูปสังเกตได้ว่าสเปกตรัมของสารคาเฟอีนมาตรฐานนั้นจะมีลักษณะของสัญญาณรามานใกล้เคียงกับสเปกตรัมของคาเฟอีน [46] นอกจากนั้นสัญญาณสเปกตรัมยังมีลักษณะของสัญญาณที่เหมือนกันในทุกความเข้มข้น และความเข้มข้นของสัญญาณรามานไม่แสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของปริมาณสารคาเฟอีนมาตรฐานและค่าความเข้มของสัญญาณรามานที่วัดได้ในรูปแบบของความสัมพันธ์เชิงเส้น

นอกจากนี้สเปกตรัมที่วัดได้ยังมีข้อบกพร่องที่เกิดจากการวัดตัวอย่าง เช่นระดับเส้นฐานที่แตกต่างกัน เนื่องจากตำแหน่งการวัดที่แตกต่างกัน ส่งผลให้สเปกตรัมรามานที่วัดได้ ทำให้ความเข้มข้นของสเปกตรัมเกิดความคลาดเคลื่อน และทำให้การนำชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานที่วัดไปใช้ใน

การวิเคราะห์เชิงปริมาณไม่มีประสิทธิภาพ ดังนั้นจึงต้องทำการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing)



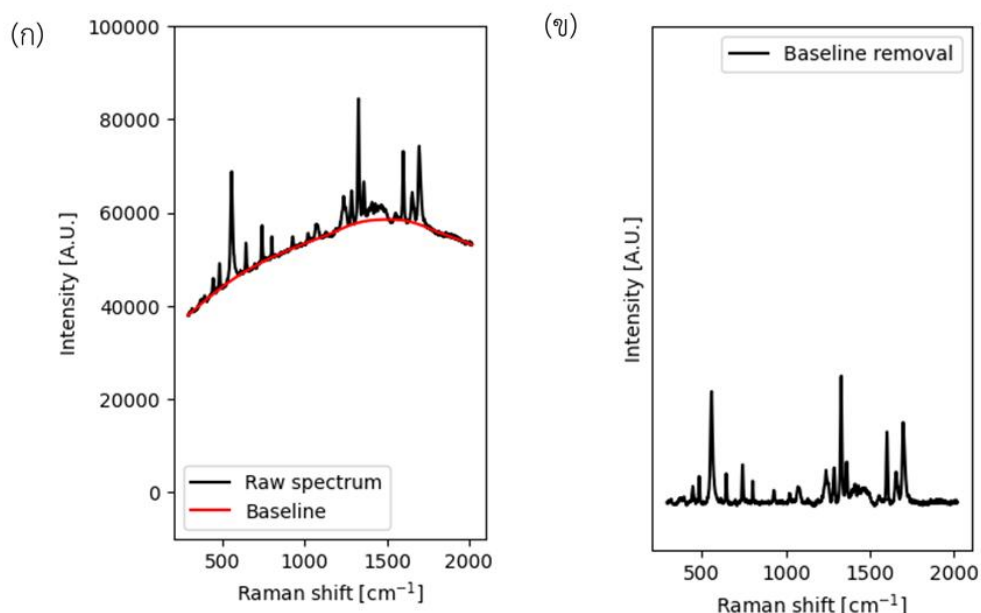
รูปที่ 40 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความเข้มข้นแตกต่างกันที่ไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น



4.2.2 ผลการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing)

1) การปรับฐานของสเปกตรัม (Baseline Removal)

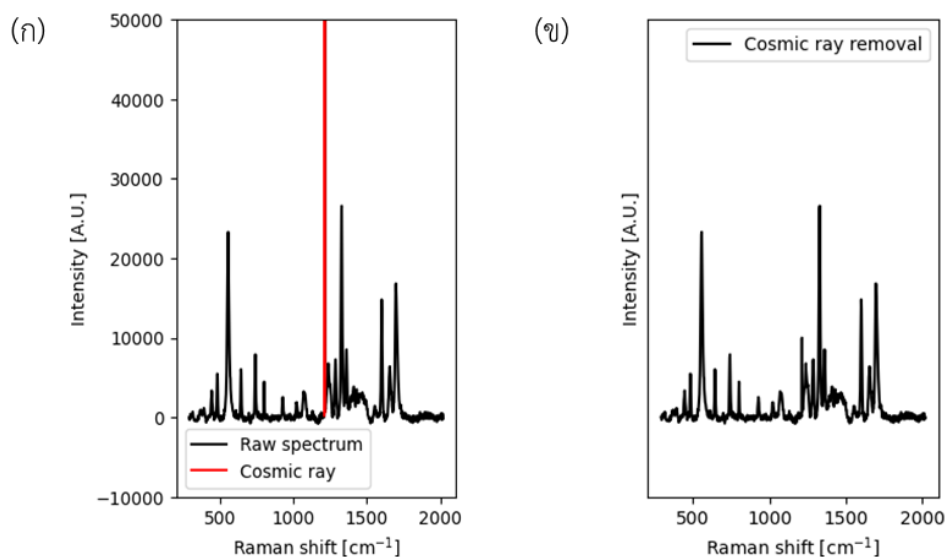
ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน แสดงในรูปที่ 41(ก) จากรูปแสดงให้เห็นว่าสเปกตรัมมีรูปแบบและระดับของเส้นฐานที่ต่างกัน ซึ่งระดับฐานที่ยกสูงขึ้นเกิดจากสัญญาณพื้นหลังที่มาเกิดจากผลจากการกระเจิงแสง และความถี่ที่สูงขึ้นส่งผลให้ระดับของสัญญาณพื้นหลังสูงขึ้น รูปที่ 41(ข) แสดงตัวอย่างของสเปกตรัมที่วัดจากรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ผ่านกระบวนการปรับระดับของฐานแล้ว ทำให้ฐานของสเปกตรัมทั้งหมดอยู่ในระดับที่ใกล้เคียงกัน



รูปที่ 41 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมมีรูปแบบและระดับของเส้นฐานที่ต่างกัน (ข) สเปกตรัมที่ผ่านกระบวนการปรับระดับของฐานแล้ว

2) การลบรังสีคอสมิก (Cosmic Ray Removal)

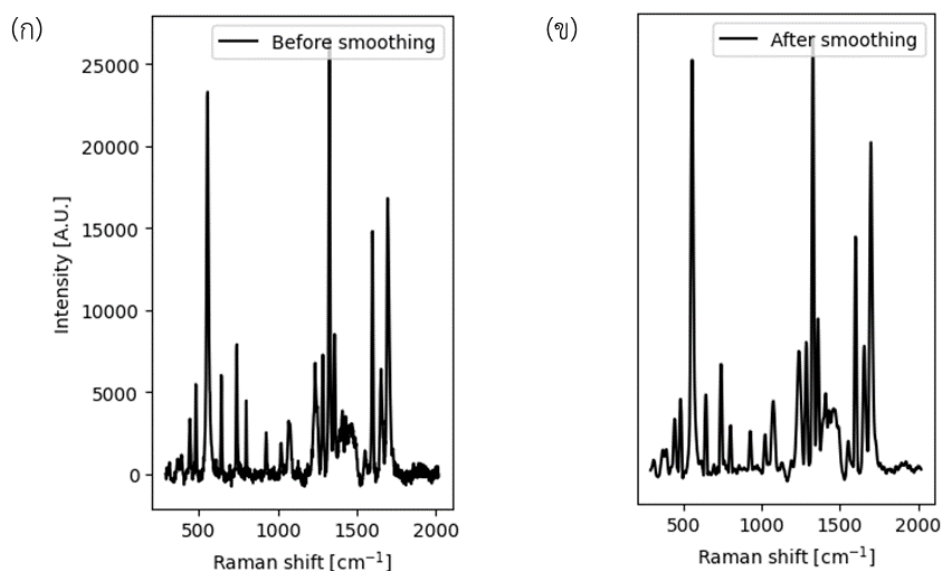
ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่เกิดปรากฏการณ์รังสีคอสมิกแสดงในรูปที่ 42(ก) เนื่องจาก CCD detector มีความไวต่อรังสีคอสมิก จึงทำให้เกิดการพุ่งขึ้นของสัญญาณอย่างรวดเร็ว ทำให้สเปกตรัมในบางตำแหน่งจะปรากฏให้เห็นถึงค่าสัญญาณที่สูงผิดปกติหรือ (Spikes) ซึ่งมีลักษณะคล้ายกับจุดยอด (Peaks) ของสัญญาณรามาน แต่มีขนาดแคบกว่าจุดยอดของสัญญาณรามาน รูปที่ 42(ข) แสดงตัวอย่างของสัญญาณรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ทำการลบปรากฏการณ์รังสีคอสมิก จากรูปแสดงให้เห็นว่า Spikes จะถูกแทนที่ด้วยค่าเฉลี่ยของสัญญาณในระยะหน้าต่าง (Window Size) ที่กำหนดไว้



รูปที่ 42 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมมีเกิดปรากฏการณ์รังสีคอสมิก (ข) สเปกตรัมที่ทำการลบปรากฏการณ์รังสีคอสมิก

3) การปรับสัญญาณให้เรียบ (Signal Smoothing)

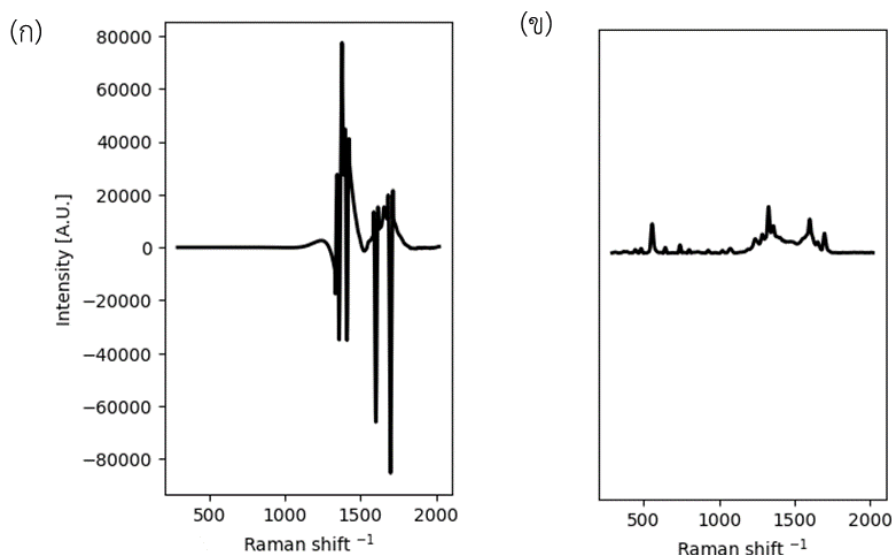
ตัวอย่างสเปกตรัมของสารคาเฟอีนมาตรฐานก่อนปรับสัญญาณให้เรียบแสดงในรูปที่ 43(ก) สังเกตได้ว่าสเปกตรัมมีค่าสัญญาณรบกวนที่สูง (Noise Signal) เนื่องจากข้อบกพร่องจากอุปกรณ์การวัดสัญญาณ รูปที่ 43(ข) แสดงสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ผ่านกระบวนการปรับสัญญาณให้เรียบ โดยใช้อัลกอริทึม Savitzky and Golay Smoothing ซึ่งหลังจากผ่านกระบวนการปรับสัญญาณให้เรียบสังเกตได้ว่าสเปกตรัมมีสัญญาณรบกวนที่ลดลง และความแปรปรวนของสัญญาณ (Oscillation) ที่น้อยลงอย่างชัดเจน



รูปที่ 43 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมมีค่าสัญญาณรบกวนที่สูง
(ข) สเปกตรัมผ่านกระบวนการปรับสัญญาณให้เรียบ

4) การกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (Outlier Removal)

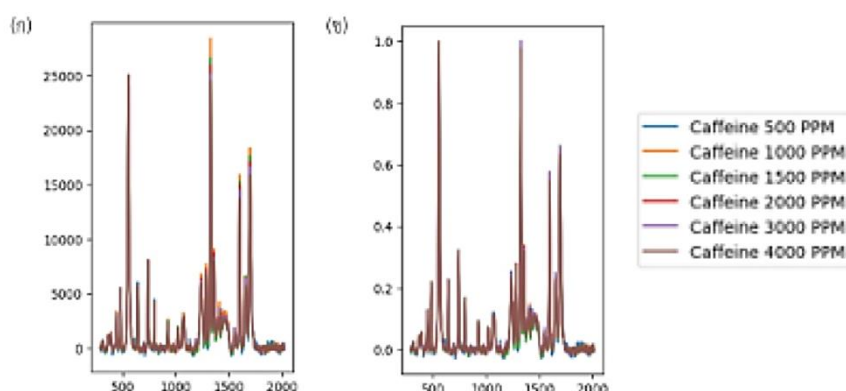
ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีค่าสัญญาณรบกวนสูงกว่าเกณฑ์แสดงในรูปที่ 44(ก) ซึ่งเกิดจากตัวอย่างที่มีความไม่เนื้อเดียวกัน (Heterogeneous) ทำให้อาจเกิดการเลือกตำแหน่งการวัดที่ไม่เหมาะสม และทำให้สัญญาณรามานที่วัดได้ไม่แสดงถึงคุณลักษณะที่ควรจะเป็นของสัญญาณรามานที่แท้จริงของสารคาเฟอีนมาตรฐาน นอกจากนั้นยังอาจเกิดจากข้อบกพร่องของการวัด รูปที่ 44(ข) แสดงตัวอย่างการลบสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ผิดปกติออกจากชุดข้อมูลเพื่อเพิ่มคุณภาพให้แก่ชุดข้อมูล และทำให้ชุดข้อมูลปราศจากสเปกตรัมรามานที่มีสัญญาณรบกวนสูงกว่าเกณฑ์ นอกจากนั้นยังทำการกำจัดข้อมูลที่ไม่แสดงถึงคุณลักษณะที่ควรจะเป็นของสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน



รูปที่ 44 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) สเปกตรัมที่มีค่าสัญญาณรบกวนสูงกว่าเกณฑ์ (ข) สเปกตรัมที่มีค่าความเข้มสัญญาณปกติ และแสดงจุดยอดของสัญญาณได้ถูกต้อง

5) การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (Normalization)

ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานก่อนการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน แสดงในรูปที่ 45(ก) จากรูปสังเกตได้ว่าสำหรับตัวอย่างที่แตกต่างกันแต่มีความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐานเท่ากัน แต่ความเข้มของสัญญาณสเปกตรัมที่วัดได้แตกต่างกัน ส่งผลให้ไม่สามารถนำค่าสัญญาณวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ใช้ความเข้มของสัญญาณได้ เนื่องจากชุดข้อมูลมีความแปรปรวนสูง รูปที่ 45(ข) แสดงตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ผ่านการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน ซึ่งสังเกตได้ว่าทุกสเปกตรัมจะมีค่าความเข้มสัญญาณอยู่ในช่วง 0 ถึง 1 A.U. และจุดยอดของสัญญาณที่มีค่าความเข้มสัญญาณสูงที่สุดอยู่ในตำแหน่งเดียวกันในทุกสเปกตรัมเสมอ ทำให้สามารถนำสเปกตรัมที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณไปใช้วิเคราะห์เชิงปริมาณต่อไป

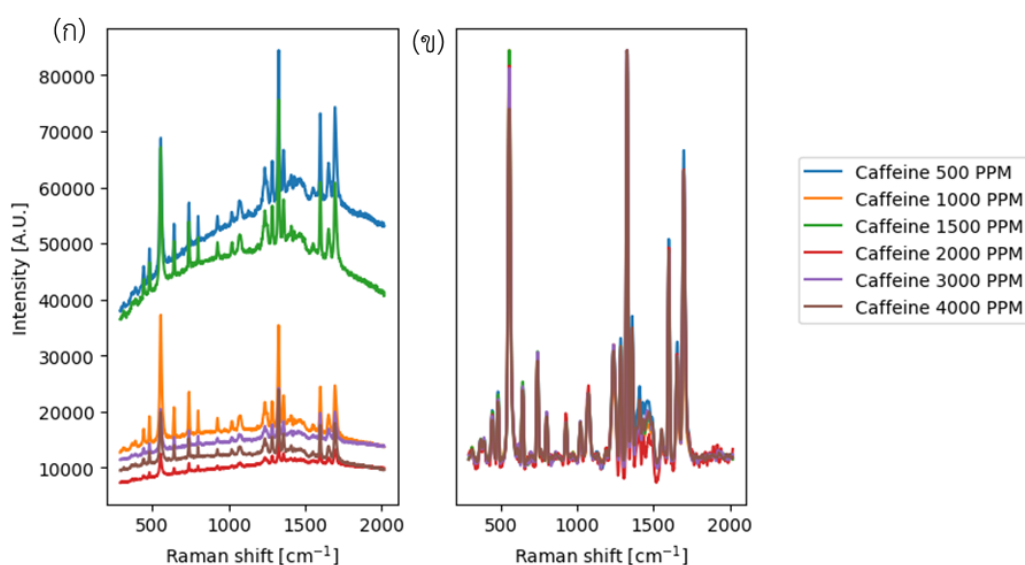


รูปที่ 45 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน (ก) ก่อนทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน

(ข) สเปกตรัมที่ผ่านกระบวนการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน

ผลลัพธ์สุดท้ายจากการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น

ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น แสดงในรูปที่ 46(ก) แสดงตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ความเข้มข้น 500, 1000, 1500, 2000, 3000, และ 4000 ppm ก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น โดยสเปกตรัมของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ความเข้มข้นแตกต่างกัน แสดงถึงรูปแบบและระดับฐานของสัญญาณรามานที่แตกต่างกัน เนื่องจากผลจากปัจจัยรบกวนที่เกิดจากหลากหลายสาเหตุ ที่ได้กล่าวในบทที่ 2 จึงทำให้ไม่สามารถนำชุดข้อมูลสเปกตรัมนี้มาทำการวิเคราะห์ปริมาณได้ ดังนั้นจึงต้องใช้เทคนิคการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นเพื่อลดข้อผิดพลาดของสัญญาณที่เกิดจากการวัด สิ่งรบกวน และข้อมูลที่ไม่เกี่ยวข้องออกจากข้อมูลสเปกตรัม ซึ่งหลังจากการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมแล้วทำให้สเปกตรัมรามานมีความคล้ายคลึงกันมากขึ้น ดังแสดงในรูปที่ 46(ข)



รูปที่ 46 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานในความเข้มข้นต่างๆ (ก) ก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (ข) หลังการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น

4.2.3 การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Quantitative Analysis of Standard Caffeine Samples using Machine Learning)

ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่ได้จากการวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีทั้งหมด 1200 สเปกตรัม หลังจากผ่านการประมวลผลสัญญาณล่วงหน้าทำให้สเปกตรัมรามานเหลือ 1086 โดยมีจำนวนสเปกตรัมที่ความเข้มข้น 500, 1000, 1500, 2000, 3000, และ 4000 ppm จำนวน 150, 193, 185, 189, 184, และ 185 สเปกตรัม ตามลำดับ จะถูกนำมาแบ่งเป็นชุดข้อมูลการฝึกสอน (Training Set) และชุดข้อมูลการตรวจสอบ (Validation Set) จำนวนร้อยละ 80 และ 20 ของแต่ละความเข้มข้น ตามลำดับ หลังจากนั้นจึงใช้กระบวนการเรียนรู้ของเครื่องเพื่อสร้างแบบจำลองในการวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐาน โดยงานวิจัยนี้ได้ทดลองเปรียบเทียบประสิทธิภาพแบบจำลองทั้งหมด 18 แบบจำลอง เพื่อเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐาน ตารางที่ 5 และ ตารางที่ 6 แสดงผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของทั้ง 18 แบบจำลอง แบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุดในการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐานของชุดข้อมูลที่ไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น คือ Random Forest Regressor โดยมีค่าเฉลี่ยความผิดพลาดสมบูรณ์ (MAE) ค่ารากที่สองเฉลี่ยสมบูรณ์ (RMSE) และค่าสัมประสิทธิ์ตัดสินใจพหุคูณ (R^2) อยู่ที่ 822.76 ppm, 1031.16 ppm และ 0.16 ตามลำดับ และแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุดในการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐานของชุดข้อมูลที่ผ่านมากระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น คือ Extra Trees Regressor โดยมีค่าเฉลี่ยความผิดพลาดสมบูรณ์ (MAE) ค่ารากที่สองเฉลี่ยสมบูรณ์ (RMSE) และค่าสัมประสิทธิ์ตัดสินใจพหุคูณ (R^2) อยู่ที่ 710 ppm, 914.05 ppm และ 0.34 ตามลำดับ จากประสิทธิภาพการทำนายของแบบจำลองที่ข้อมูลสเปกตรัมรามานโดยไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นและผ่านการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น แสดงให้เห็นถึง การประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นสามารถเพิ่มประสิทธิภาพให้แบบจำลองที่ถูกฝึกอบรมในการทำนายปริมาณสารคาเฟอีนมาตรฐานสูงกว่าแบบจำลองที่ชุดข้อมูลไม่ผ่านการประมวลผลเบื้องต้น

ตารางที่ 2 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลก่อนการประมวลผล
สัญญาณเบื้องต้น

Model	MAE	RMSE	R ²
Random Forest Regressor	822.76	1031.16	0.16
Extra Trees Regressor	818.86	1064.70	0.10
Gradient Boosting Regressor	861.81	1067.36	0.10
Light GBM	861.43	1092.33	0.07
AdaBoost Regressor	958.50	1098.67	0.05
K Neighbors Regressor	882.18	1106.50	0.03
Extreme Gradient Boosting	873.36	1126.40	0.00
Dummy Regressor	986.50	1168.31	-0.06
Decision Tree Regressor	986.50	1168.31	-0.45
Lasso Regression	943.47	1357.51	-4.09
Elastic Net	1008.40	1736.23	-4.09
Huber Regressor	1493.61	2525.65	-7.25
Bayesian Ridge	1042.96	2116.54	-9.71
Passive Aggressive Regressor	2048.47	3165.99	-12.47
Lasso Least Angle Regression	1103.52	2326.52	-14.37
Ridge Regression	1788.87	6651.25	-127.00

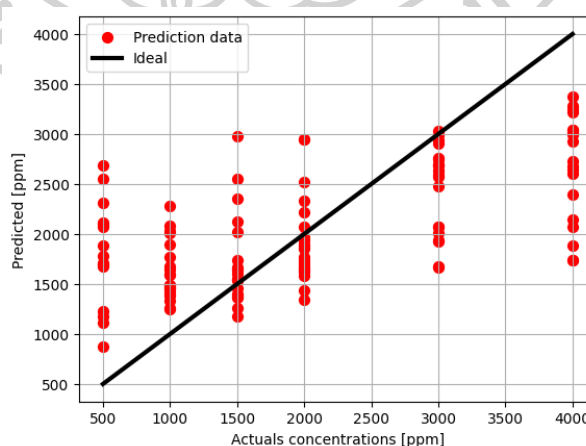
Linear Regression	2859.01	11522.9	-406.47
Orthogonal Matching Pursuit	2944.78	12400.6	-555.91

ตารางที่ 3 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลที่ผ่านการประมวลผล
สัญญาณเบื้องต้น

Model	MAE	RMSE	R ²
Extra Trees Regressor	710.40	914.05	0.3479
Gradient Boosting Regressor	712.10	919.37	0.3376
Light GBM	715.52	924.69	0.3288
Random Forest Regressor	724.37	930.69	0.3238
AdaBoost Regressor	754.58	937.86	0.3103
K Neighbors Regressor	763.39	954.10	0.2861
Elastic Net	949.10	1120.61	0.027
Passive Aggressive Regressor	921.70	1146.74	-0.0182
Dummy Regressor	986.50	1168.32	-0.0617
Ridge Regression	876.68	1165.93	-0.2112
Decision Tree Regressor	930.78	1311.16	-0.3867
Lasso Regression	905.52	1239.66	-0.4791
Lasso Least Angle Regression	905.91	1240.63	-0.4814
Bayesian Ridge	901.84	1315.71	-0.8395
Huber Regressor	895.91	1423.75	-1.3927

Orthogonal Matching Pursuit	1793.18	4164.81	-24.93
Linear Regression	13977	37375.8	-1965
Lasso Least Angle Regression	168898	535077	-11340

รูปที่ 47 แสดงการวิเคราะห์ผลการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐาน เพื่อแสดงถึงภาพรวมความผิดพลาดของผลการทำนายปริมาณความเข้มข้นของสารคาเฟอีนจากสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานในชุดข้อมูลทดสอบ (Testing Set) จำนวน 178 สเปกตรัม ณ ค่าความเข้มข้นที่แตกต่างกันโดยใช้แบบจำลอง Extra Tree Regressor เนื่องจากแบบจำลอง Extra Tree Regressor เป็นแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงที่สุดในการทำนายปริมาณของสเปกตรัมสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น จากรูปแสดงให้เห็นว่า ค่าความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่มีความเข้มข้นอยู่ในช่วง 1500 ถึง 3000 ppm เป็นช่วงความเข้มข้นที่แบบจำลองมีแนวโน้มในการทำนายได้ แต่อย่างไรก็ตามในการทำนายเชิงปริมาณโดยใช้ชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐานยังมีความท้าทายอยู่ จากผลประสิทธิภาพการทำนายในตารางที่ 5 และตารางที่ 6 ซึ่งแสดงถึงความผิดพลาดของแบบจำลองที่สูง แม้สเปกตรัมผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น



รูปที่ 47 การวิเคราะห์ผลการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐาน เพื่อแสดงภาพรวมความคลาดเคลื่อนในการทำนายปริมาณความเข้มข้นของสารคาเฟอีนจากสเปกตรัมรามานในชุดข้อมูลทดสอบ (Testing Set)

4.3 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

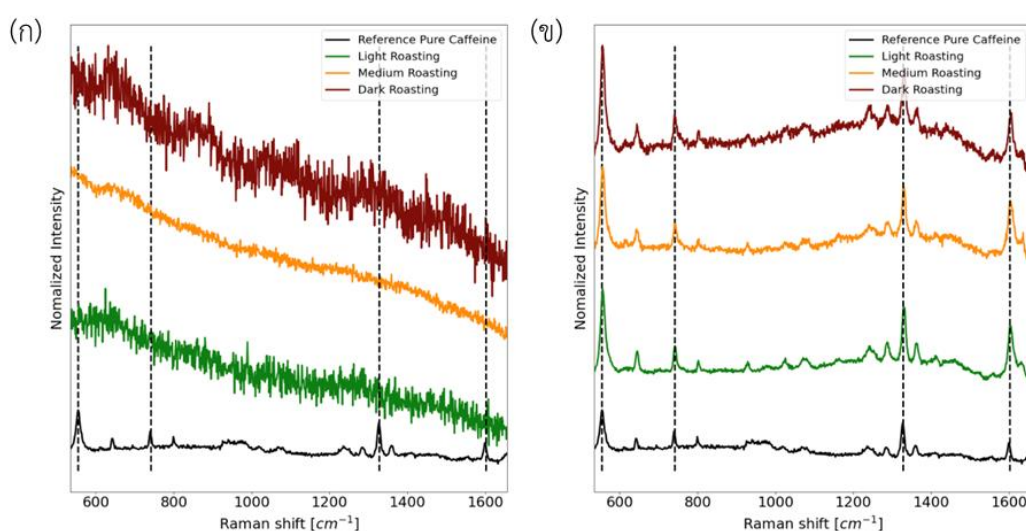
จากผลการทดลองการวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ได้ทำการทดลองในหัวข้อที่ 4.2 จึงทำให้เห็นถึงช่องทางการพัฒนาจากการเก็บข้อมูลด้วยสารคาเฟอีนมาตรฐานเป็นการเก็บข้อมูลจากตัวอย่างกาแฟจริง จึงทำให้เกิดเป็นการทดลองในส่วนที่นี้เป็นารเริ่มต้นด้วยการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลการวัดเชิงแสงด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี จากขั้นตอนกระบวนการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีในบทที่ 3.5.3 งานวิจัยในส่วนนี้ได้ใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) ในการสารตัวอย่างกาแฟจริง ที่ผ่านกระบวนการเตรียมตัวอย่าง (Sample Preparation) ด้วยเทคนิค QuEChERS โดยในการทดลองนี้จึงได้มุ่งเน้นไปที่การเก็บข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันทั้งหมด 3 ระดับการคั่ว ได้แก่ ระดับการคั่วอ่อน, ระดับการคั่วกลาง, และระดับการคั่วเข้ม ซึ่งเป็นระดับการคั่วที่ผู้บริโภคนิยมบริโภคกันในชีวิตประจำวัน แต่สามารถจำแนกเพื่อเลือกวิธีการชงที่แตกต่างกัน หลังจากนั้นจึงนำสเปกตรัมที่ผ่านกระบวนการเตรียมตัวอย่างสารมาทำกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) และการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

4.3.1 ผลจากการวัดสัญญาณสเปกตรัมรามาน (Raman Measurements)

จากรูปที่ 48(ก) แสดงตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกัน ได้แก่ ระดับการคั่วอ่อน, ระดับการคั่วกลาง, และระดับการคั่วเข้ม ที่ใช้วิธีการสกัดโดยการรตริบ โดยไม่ผ่านกระบวนการเตรียมตัวอย่างสารด้วยเทคนิค QuEChERS และกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) เทียบกับสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน แสดงให้เห็นว่าไม่สามารถพบสัญญาณรามานสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟที่นำมาทดสอบในทุกๆระดับการคั่ว โดยที่สาเหตุอาจจะเกิดได้จากส่วนองค์ประกอบหลัก ได้แก่ 1. ตัวอย่างกาแฟมีองค์ประกอบของสารประกอบเคมีที่มากกว่า 1000 ชนิด ซึ่งในแต่ละชนิดจะมีข้อมูลคุณลักษณะและรูปแบบจุดยอดที่แตกต่างกัน จึงอาจทำให้เกิดการทับซ้อนกันของสัญญาณ และ 2. ตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการชงมีความเข้มข้นของสีที่สูงจึงทำให้เกิดปรากฏการณ์เรืองแสง (fluorescence) รูปที่ 48(ข) แสดงสัญญาณรามานของตัวอย่างกาแฟแต่ละระดับการคั่วที่ผ่านกระบวนการเตรียมตัวอย่าง

(Sample Preparation) ด้วยเทคนิค QuEChERs พบว่าสามารถตรวจวัดสัญญาณรบกวนที่สอดคล้องกับสัญญาณรบกวนของสารคาเฟอีนมาตรฐานได้อย่างชัดเจน

อย่างไรก็ตามสเปกตรัมรามานที่วัดได้ยังมีข้อบกพร่องที่เกิดจากการวัดตัวอย่าง เช่นระดับเส้นฐานที่แตกต่างกัน เนื่องจากการเลือกตำแหน่งการวัดที่แตกต่างกัน ส่งผลให้สเปกตรัมรามานที่วัดได้เกิดความคลาดเคลื่อน และทำให้การนำชุดข้อมูลสเปกตรัมรามานที่วัดไปใช้ในการวิเคราะห์คุณภาพโดยไม่มีประสิทธิภาพ ดังนั้นจึงจำเป็นต้องทำการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing)

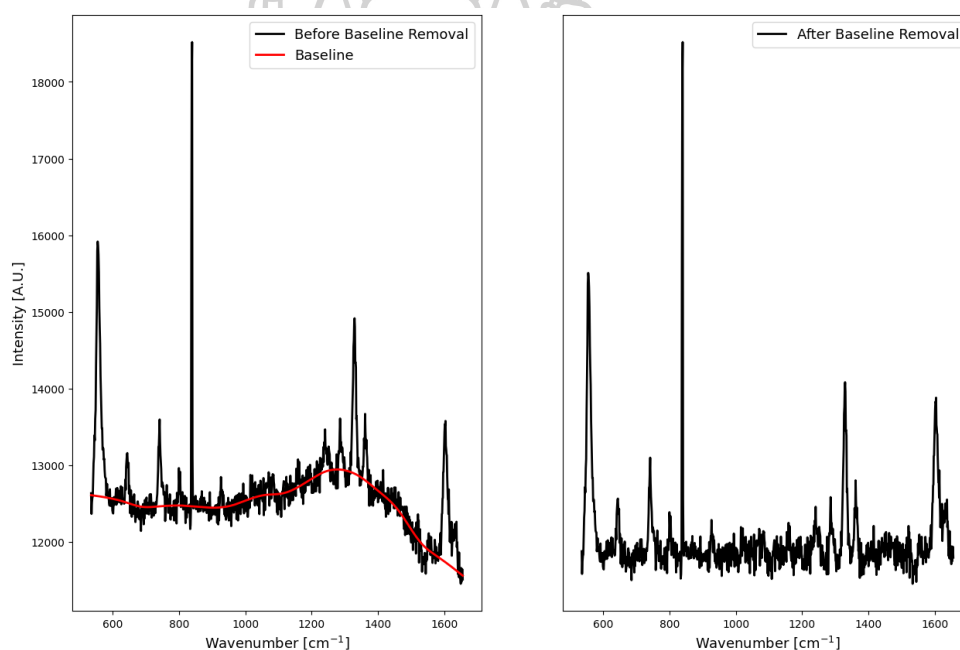


รูปที่ 48 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERs (ก) ก่อนการเตรียมตัวอย่างด้วยเทคนิค QuEChERs (ข) หลังการเตรียมตัวอย่างด้วยเทคนิค QuEChERs

4.3.2 ผลการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-processing)

1) การปรับฐานของสเปกตรัม (Baseline Removal)

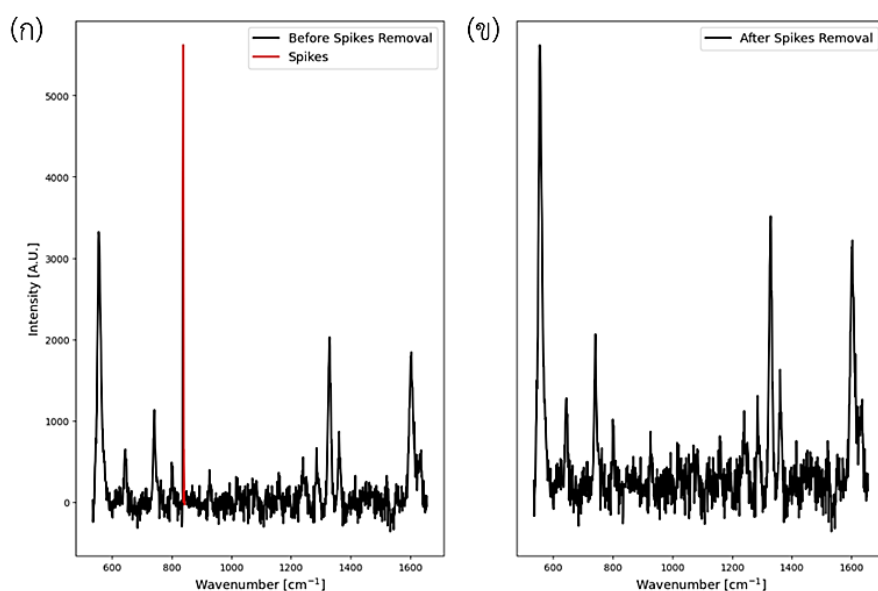
ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการเตรียมสารด้วยเทคนิค QuEChERS ก่อนการกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) แสดงในรูปที่ 49(ก) จากรูปแสดงให้เห็นว่าสเปกตรัมมีรูปแบบและระดับของเส้นฐานที่ต่างกัน ซึ่งระดับฐานที่ยกสูงขึ้นเกิดจากสัญญาณพื้นหลังที่มาจากผลจากการกระเจิงแสง และความถี่ที่สูงขึ้นส่งผลให้ระดับของสัญญาณพื้นหลังสูงขึ้น รูปที่ 49(ข) แสดงตัวอย่างของสเปกตรัมของรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการปรับระดับของฐานแล้ว ทำให้ฐานของสเปกตรัมทั้งหมดอยู่ในระดับที่ใกล้เคียงกัน



รูปที่ 49 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคว่ำที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการปรับฐานของสเปกตรัม (ข) สเปกตรัมหลังการปรับฐานของสเปกตรัม

2) การลบรังสีคอสมิก (Cosmic Ray Removal)

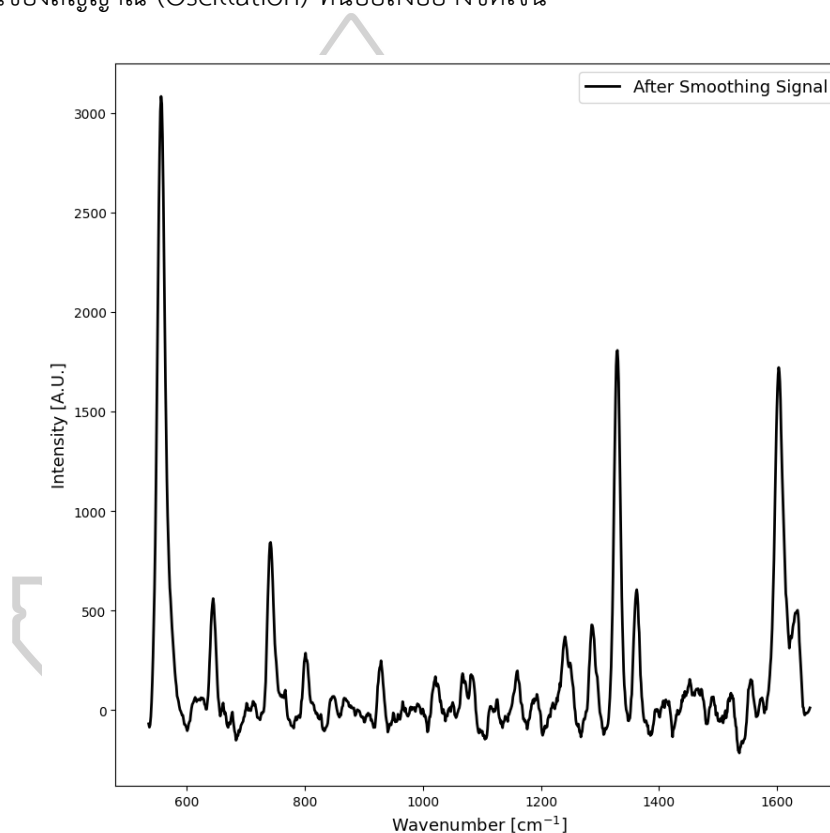
ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการปรับฐานสเปกตรัม (Baseline Removal) ที่พบเกิดปรากฏการณ์รังสีคอสมิกแสดงในรูปที่ 50(ก) เนื่องจาก CCD detector มีความไวต่อรังสีคอสมิก จึงทำให้เกิดการพุ่งขึ้นของสัญญาณอย่างรวดเร็ว ทำให้สเปกตรัมในบางตำแหน่งจะปรากฏให้เห็นถึงค่าสัญญาณที่สูงผิดปกติหรือ (Spikes) ซึ่งมีลักษณะคล้ายกับจุดยอด (Peaks) ของสัญญาณรามาน แต่มีขนาดแคบกว่าจุดยอดของสัญญาณรามาน รูปที่ 50(ข) แสดงตัวอย่างของสัญญาณสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ทำการลบปรากฏการณ์รังสีคอสมิก จากรูปแสดงให้เห็นว่า Spikes จะถูกแทนที่ด้วยค่าเฉลี่ยของสัญญาณในระยะหน้าต่าง (Window Size) ที่กำหนดไว้



รูปที่ 50 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคว่ำที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการลบรังสีคอสมิก (ข) สเปกตรัมหลังการลบรังสีคอสมิก

3) การปรับสัญญาณให้เรียบ (Signal Smoothing)

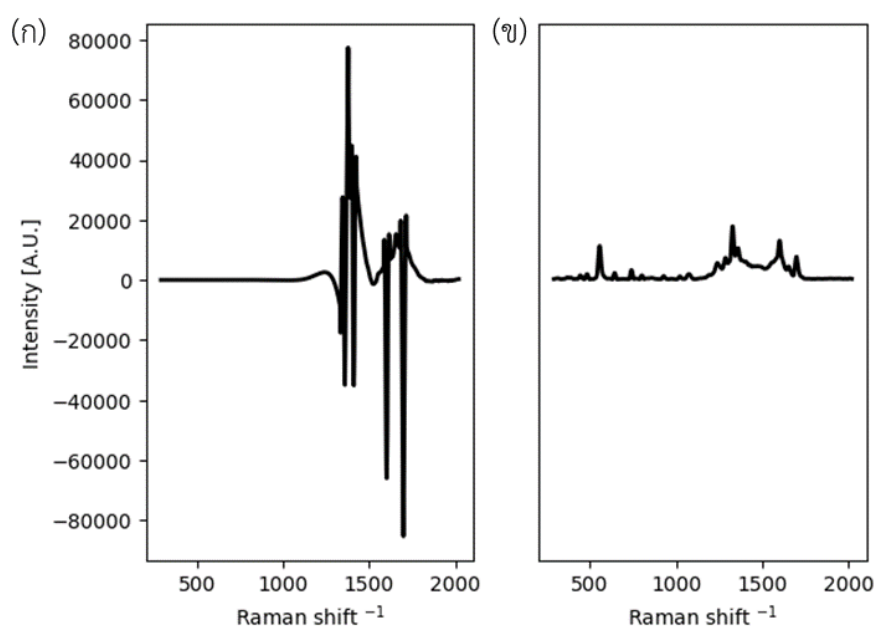
ตัวอย่างสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟหลังจากผ่านกระบวนการลบรังสีคอสมิก แสดงในรูปที่ 51(ก) สังเกตได้ว่าสเปกตรัมมีค่าสัญญาณรบกวนที่สูง (Noise Signal) เนื่องข้อบกพร่องจากอุปกรณ์การวัดสัญญาณ รูปที่ 51(ข) แสดงสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการปรับสัญญาณให้เรียบ โดยใช้อัลกอริทึม Savitzky and Golay Smoothing ซึ่งหลังจากผ่านกระบวนการปรับสัญญาณให้เรียบสังเกตได้ว่าสเปกตรัมมีสัญญาณรบกวนที่ลดลง และความแปรปรวนของสัญญาณ (Oscillation) ที่น้อยลงอย่างชัดเจน



รูปที่ 51 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคว่ำที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERs (ก) สเปกตรัมก่อนการปรับสัญญาณให้เรียบ (ข) สเปกตรัมหลังการปรับสัญญาณให้เรียบ

4) การกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (Outlier Removal)

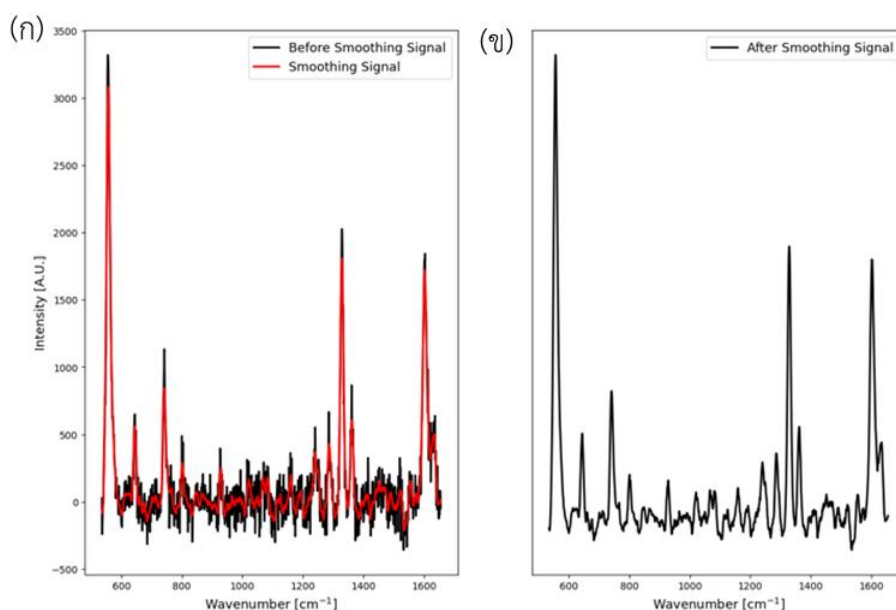
ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการปรับสัญญาณให้เรียบ แต่ยังมีสัญญาณรบกวนที่สูงแสดงดังรูปที่ 52(ก) ซึ่งสาเหตุเกิดจากตัวอย่างที่มีความไม่เนื้อเดียวกัน (Heterogeneous) ทำให้อาจเกิดการเลือกตำแหน่งการวัดที่ไม่เหมาะสม และทำให้สัญญาณรามานที่วัดได้ไม่แสดงถึงคุณลักษณะที่ควรจะเป็นของสัญญาณรามานที่แท้จริงของสารคาเฟอีนมาตรฐาน นอกจากนั้นยังอาจเกิดจากข้อบกพร่องของการวัด รูปที่ 52(ข) แสดงตัวอย่างการลบสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผิดปกติออกจากชุดข้อมูลเพื่อเพิ่มคุณภาพให้แก่ชุดข้อมูล และทำให้ชุดข้อมูลปราศจากสเปกตรัมรามานที่มีสัญญาณรบกวนสูงกว่าเกณฑ์ นอกจากนั้นยังทำการกำจัดข้อมูลที่ไม่แสดงถึงคุณลักษณะที่ควรจะเป็นของสเปกตรัมรามานของสารคาเฟอีนมาตรฐาน



รูปที่ 52 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการกำจัดข้อมูลที่ผิดปกติ (ข) สเปกตรัมที่มีค่าความเข้มสัญญาณปกติ และแสดงจุดยอดของสัญญาณได้ถูกต้อง

5) การทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (Normalization)

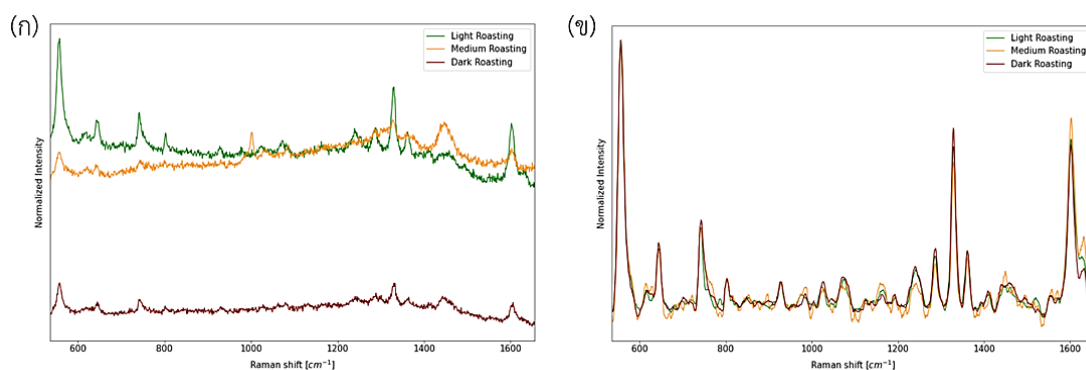
ตัวอย่างสเปกตรัมรามานขอตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการกรองข้อมูลที่ผิดปกติออกจากชุดข้อมูล แสดงในรูปที่ 53(ก) จากรูปสังเกตได้ว่าสำหรับตัวอย่างที่แตกต่างกันแต่มีความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐานเท่ากัน แต่ความเข้มของสัญญาณสเปกตรัมที่วัดได้แตกต่างกัน ส่งผลให้ไม่สามารถนำค่าสัญญาณวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานที่ใช้ความเข้มของสัญญาณได้ เนื่องจากชุดข้อมูลมีความแปรปรวนสูง รูปที่ 53(ข) แสดงตัวอย่างสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน ซึ่งสังเกตได้ว่าทุกสเปกตรัมจะมีค่าความเข้มสัญญาณอยู่ในช่วง 0 ถึง 1 A.U. และจะยอดของสัญญาณที่มีค่าความเข้มสัญญาณสูงที่สุดอยู่ในตำแหน่งเดียวกันในทุกสเปกตรัมเสมอ ทำให้สามารถนำสเปกตรัมที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณไปใช้วิเคราะห์เชิงปริมาณต่อไป



รูปที่ 53 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน (ข) สเปกตรัมหลังการทำให้สเปกตรัมเป็นมาตรฐาน

ผลลัพธ์สุดท้ายจากการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมเบื้องต้น

ตัวอย่างสเปกตรัมรามานของสารกาแฟก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น แสดงในรูปที่ 54(ก) แสดงตัวอย่างสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ระดับการคั่วที่แตกต่างกันทั้ง 3 ระดับ ประกอบด้วย 1.ระดับการคั่วอ่อน 2.ระดับการคั่วกลาง และ 3. ระดับการคั่วเข้ม ก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น โดยสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟที่ระดับการคั่วแตกต่างกัน แสดงถึงรูปแบบและระดับฐานของสัญญาณรามานที่แตกต่างกัน เนื่องจากผลจากปัจจัยรบกวนที่เกิดจากหลากหลายสาเหตุ นอกจากนั้นสัญญาณรบกวนในสเปกตรัมที่สูง และความแปรปรวนของสัญญาณรามานที่สูง ที่ได้กล่าวในบทที่ 2 จึงทำให้ไม่สามารถนำชุดข้อมูลสเปกตรัมนี้มาทำการวิเคราะห์ปริมาณได้ ดังนั้นจึงต้องใช้เทคนิคการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นเพื่อลดข้อผิดพลาดของสัญญาณที่เกิดจากการวัดสิ่งรบกวน และข้อมูลที่ไม่เกี่ยวข้องออกจากข้อมูลสเปกตรัม ซึ่งหลังจากการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมแล้วทำให้สเปกตรัมรามานมีความคล้ายคลึงกันมากขึ้น ดังแสดงในรูปที่ 54(ข)



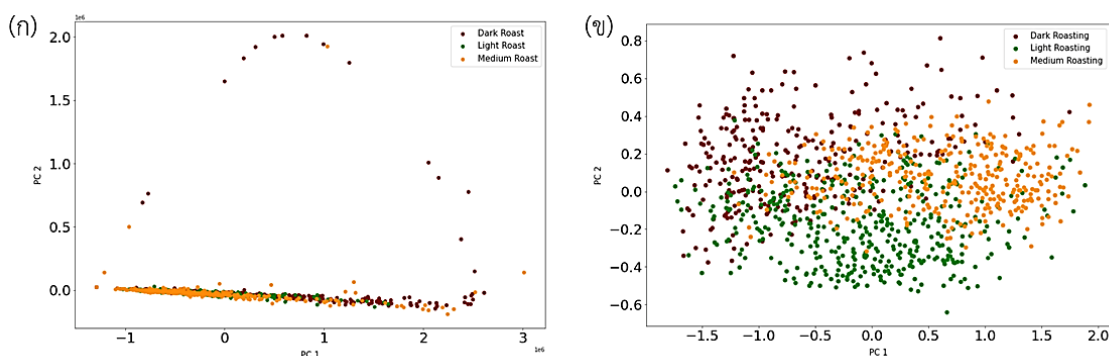
รูปที่ 54 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERS (ก) สเปกตรัมก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (ข) สเปกตรัมหลังการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น

4.3.3 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟ (Qualitative Analysis of Coffee Samples)

ตัวอย่างที่ถูกวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีทั้งหมดจำนวน 27 ตัวอย่าง วัดตัวอย่างละ 90 สเปกตรัม รวมทั้งหมด 2430 สเปกตรัม หลังจากผ่านการประมวลผลสัญญาณทำให้เหลือสเปกตรัมรามานที่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) จำนวน 1104 สเปกตรัม โดยมีจำนวนสเปกตรัมที่ระดับการคั่ว อ่อน, กลาง, และเข้ม จำนวน 496, 347, และ 261 สเปกตรัม ตามลำดับ โดยการวิเคราะห์ข้อมูลจะถูกแบ่งออกเป็น 2 ส่วน ได้แก่ ส่วนที่ 1 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ (Unsupervised Learning) และส่วนที่ 2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ (Supervised Learning)

1) การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ

รูปที่ 55(ก) แสดงการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมที่ไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (Spectral Pre-processing) โดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับ (Unsupervised Learning) โดยการใช้การหาองค์ประกอบหลัก (Principal Components Analysis: PCA) เพื่อจัดกลุ่มข้อมูลสเปกตรัมตัวอย่างกาแฟในแต่ละระดับการคั่ว จากรูปแสดงให้เห็นถึงความแปรปรวนของข้อมูลที่ไม่สามารถจัดกลุ่มตามระดับการคั่วของสเปกตรัมตัวอย่างกาแฟได้ รูปที่ 55(ข) แสดงการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นโดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับโดยการใช้การหาองค์ประกอบหลัก จากรูปแสดงให้เห็นถึงแนวโน้มในการจัดกลุ่มของข้อมูลตามระดับการคั่วของสเปกตรัมกาแฟที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นโดยองค์ประกอบหลักอันดับที่ 1 และ 2 มีค่า Components Score อยู่รวมทั้งหมด 97% แต่ประสิทธิภาพในการจัดกลุ่มระดับการคั่วยังไม่เพียงพอ



รูปที่ 55 ตัวอย่างสเปกตรัมรามานที่วัดได้ของตัวอย่างกาแฟที่มีระดับการคั่วที่แตกต่างกันด้วยเทคนิค QuEChERs ผ่านการวิเคราะห์โดยใช้การหาองค์ประกอบหลัก (PCA) (ก) สเปกตรัมก่อนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น (ข) สเปกตรัมหลังการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น

2) การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ

การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับนั้น จำเป็นต้องแบ่งข้อมูลออกเป็น 2 ชุดข้อมูล ได้แก่ ชุดข้อมูลฝึกสอน (Training Set) และชุดข้อมูลการตรวจสอบ (Validation Set) โดยมีจำนวนร้อยละ 80 และ 20 ของแต่ละระดับการคั่ว ตามลำดับ หลังจากนั้นจึงใช้กระบวนการเรียนรู้ของเครื่องในการสร้างแบบจำลองในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟ โดยการแยกระดับการคั่วของกาแฟ โดยในงานวิจัยนี้ได้ทำการทดลองเปรียบเทียบประสิทธิภาพแบบจำลองในการแยกระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟทั้งหมด 16 แบบจำลอง เพื่อเปรียบเทียบประสิทธิภาพในการแยกระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟ ตารางที่ 7 แสดงผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพในการจำแนกระดับการคั่วของสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ถูกเตรียมด้วยวิธีการเตรียมตัวอย่างสารด้วยเทคนิค QuEChERs ทั้งหมด 16 และ ตารางที่ 8 แสดงผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพในการจำแนกระดับการคั่วของสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟโดยไม่ผ่านกระบวนการเตรียมตัวอย่างสารทั้งหมด 16 แบบจำลอง จากตารางที่ 7 และ 8 แสดงให้เห็นถึงแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุด 5 แบบจำลอง ในการจำแนกระดับการคั่วตัวอย่างกาแฟ ได้แก่ 1. Ridge Classifier 2. Logistic Regression 3. Light Gradient Boosting Machine 4. Gradient Boosting Classifier และ 5. Extra Trees Classifier โดยมีค่าความแม่นยำ (Accuracy) ในการทำนายอยู่ที่ 0.9815, 0.9746, 0.912, 0.9689 และ 0.9689 ตามลำดับ ค่าความถูกต้อง

(Precision) ในการทำนายอยู่ที่ 0.9822, 0.7959, 0.9725, 0.9689, และ 0.9701 ตามลำดับ ค่าความไว (Recall) ในการทำนายอยู่ที่ 0.9815, 0.9746, 0.912, 0.9689 และ 0.9689 ตามลำดับ ค่าคะแนน F-1 (F-1 score) ในการทำนายอยู่ที่ 0.9815, 0.9746, 0.912, 0.9689 และ 0.9815 ตามลำดับ จากประสิทธิภาพแบบจำลองทั้ง 5 แบบจำลองได้แสดงให้เห็นถึงประสิทธิภาพในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัม และข้อมูลสเกตรัมที่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นมีประสิทธิภาพในการฝึกอบรมละทำนายที่สูงกว่าสเปกตรัมที่ไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น และนอกจากนี้ประสิทธิภาพของแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุดทั้ง 5 แบบจำลองมีประสิทธิภาพใกล้เคียงกัน แสดงให้เห็นถึงกระบวนการขั้นตอนในการเตรียมตัวอย่างสารด้วยเทคนิค QuEChERS และกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นเป็นกระบวนการทดลองที่มีประสิทธิภาพในการวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบมีป้ายกำกับ



ตารางที่ 4 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลที่ไม่ผ่านการประมวลผล
สัญญาณเบื้องต้น

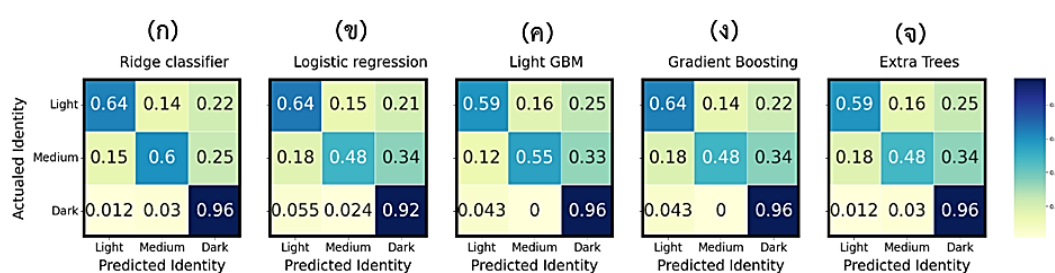
Model	Accuracy	Precision	Recall	F1-score
Ridge Classifier	0.7539	0.9822	0.9815	0.9815
Logistic Regression	0.9746	0.9759	0.9746	0.9746
Light GBM	0.9712	0.9725	0.9712	0.9712
Gradient Boosting Classifier	0.9689	0.9698	0.9689	0.9689
Extra Trees Classifier	0.9689	0.9701	0.9689	0.9688
SVM-Linear Kernel	0.9666	0.9702	0.9666	0.9658
Random Forest Classifier	0.9665	0.9675	0.9665	0.9664
Extreme Gradient Boosting	0.9665	0.9677	0.9665	0.9664
K Neighbors Classifier	0.9228	0.9258	0.9228	0.9231
Ada Boost Classifier	0.8686	0.8931	0.8686	0.8693
Decision Tree Classifier	0.8674	0.8705	0.8674	0.8670
Naïve Bayes	0.8235	0.8321	0.8235	0.8234
Linear Discriminant Analysis	0.7519	0.7585	0.7519	0.7491
Dummy Classifier	0.4117	0.1695	0.4117	0.2402
Quadratic Discriminant Analysis	0.4038	0.3990	0.4038	0.3986
Ridge Classifier	0.9815	0.9822	0.9815	0.9815

ตารางที่ 5 ผลการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของการวิเคราะห์ของชุดข้อมูลที่ผ่านการประมวลผล
สัญญาณเบื้องต้น

Model	Accuracy	Precision	Recall	F1-score
Ridge Classifier	0.9815	0.9822	0.9815	0.9815
Logistic Regression	0.9746	0.9759	0.9746	0.9746
Light GBM	0.9712	0.9725	0.9712	0.9712
Gradient Boosting Classifier	0.9689	0.9698	0.9689	0.9689
Extra Trees Classifier	0.9689	0.9701	0.9689	0.9688
SVM-Linear Kernel	0.9666	0.9702	0.9666	0.9658
Random Forest Classifier	0.9665	0.9675	0.9665	0.9664
Extreme Gradient Boosting	0.9665	0.9677	0.9665	0.9664
K Neighbors Classifier	0.9228	0.9258	0.9228	0.9231
Ada Boost Classifier	0.8686	0.8931	0.8686	0.8693
Decision Tree Classifier	0.8674	0.8705	0.8674	0.8670
Naïve Bayes	0.8235	0.8321	0.8235	0.8234

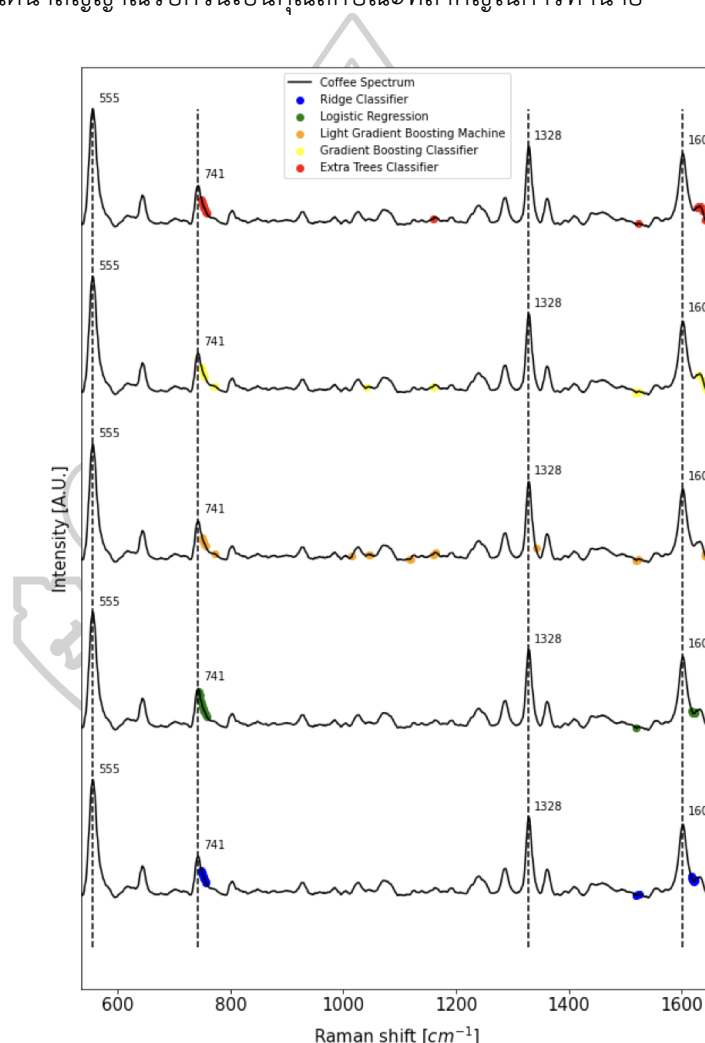
Linear Discriminant Analysis	0.7519	0.7585	0.7519	0.7491
Dummy Classifier	0.4117	0.1695	0.4117	0.2402
Quadratic Discriminant Analysis	0.4038	0.3990	0.4038	0.3986

รูปที่ 56(ก-จ) แสดงการวิเคราะห์ผลการทำนายระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้แบบจำลองของเครื่อง เพื่อแสดงถึงความแม่นยำ และความคลาดเคลื่อนของความผิดพลาดในการทำนายระดับการคั่วในชุดข้อมูลทดสอบที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณทั้งจำนวน 900 สเปกตรัม ทั้งหมด 5 แบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุด ซึ่งแสดงถึงความแม่นยำในการทำนายสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟระดับการคั่วกลาง และความคลาดเคลื่อนในการทำนายระหว่างระดับการคั่วเข้มและคั่วอ่อน นอกจากนั้นยังแสดงถึงแนวโน้มในการทำนายไปในทิศทางเดียวกันทั้ง 5 แบบจำลอง



รูปที่ 56 การวิเคราะห์ผลการทำนายระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้แบบจำลองของเครื่อง

รูปที่ 57 แสดงถึงคุณลักษณะที่มีความสำคัญ (Feature Importance) ที่ใช้ในการจำแนก ระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัม โดยการใช้แบบจำลองของเครื่องทั้งหมด 5 แบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุด โดยการพิจารณาคุณลักษณะที่สำคัญที่สุดทั้งหมด 15 คุณลักษณะ จากจำนวนคุณลักษณะทั้งหมด 1,012 คุณลักษณะทั้งหมดในสเปกตรัมแสดงถึงการรวมกลุ่มส่วนมาก อยู่ที่ยอดจุดยอดตำแหน่งที่ 741 cm^{-1} ซึ่งเป็นหนึ่งในจุดยอดของสารมาตรฐานคาเฟอีน แสดงให้เห็นถึงความน่าเชื่อถือของแบบจำลองในการเลือกคุณลักษณะที่ใช้คุณลักษณะสำคัญอยู่บริเวณจุดยอดของ ข้อมูล และไม่ได้นำสัญญาณรบกวนเป็นคุณลักษณะที่สำคัญในการทำนาย



รูปที่ 57 ตำแหน่งคุณลักษณะที่มีความสำคัญ (Feature Importance) ที่ใช้ในการระดับการคั่วของ ตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมโดยการใช้แบบจำลองของเครื่องทั้งหมด 5 แบบจำลองที่มี ประสิทธิภาพสูงสุด

บทที่ 5

สรุปและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

วิทยานิพนธ์นี้นำเสนอวิธีการตรวจวัดเชิงปริมาณและเชิงคุณภาพของสารสำคัญในกาแฟโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยมุ่งเน้นที่การวัดด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปีร่วมกับการวิเคราะห์ข้อมูลโดยการใช้การเตรียมตัวอย่างและการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง เนื่องจากเทคนิคฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี และเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไมโครเมสสเปกโทรสโกปีมีข้อจำกัดในการตรวจวัดสารตัวอย่างที่อยู่สถานะของเหลว จึงทำให้ไม่เหมาะกับการวัดตัวอย่างกาแฟที่มีลักษณะเป็นของเหลว

โดยในการศึกษารั้งนี้ กระบวนการทำงานถูกแบ่งออกเป็น 2 ส่วนหลักได้แก่ 1. การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยข้อมูลสเปกตรัมรามานโดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง และ 2.การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟด้วยข้อมูลสเปกตรัมรามานโดยการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง

โดยในงานวิจัยส่วนที่ 1 มุ่งเน้นไปที่การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานโดยการใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี (Raman Spectroscopy) ร่วมกับการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) โดยข้อมูลสเปกตรัมรามานที่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นเหล่านั้นถูกนำมาใช้ในการสร้างแบบจำลองในการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐาน จากการเปรียบเทียบทั้งหมด 18 แบบจำลอง พบว่าแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงที่สุดในการทำนายความเข้มข้นของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยชุดข้อมูลรามานที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณคือ Extra Tree Regressor โดยมีค่า MAE, RMSE, และ R^2 อยู่ที่ 710 ppm, 914.05 ppm และ 0.34 ตามลำดับ ซึ่งแสดงให้เห็นว่าการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นสามารถช่วยในการเพิ่มประสิทธิภาพในการทำนายเมื่อเปรียบเทียบกับแบบจำลองที่ใช้ข้อมูลที่ไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น อย่างไรก็ตาม แบบจำลอง Extra Tree Regressor ยังมีค่าความผิดพลาดที่สูงในการทำนาย เนื่องจากข้อมูล

สเปกตรัมที่ป้อนเข้าสู่แบบจำลองในแต่ละความเข้มข้น ให้ผลลัพธ์ในการทำนายไม่แสดงถึงความแตกต่างกันโดยนัยสำคัญทำให้ทำนายปริมาณความเข้มข้นอยู่ในช่วง 1,000 ถึง 3,000 ppm

โดยในงานวิจัยส่วนที่ 2 มุ่งเน้นไปที่การวิเคราะห์เชิงคุณภาพของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านกระบวนการเตรียมตัวอย่างสาร (Sample Preparation) ด้วยเทคนิค QuEChERS ร่วมกับการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง โดยเนื่องจากผลการวิเคราะห์ดังที่กล่าวไว้ในส่วนที่ 1 ผู้วิจัยจึงได้เห็นถึงความเป็นไปได้ในการพัฒนาการวิเคราะห์ตัวอย่างกาแฟจริงโดยใช้เทคนิครามานสเปกโทรสโกปี แต่การวัดปริมาณอาจจะยังเป็นเรื่องที่ทำนายมากเกินไป จึงได้ทำวิธีการแบบกึ่งเชิงปริมาณ (Semi-Quantitative) เนื่องจากปริมาณสารที่สำคัญมีความสัมพันธ์กับกระบวนการคั่ว ดังนั้นการแยกระดับการคั่วจึงมีความหมายคล้ายคลึงกับการตรวจวัดปริมาณสาร จากผลการทดลองทำให้พบว่าข้อมูลสเปกตรัมรามานของตัวอย่างกาแฟที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นสามารถเพิ่มประสิทธิภาพในการจำแนกระดับการคั่วได้สูงกว่าการใช้ชุดข้อมูลสเปกตรัมของตัวอย่างกาแฟที่ไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้น นอกจากนี้แบบจำลองที่มีประสิทธิภาพสูงสุดในการจำแนกระดับการคั่วทั้ง 5 แบบจำลอง ได้แก่ Ridge Classifier, Logistic Regression, Light Gradient Boosting Classifier, และ Extra Tree Classifier โดยมีค่าความแม่นยำอยู่ระหว่าง 0.9689 ถึง 0.9815 ซึ่งแสดงถึงความสามารถในการแยกระดับการคั่วของตัวอย่างกาแฟได้อย่างดี นอกจากนั้นการจัดการจัดกลุ่มข้อมูลโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องแบบไม่มีป้ายกำกับด้วยวิธีการหาองค์ประกอบหลัก (Principal Components Analysis: PCA) ได้แสดงถึงแนวโน้มที่ดีในการจัดกลุ่มระดับการคั่ว แม้ว่าการจัดกลุ่มระดับการคั่วอาจจะยังจัดกลุ่มอาจจะมีประสิทธิภาพไม่สูงมากนัก

5.2 ข้อเสนอแนะ

5.2.1 พัฒนาแบบจำลองเพิ่มเติมโดยไม่ว่าจะเป็นการหาแบบจำลองอื่นนอกเหนือจากแบบจำลองที่ใช้ในงานวิจัยดังกล่าว หรือจะเป็นการปรับค่าตัวแปรที่ใช้ในแบบจำลอง

5.2.2 ขยายขอบเขตการทดลองโดยการเพิ่มจำนวนชุดข้อมูลสำหรับการทดลอง โดยเฉพาะการใช้ข้อมูลสเปกตรัมที่มีความหลากหลายมากขึ้น เช่นการใช้ระดับความเข้มข้นที่หลากหลายขึ้นมา

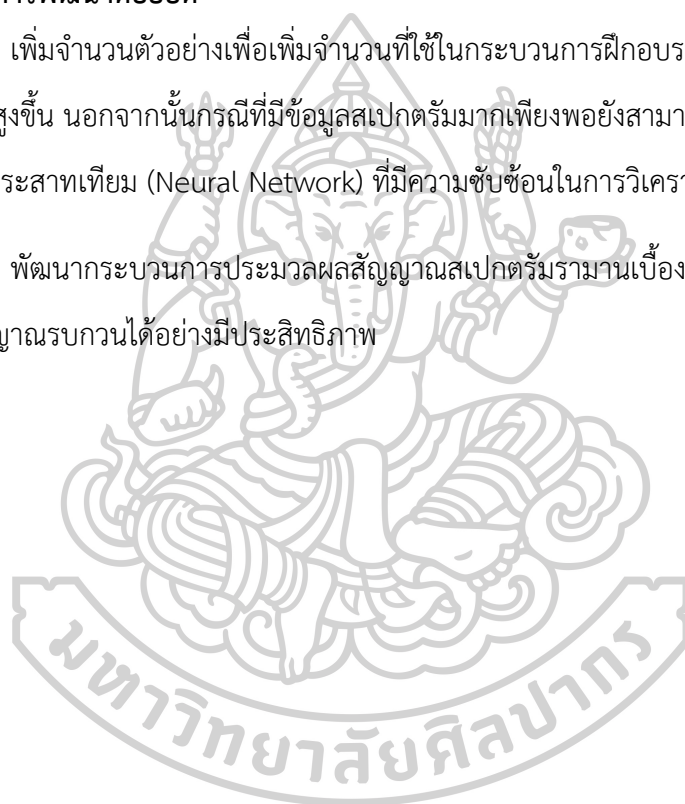
การวิเคราะห์เชิงปริมาณของสารคาเฟอีนมาตรฐานด้วยเทคนิครามานสเปกโทรสโกปี และการเพิ่มแหล่งภูมิศาสตร์ที่มาของตัวอย่างกาแฟก่อนกระบวนการคั่ว

5.2.3 การลดข้อบกพร่องที่เกิดจากการวัดโดยเทคนิคการประมวลผลสัญญาณให้มีประสิทธิภาพสูงขึ้น

5.3 แนวทางการพัฒนาต่อยอด

5.3.1 เพิ่มจำนวนตัวอย่างเพื่อเพิ่มจำนวนที่ใช้ในกระบวนการฝึกอบรมเมื่อให้แบบจำลองมีประสิทธิภาพสูงขึ้น นอกจากนั้นกรณีที่มีข้อมูลสเปกตรัมมากเพียงพอยังสามารถพัฒนาแบบจำลองให้เป็นโครงข่ายประสาทเทียม (Neural Network) ที่มีความซับซ้อนในการวิเคราะห์ข้อมูลสูงขึ้น

5.3.2 พัฒนาระบบการประมวลผลสัญญาณสเปกตรัมรามานเบื้องต้น เพื่อเป็นอัลกอริทึมในการลดสัญญาณรบกวนได้อย่างมีประสิทธิภาพ



รายการอ้างอิง

1. Cheng, B., et al., *Influence of genotype and environment on coffee quality*. Trends in Food Science & Technology, 2016. **57**: p. 20-30.
2. You, D.-C., et al., *Possible health effects of caffeinated coffee consumption on Alzheimer's disease and cardiovascular disease*. Toxicological research, 2011. **27**: p. 7-10.
3. Prihadi, A.R. and A. Maimulyanti, *Chemical compounds of coffee ground and spent coffee ground for pharmaceutical products*. Pharmaceutical and Biomedical Sciences Journal (PBSJ), 2021. **2**(2): p. 49-52.
4. Yashin, A., et al., *Chromatographic methods for coffee analysis: a review*. 2017.
5. Pawliszyn, J., M.J. Yang, and M.L. Orton, *Quantitative determination of caffeine in beverages using a combined SPME-GC/MS method*. Journal of chemical education, 1997. **74**(9): p. 1130.
6. Lisko, J.G., et al., *Caffeine concentrations in coffee, tea, chocolate, and energy drink flavored e-liquids*. Nicotine & Tobacco Research, 2017. **19**(4): p. 484-492.
7. Wong-Paz, J.E., et al., *Structural characterization of native and oxidized procyanidins (condensed tannins) from coffee pulp (Coffea arabica) using phloroglucinolysis and thioglycolysis-HPLC-ESI-MS*. Food chemistry, 2021. **340**: p. 127830.
8. Frost, S.C., et al., *The chemistry of green and roasted coffee by selectable 1D/2D gas chromatography mass spectrometry with spectral deconvolution*. Molecules, 2022. **27**(16): p. 5328.
9. Li, Y.-S. and J.S. Church, *Raman spectroscopy in the analysis of food and pharmaceutical nanomaterials*. Journal of food and drug analysis, 2014. **22**(1): p. 29-48.
10. Hanna, K., et al., *Raman spectroscopy: Current applications in breast cancer diagnosis, challenges and future prospects*. British journal of cancer, 2022. **126**(8): p. 1125-1139.

11. Datta, S., et al., *Terahertz Spectroscopic Analysis of Lactose in Infant Formula: Implications for Detection and Quantification*. *Molecules*, 2022. **27**(15): p. 5040.
12. Huang, W., et al., *Raman spectroscopy and machine learning for the classification of esophageal squamous carcinoma*. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2022. **281**: p. 121654.
13. Zhang, W., et al., *Label-free discrimination and quantitative analysis of oxidative stress induced cytotoxicity and potential protection of antioxidants using Raman micro-spectroscopy and machine learning*. *Analytica Chimica Acta*, 2020. **1128**: p. 221-230.
14. Yang, S., et al., *Determination of the geographical origin of coffee beans using terahertz spectroscopy combined with machine learning methods*. *Frontiers in Nutrition*, 2021. **8**: p. 680627.
15. Wang, N., Y. Fu, and L.-T. Lim, *Feasibility study on chemometric discrimination of roasted Arabica coffees by solvent extraction and Fourier transform infrared spectroscopy*. *Journal of agricultural and food chemistry*, 2011. **59**(7): p. 3220-3226.
16. Zhang, C., et al., *Mid-Infrared Spectroscopy for Coffee Variety Identification: Comparison of Pattern Recognition Methods*. *Journal of Spectroscopy*, 2016. **2016**(1): p. 7927286.
17. Jiang, Y., et al., *Machine learning and application in terahertz technology: A review on achievements and future challenges*. *IEEE Access*, 2022. **10**: p. 53761-53776.
18. Blake, N., et al., *Machine learning of Raman spectroscopy data for classifying cancers: a review of the recent literature*. *Diagnostics*, 2022. **12**(6): p. 1491.
19. Madden, M.G. and A.G. Ryder. *Machine learning methods for quantitative analysis of Raman spectroscopy data*. in *Opto-Ireland 2002: Optics and Photonics Technologies and Applications*. 2003. SPIE.
20. Figueiredo, L.P., et al., *Raman spectroscopy for the differentiation of Arabic coffee genotypes*. *Food chemistry*, 2019. **288**: p. 262-267.

21. Keidel, A., et al., *Discrimination of green arabica and Robusta coffee beans by Raman spectroscopy*. Journal of agricultural and food chemistry, 2010. **58**(21): p. 11187-11192.
22. Garrigues, J.M., et al., *Fourier transform infrared determination of caffeine in roasted coffee samples*. Fresenius' journal of analytical chemistry, 2000. **366**: p. 319-322.
23. Hu, Q., et al., *Integration of surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) and machine learning tools for coffee beverage classification*. Digital Chemical Engineering, 2022. **3**: p. 100020.
24. Chen, L.-Q. and W. Huang, *153. APPLICATION OF RAMAN SPECTROSCOPY AND MACHINE LEARNING IN THE CLASSIFICATION OF ESOPHAGEAL SQUAMOUS CARCINOMA*. Diseases of the Esophagus, 2022. **35**(Supplement_2): p. doac051. 153.
25. Heriyanti, H., et al., *Initial roasting temperature effect on thermal behaviour and characteristic of Liberica coffee*. 2019.
26. Diviš, P., J. Pořízka, and J. Křikala, *The effect of coffee beans roasting on its chemical composition*. Slovak Journal of Food Sciences/Potravinarstvo, 2019. **13**(1).
27. Ramalakshmi, K., et al., *Separation and characterisation of chlorogenic acid - rich conserves from green coffee beans and their radical scavenging potential*. International journal of food science & technology, 2011. **46**(1): p. 109-115.
28. Moon, J.-K., H.S. Yoo, and T. Shibamoto, *Role of roasting conditions in the level of chlorogenic acid content in coffee beans: correlation with coffee acidity*. Journal of agricultural and food chemistry, 2009. **57**(12): p. 5365-5369.
29. Freitas, V.V., et al., *Influence of roasting levels on chemical composition and sensory quality of Arabica and Robusta coffee: A comparative study*. Food Bioscience, 2024. **59**: p. 104171.
30. Chiang, H.-M., et al., *Role of Coffea arabica extract and related compounds in preventing photoaging and photodamage of the skin*, in *Coffee in health and disease prevention*. 2015, Elsevier. p. 523-530.

31. Tunnicliffe, J.M., T. Cowan, and J. Shearer, *Chlorogenic acid in whole body and tissue-specific glucose regulation*. Coffee in health and disease prevention, 2015: p. 777-785.
32. Reyes, C.M. and M.C. Cornelis, *Caffeine in the diet: country-level consumption and guidelines*. Nutrients, 2018. **10**(11): p. 1772.
33. Clarke, R.J., *Coffee: Volume 1: Chemistry*. 2012: Springer Science & Business Media.
34. Fuller, M. and N.Z. Rao, *The effect of time, roasting temperature, and grind size on caffeine and chlorogenic acid concentrations in cold brew coffee*. Scientific reports, 2017. **7**(1): p. 17979.
35. Perrois, C., et al., *Differential regulation of caffeine metabolism in Coffea arabica (Arabica) and Coffea canephora (Robusta)*. Planta, 2015. **241**: p. 179-191.
36. Alqarni, M.H., et al., *Roasting effect on the caffeine contents and antioxidant potential of different coffee grades available in the Saudi market*. Indo American Journal of Pharmaceutical Sciences, 2018. **5**(12): p. 16738-16745.
37. Awwad, S., et al., *Quantification of caffeine and chlorogenic acid in green and roasted coffee samples using HPLC-DAD and evaluation of the effect of degree of roasting on their levels*. Molecules, 2021. **26**(24): p. 7502.
38. Thompson, N.L., *Fluorescence correlation spectroscopy*, in *Topics in fluorescence spectroscopy: Techniques*. 2002, Springer. p. 337-378.
39. Stuart, D.D., C.P. Ebel, and Q. Cheng, *Biosensing empowered by molecular identification: Advances in surface plasmon resonance techniques coupled with mass spectrometry and Raman spectroscopy*. Sensors and Actuators Reports, 2022. **4**: p. 100129.
40. Xian, Y., et al., *Modified QuEChERS purification and Fe₃O₄ nanoparticle decoloration for robust analysis of 14 heterocyclic aromatic amines and acrylamide in coffee products using UHPLC-MS/MS*. Food Chemistry, 2019. **285**: p. 77-85.

41. Schulze, G., et al., *Investigation of selected baseline removal techniques as candidates for automated implementation*. Applied spectroscopy, 2005. **59**(5): p. 545-574.
42. Ehrentreich, F. and L. Sümmchen, *Spike removal and denoising of Raman spectra by wavelet transform methods*. Analytical chemistry, 2001. **73**(17): p. 4364-4373.
43. Alamri, E.S., et al., *Machine learning classification of roasted arabic coffee: Integrating color, chemical compositions, and antioxidants*. Sustainability, 2023. **15**(15): p. 11561.
44. Loahavilai, P., et al., *Chemometric analysis of a ternary mixture of caffeine, quinic acid, and nicotinic acid by terahertz spectroscopy*. ACS omega, 2022. **7**(40): p. 35783-35791.
45. Munawar, A.A., *Near Infrared Technology Coupled with Different Spectra Correction Approaches for Fast and Non-Destructive Prediction of Chlorogenic Acid on Intact Coffee Beans*. Acta Technologica Agriculturae. **27**(1): p. 23-29.
46. Tfaili, S., et al., *Vibrational spectroscopies for the analysis of cutaneous permeation: experimental limiting factors identified in the case of caffeine penetration*. Analytical and bioanalytical chemistry, 2013. **405**: p. 1325-1332.



ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-สกุล

กัณฑ์พงศ์ สุจริตพงษ์พันธ์

วุฒิการศึกษา

สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนต้นและตอนปลาย โรงเรียนสตรีศรีน่าน
น่าน ปีการศึกษา 2560 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรีวิศวกรรมศาสตร
บัณฑิต (วศ.บ.) สาขาอิเล็กทรอนิกส์และระบบคอมพิวเตอร์ คณะ
วิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรมมหาวิทยาลัยศิลปากร ปี
การศึกษา 2564

ผลงานตีพิมพ์

กัณฑ์พงศ์ สุจริตพงษ์พันธ์, รุ่งโรจน์ จินตเมธาสวัสดิ์, มติ ห่อประทุม และ ระ
พีพันธ์ แก้วอ่อน "การวิเคราะห์เชิงปริมาณสารประกอบหลักในกาแฟด้วย
เทคนิครามานสเปกโทรสโกปีร่วมกับการวิเคราะห์ข้อมูลโดยใช้การเรียนรู้
ของเครื่อง (Quantitative Analysis of Major Compounds in
Coffee Using Raman Spectroscopy Technique Combined with
Machine Learning)" วารสารงานวิจัยและพัฒนาเชิงประยุกต์ โดยสมาคม
ETCI ฉบับที่ 2 หน้า 41-
54.(2023).<https://doi.org/10.12928/ectiard.v21i4.254278>.

