



การประชุมวิชาการสมาคมวิศวกรรมเกษตรแห่งประเทศไทย
ระดับชาติ ครั้งที่ 20 วันที่ 14-15 มีนาคม 2562
ณ โรงแรมฮาร์ตริค พัทยา จังหวัดชลบุรี

Available online at www.tsae.asia

การพัฒนาชุดอุปกรณ์ VIS-NIR สเปกโตรมิเตอร์อย่างง่าย

Development of a Simple VIS/NIR Spectrometer

ธราธิป นวมยากุล* และ วสุ อุดมเพทายกุล

Tharathip Nuamyakul¹* and Vasu Udompetaikul

ภาควิชาวิศวกรรมเกษตร คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ถ.ฉลองกรุง เขตลาดกระบัง กรุงเทพมหานคร 10520 โทรศัพท์ 02-329-8337-8

* Tel: +66-2-329-8337, E-mail: tharathip.nu@kmitl.ac.th

บทคัดย่อ

ปัจจุบันได้มีการใช้เทคนิค Near-Infrared Spectroscopy ในการตรวจสอบวัสดุหรือผลผลิตทางการเกษตรมากขึ้น ซึ่งสามารถวัดและตรวจสอบโดยไม่ทำลายตัวอย่างได้อย่างรวดเร็วและแม่นยำ หากผู้ใช้งานมีความเข้าใจหลักการการทำงานที่ดีจะช่วยให้สามารถใช้เครื่องมือได้อย่างมีประสิทธิภาพ แต่เนื่องจากอุปกรณ์ NIRS มีราคาแพงจึงไม่สะดวกต่อการนำมาใช้เพื่อทดลองเรียนรู้หลักการภายใน งานวิจัยนี้จึงออกแบบและพัฒนาชุดทดลองเพื่อศึกษาหลักการเบื้องต้นของสเปกโตรสโกปี โดยใช้หลอดฮาโลเจนเพื่อกำเนิดแสง ส่องผ่านตัวอย่างไปยังเกรตติงที่ทำจากแผ่น CD เพื่อกระจายแสงไปยังเซ็นเซอร์ในกล้องเว็บแคม แต่เนื่องจากความละเอียดของภาพและระดับความลึกของสีมีค่าต่ำ ทำให้ไม่สามารถจำแนกแสงในย่านสีน้ำเงินและ NIR ได้ดี จึงเลือกทำการทดสอบกับสารละลายสีผสมอาหารที่สีและความเข้มข้นต่างกัน โดยทำการตรวจวัดค่าสี (CIE XYZ) ของสารละลายด้วย colorimeter แล้วนำมาวัดสเปกตรัมด้วยระบบที่พัฒนาขึ้น พร้อมสร้างสมการทำนาย พบว่าสามารถทำนายค่าสี X และ Y ของสารละลายได้โดยมีค่า R^2 และ RMSE เท่ากับ 0.82 0.60 2.60 และ 4.80 ตามลำดับ ทั้งนี้ ระบบไม่สามารถทำนายค่า Z ได้เนื่องจากข้อจำกัดในการรับสเปกตรัมย่านสีน้ำเงินดังที่กล่าวมา

คำสำคัญ: สเปกโตรมิเตอร์; สเปกโตรสโกปี; NIR; เนียร์อินฟราเรด

Abstract

Nowadays, near-infrared spectroscopy technique has been used for a fast and non-destructive measurement and classification of agricultural products. It is important to fully understand the spectroscopy concept in order to efficiently operate the instruments. However, the standard spectrometer is too expensive for general users to disassemble to explore. This research was to design and develop a DIY spectrometer for learning purpose. A halogen lamp radiates the light source passing through the sample to a CD-made grating lens. The light is dispersed on to the sensor elements on a webcam. However, spectral sensitivity was weak in the blue and NIR regions due to the low resolution and color depth of the camera. So, the test was performed in the visible range with different food coloring solutions at different concentrations. The solution's colors were measured in the CIE XYZ scale using a colorimeter. The solution's spectra were acquired using the system. The prediction models could be used to predict the X and Y values with coefficients of determination (R^2) and root mean squared error (RMSE) of 0.82, 0.60, 2.60 and 4.80 respectively. The Z value could not be predicted because of the low sensitivity in the blue region.

Keywords: spectrometer; spectroscopy; NIR; Near-infrared

1 บทนำ

การทำเกษตรสมัยใหม่ในปัจจุบันการควบคุมคุณภาพของผลผลิตเป็นสิ่งจำเป็น เพื่อรักษาคุณภาพให้ได้ตามมาตรฐานที่จำเป็นต้องใช้เทคโนโลยีเข้ามาช่วย โดยเทคนิคในปัจจุบันที่ได้รับความนิยมที่สามารถวัดค่าของคุณสมบัติได้อย่างรวดเร็วและไม่ทำลายวัสดุ คือ Near Infrared Spectroscopy (NIRs) โดยหลักการของ NIRs นั้นเป็นการวัดค่าการดูดกลืน หรือส่องผ่านของแสงอินฟราเรดย่านใกล้กับสสารที่ไม่มีโมเลกุล ซึ่งจะมีผลต่อการสั่นของพันธะต่าง ๆ ในโมเลกุล ระดับการดูดกลืนรังสีอินฟราเรดย่านใกล้ของสสารที่มีความยาวคลื่นต่าง ๆ จะปรากฏในสเปกตรัม NIR ซึ่งสามารถนำมาวิเคราะห์และประยุกต์ใช้เพื่อการตรวจสอบสมบัติต่าง ๆ ช่วงคลื่นของอินฟราเรดย่านใกล้จะอยู่ในช่วงความยาวคลื่น 800 – 2500 nm พลังงานของคลื่นในย่านนี้มีมากพอที่จะทะลุผ่านผิวของวัสดุทางการเกษตรได้แต่ไม่ทำให้เกิดความร้อนและทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงภายในวัสดุ เป็นข้อดีในการวัดองค์ประกอบทางเคมีแบบไม่ทำลาย (Haruthaithanasan, 2012)

ในทางปฏิบัติเทคนิค Spectroscopy ขึ้นอยู่กับกฎสองข้อคือกฎของแลมเบิร์ต (Lambert's Law) และกฎของเบียร์ (Beer's Law) หรือรู้จักกันในชื่อ กฎของเบียร์-แลมเบิร์ต (Beer-Lambert Law) โดยกฎของแลมเบิร์ต กล่าวว่า "เมื่อแสงสีเดียว (Monochromatic Light) คือแสงความยาวคลื่นเดียวผ่านตัวกลางเนื้อเดียว (Homogeneous) เป็นสัดส่วนของความเข้ม แสงที่ถูกตัวกลางดูดกลืนไว้ โดยไม่ขึ้นกับความเข้มแสงเริ่มต้น และความเข้มของแสงจะถูกแต่ละ ชั้นของตัวกลางดูดกลืนไว้ในสัดส่วนที่เท่ากัน" และกฎของเบียร์ (Beer's Law) กล่าวว่า "เมื่อแสงที่มีความยาวคลื่นเดียวผ่านตัวกลางเนื้อเดียว สัดส่วนของความเข้มของแสงที่ถูกตัวกลางดูดกลืนไว้ จะแปรโดยตรงกับปริมาณของตัวกลางที่ดูดกลืนแสงนั้น" (Rewtrakul, 1984) จากทฤษฎีที่กล่าวมาจะถูกประยุกต์ใช้กับ NIRs และเพื่อให้เกิดความสนใจในหลักการ ของเทคนิค NIRs จึงจำเป็นต้องแสดงให้เห็นถึงส่วนประกอบ และลักษณะการทำงาน แต่บุคคลที่สนใจทั่วไปหรือนักศึกษาเข้าถึงได้ยากเนื่องจากอุปกรณ์ที่มีมาตรฐานเป็นเครื่องมือวัดที่มีราคาสูงเกินกว่าที่จะนำมาใช้ศึกษาส่วนประกอบและหลักการการทำงาน ดังนั้นจึงเป็นที่มาในการพัฒนาชุดอุปกรณ์ Vis-NIR สเปกโตรมิเตอร์อย่างง่ายเพื่อการศึกษา เพื่อแสดงให้เห็นถึงส่วนประกอบและหลักการการทำงานของ เครื่อง Spectrometer ที่สามารถทำได้ด้วยตนเองได้

2 อุปกรณ์และวิธีการ

2.1 การพัฒนาชุดทดลองเพื่อศึกษาหลักการพื้นฐานของ VIS-NIR Spectroscopy

โดยทั่วไป Spectrometer ประกอบไปด้วยอุปกรณ์หลัก 4 ส่วน คือ แหล่งกำเนิดแสง (Light Source) ที่สามารถให้แสงที่ครอบคลุมช่วงความยาวคลื่นที่ต้องการได้, ตัวอย่างที่ต้องการวัดและภาชนะใส่ตัวอย่าง, อุปกรณ์ที่ใช้แยกความยาวคลื่น เช่น เกรตติง (Grating) หรือ ปริซึม (Prism) และส่วนสุดท้ายคือ ตัวตรวจจับสัญญาณ (Detector) (Thirasong S et al., 2016)

การศึกษานี้ได้สร้างชุดทดลองประกอบด้วยส่วนต่างๆ ที่กล่าวมาโดยบรรจุในกล่องไม้พ่นสีดำด้านเพื่อดูดซับแสงสะท้อนภายในกล่อง มีพื้นที่ภายในกว้าง 10 cm ยาว 50 cm ภายในกล่องประกอบไปด้วย แหล่งกำเนิดแสง สลิต (Slit) เกรตติง (Grating) และกล้อง (Webcam Camera) แสดงใน Figure 1



Figure 1 Components of the simple Vis-NIR spectrometer

แหล่งกำเนิดแสง ใช้หลอดไฟ Halogen 12V 50W แสงที่ออกจากแหล่งกำเนิดแสง ที่ 50W มีปริมาณความเข้มแสงที่มากเกินกว่าที่กล้องจะสามารถตรวจวัดได้ จึงจำเป็นต้องใช้ Step-Down Regulator ลดกระแสและแรงดันไฟฟ้าลง โดยการปรับจะสังเกตจากการแสดงผลของกล้องผ่านโปรแกรม Spectral Workbench (Public Lab, USA) โดยค่าแรงดันและกระแสไฟฟ้าที่ใช้เท่ากับ 4.3V 2.1A แสงจากแหล่งกำเนิด ส่องผ่านตัวอย่างที่ต้องการวัดจะ ผ่านเข้าสู่สลิต (slit) ที่มีลักษณะเป็นช่องเรียวยาว โดยใช้แผ่นอะคริลิก ทาสีดำด้านสองชั้นประกบชิดกันมีระยะช่องว่าง เพื่อจำกัดแสงในทิศทางเดียว และจำกัดแสงในทิศทางอื่นให้ได้มากที่สุดแสดงดัง Figure 2

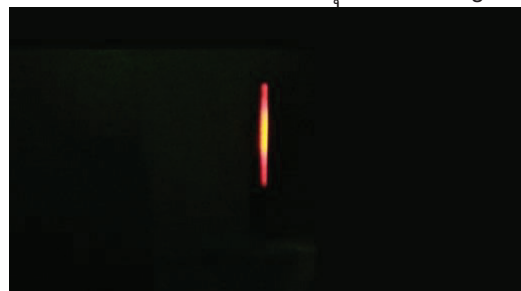


Figure 2 Light passing through the slit

เมื่อแสงจากต้นกำเนิดแสงส่องผ่านตัวอย่างและสลิต จะผ่านเกรตติง (Grating) เข้าสู่กล้อง การหักเหของแสงผ่านเกรตติงเป็นไปดัง Figure 3



Figure 3 The refraction of light through the grating (Theremino, 2017)

แสงที่ผ่านเกรตติงจะหักเหและแยกออกเป็นความยาวคลื่นต่างๆ เนื่องจากเซ็นเซอร์ของกล้องมีขนาดเล็กมาก จึงติดเกรตติงชิดกับเลนส์ของกล้อง มีการปรับแต่งระยะห่างเพื่อให้แสงที่หักเหออกมาตกลงบนที่เซ็นเซอร์ของกล้องโดยมุมที่ได้ คำนวณจากสูตรของเกรตติงดังในสมการที่ 1

$$d \sin \theta = n\lambda \quad (1)$$

โดยกำหนดความยาวคลื่นที่สนใจ อยู่ที่บริเวณ 400-1000 nm กึ่งกลางของกลุ่มความยาวคลื่นที่สนใจ (λ) จะอยู่ที่ 700 nm เลือกแถบสว่างแถบแรกที่เกิดหักเห n เท่ากับ 1 จากนั้นค่า d จะเป็นค่าความกว้างของช่องของเกรตติงที่เลือกใช้ในการพัฒนาชุดทดลองใช้เกรตติงที่มาจากแผ่น CD โดย CD มีค่าระยะ track 625 line mm^{-1} คิดเป็นค่า d เท่ากับ 1600 nm จะคำนวณหามุมได้โดยใช้สมการที่ 1 (Saluka, 2005) โดยมุมที่ได้มีค่าประมาณ 25° จึงวางกล้องทำมุมดังกล่าว (Figure 4) เพื่อบันทึกสเปกตรัมแสงที่จำแนกได้



Figure 4 Webcam camera and its position

2.2 ตัวอย่างที่ใช้ทดสอบชุดทดลองเพื่อศึกษาหลักการพื้นฐานของ VIS-NIR Spectroscopy

เนื่องจากเซ็นเซอร์ที่ใช้เป็นกล้องที่มีความละเอียดต่ำและมีความไวแสงในย่าน NIR ที่ต่ำด้วย จึงยากต่อการตรวจวัดสารที่มีการตอบสนองในช่วงของ NIR จึงเลือกสารละลายน้ำกลั่นผสมสีผสมอาหารสีเขียว และสีแดง ที่ความเข้มข้นต่างกัน (Figure 5) เป็นตัวอย่างในการทดสอบ เนื่องจากแหล่งกำเนิดแสงในย่านสีเขียวและสีแดงมีความเด่นชัด และมีพลังงานมากพอที่สามารถเห็นความแตกต่างของตัวอย่าง



Figure 5 Food color solution with different concentrations used as the testing samples

2.3 วิธีการทดสอบชุดทดลองเพื่อศึกษาหลักการพื้นฐานของ VIS-NIR Spectroscopy

การทดลองแบ่งออกเป็นสามส่วน คือ การวัดด้วยชุดทดลองเพื่อศึกษาหลักการพื้นฐานของ VIS-NIR Spectroscopy การวัดด้วย Avanspec-2048 (Avantes, Netherlands), และการวัดค่าสีด้วยเครื่อง MiniScan EZ (Hunter Lab, USA)

2.3.1 การวัดด้วยชุดทดลองเพื่อศึกษาหลักการพื้นฐานของ VIS-NIR Spectroscopy

ใช้ Cuvette มาตรฐานขนาดหน้าตัด $10 \times 10 \text{ mm}$ ใส่สารละลายที่เตรียมขึ้นในหัวข้อที่ 2.2 (Figure 6)



Figure 6 Solution in the cuvette as the sample representation

ใช้ซอฟต์แวร์ Spectral Workbench (Public Lab, USA) เพื่อทำการตรวจวัดสเปกตรัมที่ได้จากกล้องที่สร้างขึ้น (Figure 7) โดย มีความละเอียด (Resolution) ของ spectrum ประมาณ 2 nm

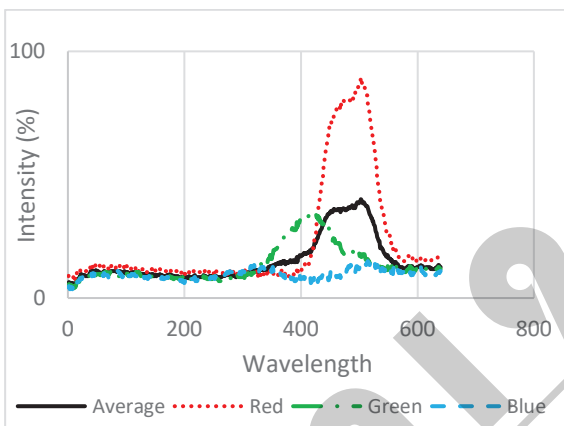


Figure 7 Spectrum from Spectral Workbench software (Public Lab, USA)

2.3.2 การวัดสเปกตรัมด้วย AvanSpec

ใช้ Cuvette มาตรฐานขนาดหน้าตัด 10 x 10 mm ใส่สารละลายที่เตรียมขึ้นในหัวข้อที่ 2.2 เช่นกัน (Figure 8)



Figure 8 Measurements in AvanSpec-2048

โดยการวัดนี้จะเป็นตัวอย่างของสเปกตรัมที่ได้จากเครื่องมาตรฐานซึ่งสเปกตรัมที่ได้จะมีความละเอียดของสเปกตรัมมากกว่า โดยมีความละเอียด (Resolution) ของสเปกตรัม 0.5 nm ดัง Figure 9

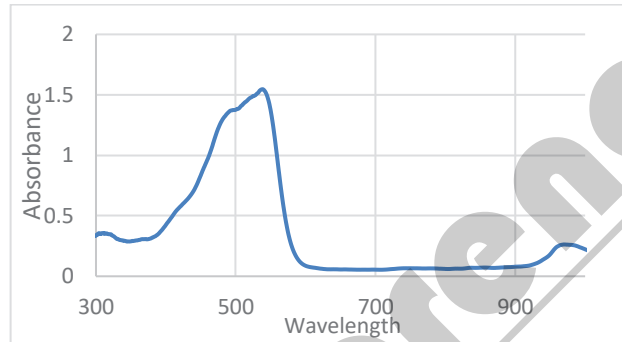


Figure 9 Spectrum from AvanSpec

2.3.3 การวัดค่าสีด้วยเครื่อง MiniScan EZ (Hunter Lab, USA)

เป็นการวัดค่าสีมาตรฐานในหน่วย CIE XYZ เป็นการวัดแบบสะท้อนกลับจากสารละลายสีที่ได้ทำขึ้นดังใน Figure 9



Figure 9 Color measurement using MiniScan EZ

การวัดสีในระบบ CIE จะเป็นการวัดค่าสีที่สัมพันธ์กับการสังเกตด้วยสายตามนุษย์ เกิดจากการหาค่าการตอบสนองของดวงตามนุษย์ต่อแสงสีแดง เขียว และน้ำเงิน ซึ่งจะมากน้อยแค่ไหนขึ้นอยู่กับสมบัติของกลุ่มเซลล์รูปทรงกรวยที่ตำแหน่งจอตา โดยแปลงค่าเป็นค่า X, Y และ Z ตามลำดับ (Rungsritananon, 2013)

3 ผลและวิจารณ์

ผลการวัดค่าสีจากจำนวนตัวอย่างทั้งหมด 24 ตัวอย่าง แสดงใน Table 1 พบว่าการวัดสีแดงและสีเขียว มีการกระจายของค่า X และ Y ที่ดี ซึ่งสอดคล้องกับความสัมพันธ์ของค่า X กับสีแดง และค่า Y กับสีเขียว ส่วนค่า Z มีความสัมพันธ์กับสี

ฟ้า ในการทดลองนี้ไม่ได้ทำการปรับค่าความเข้มข้นด้วยสีฟ้า จึงมีค่าความแปรปรวนของค่า Z ที่ต่ำ

Table 1 Color range of the samples

	X	Y	Z
Max	17.02	23.32	3.46
Min	0.29	0.48	0.21
S.D.	5.26	6.32	0.95

เมื่อนำข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ไปวิเคราะห์ด้วยโปรแกรม Unscramble ดัง Table 2 พบว่าที่ค่า X สามารถทำนายได้ดี โดยมี R^2 Calibration และ Validation ที่ 0.88 และ 0.82 ตามลำดับ ทั้งนี้ แหล่งกำเนิดแสงมีความเข้มแสงในช่วงสีแดง สูงที่สุดทำให้สามารถวัดการเปลี่ยนแปลงของสีแดงได้ดี ส่วนค่า Y มี R^2 Calibration และ Validation ที่ 0.84 และ 0.59 ตามลำดับ ทั้งนี้ เนื่องจากความเข้มแสงในย่านสีเขียวของ แหล่งกำเนิดแสง มีน้อยกว่าในย่านสีแดง ทำให้การทำนายได้ไม่ดีเท่าค่า X ในส่วนของวัดค่า Z ไม่สามารถทำได้ เนื่องจาก ข้อมูลที่ได้มีความแปรปรวนในย่านสีฟ้าที่ตอบสนองกับค่า Z ต่ำ ไม่เพียงพอในการพัฒนาแบบจำลอง

ในส่วนการวิเคราะห์สเปกตรัมที่วัดด้วยเครื่อง AvanSpec-2048 (Avantes, Netherlands) (Table 2) พบว่า สามารถให้ผลวิเคราะห์ได้ดีทั้งสามค่า แสดงให้เห็นถึงผลของความละเอียดและความไวของเซ็นเซอร์มีผลอย่างมากในการวัดและพัฒนาแบบจำลอง มีค่า R^2 Validation ที่ X และ Y สูงถึง 0.95 และ 0.96 ลำดับ ส่วนค่า Z ซึ่งมีค่าความแปรปรวนของ ตัวอย่างที่น้อย ก็สามารถวัดได้โดยมี R^2 Validation เท่ากับ 0.78

Table 2 Results of the prediction models for the developed simple spectrometer

	X	Y	Z
R^2_{CAL}	0.88	0.84	0.46
R^2_{VAL}	0.82	0.59	NA
RMSE	2.59	4.79	NA

Table 3 Results of the prediction models for the AvanSpec-2048 spectrometer

	X	Y	Z
R^2_{Cal}	0.98	0.98	0.87
R^2_{val}	0.95	0.96	0.78
RMSE	1.02	1.42	0.45

4 สรุป

งานวิจัยนี้เป็นการออกแบบและพัฒนาชุดทดลองเพื่อศึกษาหลักการเบื้องต้นของสเปกโตรสโกปี โดยใช้หลอดฮาโล

เจนเพื่อกำเนิดแสง ส่งผ่านตัวอย่างไปยังเกรตติงที่ทำจากแผ่น CD เพื่อกระจายแสงไปยังเซ็นเซอร์ในกล้องเว็บแคม แต่เนื่องจากความละเอียดของเซ็นเซอร์ภาพและระดับความลึกของสีมีค่าต่ำ ทำให้ไม่สามารถจำแนกแสงในย่านสีน้ำเงินและ NIR ได้ดี จึงเลือกทำการทดสอบกับสารละลายสีผสมอาหารที่สีแดงและสีเขียว และที่ความเข้มข้นต่างกัน โดยทำการตรวจวัดค่าสี (CIE XYZ) แล้วนำมาวัดสเปกตรัมด้วยระบบที่พัฒนาขึ้น พร้อมสร้างสมการทำนาย พบว่าสามารถทำนายค่าสี X และ Y ของสารละลายได้โดยมีค่า R^2 เท่ากับ 0.82 0.59 และค่า RMSE เท่ากับ 2.60 และ 4.80 ตามลำดับ ทั้งนี้ ระบบไม่สามารถทำนายค่า Z ได้เนื่องจากข้อจำกัดในการรับสเปกตรัมย่านสีน้ำเงินดังที่กล่าวมา ในการทดลองมีการทดลองเปรียบเทียบกับเครื่อง Spectrometer ที่ใช้จริง จะพบว่าความสามารถในการทำนายเพิ่มขึ้นเป็นอย่างมาก แสดงให้เห็นถึงความสำคัญของสมรรถนะของเซ็นเซอร์และคุณภาพของส่วนประกอบต่างๆในระบบ

5 กิตติกรรมประกาศ

ผู้เขียนขอขอบคุณอาจารย์และเจ้าหน้าที่ประจำภาควิชาวิศวกรรมเกษตร สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบังทุกคน และขอขอบคุณศูนย์วิจัยเนียร์อินฟราเรด สเปกโตรสโกปีสำหรับผลผลิตทางการเกษตรและอาหาร ที่เอื้อเฟื้ออุปกรณ์ในการทดลอง

6 เอกสารอ้างอิง

Haruthai Thanasan V. 2012 Near infrared technology and industrial applications. Bangkok (in Thai)

James Sluka. 2005. Jim's Homemade Spectrometers. Available at: http://www.inpharmix.com/jps/CD_spectro.html. Accessed on 8 February 2019

Rewtrakul V. 1984. Application of spectroscopy in organic chemistry. Bangkok (in Thai)

Rungsritananon P. 2013. Available at: <https://alwayyours.blogspot.com/2013/07/xyz-yxy-ich.html>. Accessed on 20 February 2019. (in Thai)

Theremino. 2017. Theremino Spectrometer. Available at: <https://www.theremino.com/en/downloads/automation>. Accessed on 7 January 2019

การประชุมวิชาการสมาคมวิศวกรรมเกษตรแห่งประเทศไทย ระดับชาติ ครั้งที่ 20 วันที่ 14-15 มีนาคม 2562

Thirasong S, Panichpan Pinyo, Ruenwongsa Pinthip,
Phothong Manatvi and Phongkomputsa Phithak . 2016.

Available at: <https://il.mahidol.ac.th/e-media/color-light/staff.html>. Accessed on 10 February 2019

TSAE 2019 Conference