

ไพธอน โครงสร้างโมเลกุล และกราฟที่เบียร์

ศุภกร รักใหม่

สถาบันวิจัยแสงซินโครตรอน (องค์การมหาชน)

บทคัดย่อ

บทความนี้แสดงความสามารถของภาษาไพธอน โดยเฉพาะอย่างยิ่งในการใช้งานสำหรับการค้นคว้าวิจัยทางวิทยาศาสตร์ บทความยกตัวอย่างโปรแกรมที่ใช้เครื่องมือคำนวณทางคณิตศาสตร์ของไพธอนในการวิเคราะห์ข้อมูล และสร้างแบบจำลองโครงสร้างโมเลกุล และตัวอย่างการใช้เครื่องมือจัดการกราฟิกและอินเตอร์เฟซของไพธอนร่วมกับเครื่องมือสำหรับการคำนวณทางคณิตศาสตร์สร้างโปรแกรมสำหรับการเรียนรู้ ออกแบบกราฟที่เบียร์ และจำลองการปฏิกิริยาที่เบียร์

คำสำคัญ: ไพธอน, การกระเจิงรังสีเอกซ์, การจำลองโครงสร้างโมเลกุล, กราฟที่เบียร์

ปัจจุบันมีภาษาเขียนโปรแกรมจำนวนมากมาย ไพธอนเป็นหนึ่งในภาษาเขียนโปรแกรมที่ใช้กันมากที่สุดในโลก และอยู่ในอันดับที่หนึ่งของการจัดอันดับภาษาเขียนโปรแกรมของปี 2019 [1] อาจกล่าวได้ว่า ไพธอนเป็นภาษายอดนิยมของโลกยุคใหม่ ในความเป็นจริงแล้ว ไพธอนไม่ใช่ภาษาใหม่ ภาษาไพธอนนั้นถือกำเนิดขึ้นเมื่อเกือบสามสิบปีมาแล้ว แต่ในช่วงทศวรรษที่ผ่านมา ไพธอนมีการเติบโตอย่างก้าวกระโดด พร้อมๆกับที่โลกเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็วด้วยเทคโนโลยีป่วนโลกทั้งหลายที่กำเนิดขึ้น แต่การก้าวกระโดดของเทคโนโลยีไม่ใช่แรงขับเคลื่อนที่ทำให้ไพธอนเติบโตอย่างรวดเร็ว แรงขับเคลื่อนที่สำคัญกว่าคือการเปลี่ยนแปลงของแนวคิดองค์รวมของโลก เป็นการเปลี่ยนแปลงที่นำไปสู่ความรู้สึกโหยหาโลกแบบใหม่ โลกที่เห็นแก่ตัวน้อยลง โลกที่การลงแรงก็เพื่อมุ่งหวังโลกที่ดีขึ้น โลกที่ขับเคลื่อนด้วยสปิริตแห่งการแบ่งปัน

ทำไมต้องไพธอน

ไพธอน เป็นภาษาโปรแกรมระดับสูง ซึ่งหมายความว่า เป็นภาษาที่มีโครงสร้างที่เข้าใจง่าย การฝึกเขียนโปรแกรมด้วยไพธอนจึงทำได้ไม่ยาก และใช้เวลาไม่นาน นอกจากนั้น ไพธอนยังเป็นภาษาเชิงวัตถุ ซึ่งหมายความว่า สามารถจัดโปรแกรมเป็นส่วนๆ เหมือนสร้างกล่องเครื่องมือที่บรรจุเครื่องมือสำหรับงานแต่ละชนิดขึ้นมา แล้วเรียกใช้เครื่องมือต่างๆ จากแต่ละกล่อง ทำให้ตัวโปรแกรมหลักนั้นสั้น เป็นระเบียบ และมีประสิทธิภาพสูง

การเป็นภาษาเชิงวัตถุทำให้ผู้ใช้ไพธอนสามารถใช้เครื่องมือจากกล่องเครื่องมือต่างๆ ทั้งที่สร้างขึ้นเอง และที่ผู้อื่นสร้าง และนั่นเป็นหัวใจสำคัญที่ทำให้ไพธอนเติบโตอย่างรวดเร็ว กลายเป็นภาษาโปรแกรมอันดับหนึ่งของโลก และนั่นก็เนื่องมาจากกล่องเครื่องมือ

จำนวนมหาศาลที่ถูกสร้างขึ้นและแบ่งปันกันใช้โดยผู้ใช้ไฟฟอนทั่วโลกผ่านทาง ระบบ “ดัชนีบรรจุภัณฑ์ไฟฟอน” จึงอาจกล่าวได้ว่า ไฟฟอน เป็นภาษาที่กำเนิด ดำรงอยู่ และเติบโต บนสปิริตแห่งการแบ่งปัน

ระบบ “ดัชนีบรรจุภัณฑ์ไฟฟอน” (Python Package Index หรือ PyPI)

บรรจุภัณฑ์ หรือ แพคเกจ (package) ของไฟฟอนนั้น เป็นโปรแกรมย่อย ที่เขียนขึ้นเพื่อใช้เป็นเครื่องมือสำหรับทำงานด้านต่างๆ เช่น แพคเกจชื่อ นัมไพ (numpy) เป็นแพคเกจที่บรรจุเครื่องมือจัดการตัวเลข หรือ แมทพลอตลิบ (matplotlib) เป็นแพคเกจบรรจุเครื่องมือเขียนกราฟแบบต่างๆ PyPI หรือ ไฟพาย นี้ จึงเป็นเหมือน โกดังเก็บกล่องเครื่องมือ

ความพิเศษของโกดังไฟพายนี้ คือ ใครๆ ก็ส่งกล่องเครื่องมือเข้าไปเก็บไว้ได้ และใครๆ ก็สามารถรับกล่องเครื่องมือออกมาใช้ได้ เช่น กลุ่มนักดาราศาสตร์ที่ใช้ไฟฟอนจนชำนาญ เขียนโปรแกรมคำนวณต่างๆ ว่างๆ จากการนั่งดูดาว ก็เปลี่ยนมานั่งจับเครื่องดัด รวบรวม เครื่องมือการคำนวณทางดาราศาสตร์ที่ตัวเองเขียนไว้ รวมเป็นแพคเกจชื่อ แอสโตรไพ (astropy) ส่งเข้าไปเก็บในโกดังไฟพาย นักศึกษาที่กำลังทำวิทยานิพนธ์ทางดาราศาสตร์อยู่อีกมุมโลก ก็สามารถเข้าไปนำกล่องเครื่องมือแอสโตรไพ ออกมา และใช้เครื่องมือคำนวณต่างๆ เกี่ยวกับดวงดาวได้

ปัจจุบัน โกดังไฟพาย มีกล่องเครื่องมือสำหรับใช้งานด้านต่างๆ เก็บอยู่ประมาณหนึ่งแสนสองหมื่นกล่อง เครื่องมือทั้งหมดนั้น เขียนขึ้นโดยผู้ใช้ไฟฟอนจากทุกซอกมุมของโลก และทั้งหมดนั้น ไม่ว่าใคร อยู่มุมไหนของโลก ในประเทศหนาวเย็น ประเทศเขตร้อน ประเทศร่ำรวย ประเทศยากจน หรือแม้แต่ประเทศกึ่งประชาธิปไตยแถวเอเชีย ก็นำออกมาใช้ได้ ...ฟรี ไฟฟอนจึงเป็นภาษาแห่งการแบ่งปัน เป็นสปิริตของโลกสมัยใหม่ หาก อับราฮัม ลินคอล์น ทราบเรื่องไฟฟอน ท่านก็อาจจะอุทานว่า

“นั่นแหละ สิ่งที่ข้าพเจ้าพูดถึง... That’s the language of the people... by the people... for the people”

ไฟฟอนกับการคำนวณทางวิทยาศาสตร์

ไฟฟอนมีกล่องเครื่องมือ หรือแพคเกจที่ใช้ในงานทางวิทยาศาสตร์อยู่หลายแพคเกจ เช่น แพคเกจที่ใช้ในการจัดการกราฟ ชื่อแมทพลอตลิบ (matplotlib) แพคเกจสำหรับการวิเคราะห์ทางสถิติชื่อแพนดา (panda) แพคเกจสำหรับการสร้าง GUI (Graphical User Interface) ชื่อทีเคอินเตอร์ (tkinter) และแพคเกจสำคัญที่บรรจุเครื่องมือคำนวณทางคณิตศาสตร์ คือช่ายไฟ (scipy)

scipy มีเครื่องมือคำนวณทางคณิตศาสตร์ต่างๆ มากมายที่มีประโยชน์กับงานทางฟิสิกส์ เช่น การอินทิเกรต หรือแก้สมการเชิงอนุพันธ์ และที่สำคัญ scipy บรรจุเครื่องมือสำหรับการทำ optimization ที่ทรงประสิทธิภาพ ซึ่งเหมาะสำหรับการวิเคราะห์ข้อมูล และทำแบบจำลองต่างๆ

การจำลองโครงสร้างโมเลกุล จากข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์

การกระเจิงรังสีเอกซ์ เป็นเทคนิคที่ใช้ศึกษาโครงสร้างระดับโมเลกุลภายในสสาร เมื่อรังสีเอกซ์ตกกระทบวัตถุ อันตรกิริยาระหว่างโฟตอนของรังสีเอกซ์และอิเล็กตรอนในวัตถุทำให้งรังสีเอกซ์ที่กระเจิงออกมาสู่หัววัดเกิดเป็นรูปแบบต่างๆ ที่เรียกว่าแผนผังการ

กระเจิงรังสีเอกซ์ (scattering pattern) ในทางคณิตศาสตร์นั้น แผนผังการกระเจิงรังสีเอกซ์เป็นการแปลงฟูริเยร์ (Fourier transform) ของลักษณะการกระจายความหนาแน่นอิเล็กตรอนภายในวัตถุ หรือเขียนเป็นสมการได้ว่า [2]

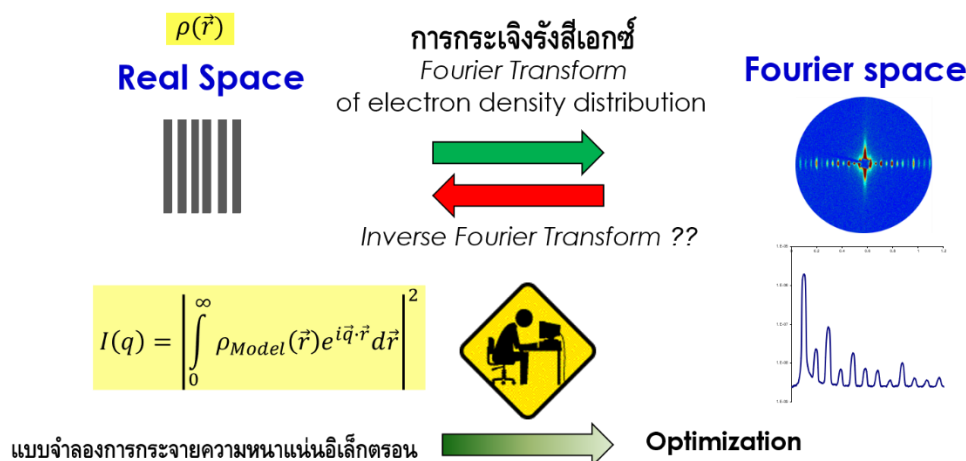
$$I(\vec{q}) = \left| \int_0^\infty \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \right|^2 \quad (1)$$

โดย $I(\vec{q})$ เป็นแผนผังการกระเจิงรังสีเอกซ์ หรือคือความเข้มรังสีเอกซ์ที่กระเจิงเข้าสู่หัววัดที่มุมต่างๆ $\rho(\vec{r})$ เป็นลักษณะการกระจายความหนาแน่นอิเล็กตรอนภายในวัตถุ $\vec{q}$ เป็นเวกเตอร์การกระเจิง และ $\vec{r}$ เป็นเวกเตอร์ตำแหน่ง

ลักษณะการกระจายความหนาแน่นอิเล็กตรอนก็คือรูปร่างของโมเลกุลที่เป็นส่วนประกอบภายในวัตถุนั้นเอง ดังนั้นจึงสามารถหาโครงสร้างโมเลกุลของสารได้โดยการวิเคราะห์แผนผังการกระเจิงรังสีเอกซ์ เพื่อให้ได้ลักษณะการกระจายความหนาแน่นอิเล็กตรอน โดยจากสมการ จะเห็นว่าวิธีที่ตรงไปตรงมาที่สุดคือการทำการแปลงฟูริเยร์ผกผัน (inversed Fourier transform) ของแผนผังการกระเจิงรังสีเอกซ์ แต่ในการทำเช่นนั้น จำเป็นต้องวัดการกระเจิงรังสีเอกซ์เป็นช่วงกว้างถึงอนันต์ ซึ่งในทางปฏิบัติไม่สามารถทำได้ เนื่องจากความจำกัดของขนาดหัววัด

ดังนั้น ในการวิเคราะห์ข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์ จึงต้องอาศัยการทำแบบจำลองของลักษณะการกระจายความหนาแน่นอิเล็กตรอน และทำ optimization ของแบบจำลองกับข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์ที่วัดได้

ขั้นตอนการสร้างแบบจำลองโครงสร้างโมเลกุลจึงประกอบด้วย การวัดการกระเจิงรังสีเอกซ์ การหารูปแบบทางคณิตศาสตร์ของแบบจำลอง และการทำ optimization ของแบบจำลองที่สร้างขึ้น ดังแสดงในรูปที่ 1



รูปที่ 1 การวิเคราะห์ข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์เพื่อหาโครงสร้างโมเลกุลในสาร ลูกศรสีแดง และเครื่องหมายคำถามหลัง Inverse Fourier Transform แสดงถึงความยากหรือเป็นไปได้ในทางปฏิบัติในการหาโครงสร้างโมเลกุลโดยการแปลงฟูริเยร์ผกผันของแผนผังการกระเจิง

ในรูปที่ 2 เป็นหน้าต่างโปรแกรมชื่อแซกโซไฟ (SAXSoPy: SAXS on Python) ซึ่งเป็นโปรแกรมที่เขียนด้วยไพธอน อินเตอร์เฟซของโปรแกรมถูกสร้างด้วยแพ็คเกจ tkinter ในรูปแบบของสมุดโน้ตสำหรับใช้วิเคราะห์ข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์เพื่อหาโครงสร้างโมเลกุล โดยโปรแกรมอ่านข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์ และให้ผู้ใช้เลือกลักษณะการกระจายความหนาแน่นอิเล็กตรอนแบบต่างๆ จากนั้นโปรแกรมใช้เครื่องมือ optimization จากแพ็คเกจ scipy ของไพธอนหาค่าพารามิเตอร์ของการกระจายความหนาแน่นอิเล็กตรอนที่ให้ค่าต่ำสุดของผลต่างระหว่างการกระเจิงรังสีเอกซ์ที่วัดได้ และการกระเจิงรังสีเอกซ์ที่ได้จากแบบจำลอง นั่นคือการทำ chi-squared minimization

$$\chi^2 = \sum \left(\frac{I_{data} - I_{model}}{\sigma} \right)^2 \quad (2)$$

โดย I_{data} เป็นข้อมูลจากการวัดการกระเจิงรังสีเอกซ์ I_{model} เป็นข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์จากแบบจำลอง และ σ เป็นความคลาดเคลื่อนของผลการวัด นอกจาก scipy และ tkinter แล้ว โปรแกรมแซกโซไฟ ใช้แพ็คเกจ matplotlib สำหรับการแสดงกราฟต่างๆ และใช้ numpy ในการจัดการตัวเลข



รูปที่ 2 หน้าปกโปรแกรมแซกโซไฟสำหรับวิเคราะห์โครงสร้างโมเลกุล

โปรแกรมที่เขียนด้วยไพธอนยังสามารถถูกแปลงเป็น executable เพื่อให้สามารถใช้งานบนระบบปฏิบัติการต่างๆ ได้โดยไม่ต้องมีไพธอน ในกรณีของโปรแกรมแซกโซไฟ ได้ถูกแปลงเป็น executable สำหรับใช้งานบนระบบปฏิบัติการ Windows (64bit) สำหรับแจกจ่ายให้ใช้ได้ฟรี (ผู้สนใจสามารถติดต่อผู้เขียนได้ทางอีเมล)

ไพธอนกับการเรียนรู้ และออกแบบกราฟท์เบียร์

นอกจากการคำนวณแล้ว ไพธอนยังมีเครื่องมือสำหรับการจัดการกราฟฟิค และทำ simulation ซึ่งมีประโยชน์ในการสร้างโปรแกรมสำหรับการเรียนรู้ทางวิทยาศาสตร์ ในที่นี้ จะยกตัวอย่างไพธอนสำหรับการเรียนรู้เรื่องกราฟท์เบียร์

เบียร์ เป็นเครื่องดื่มที่อยู่คู่กับมนุษยชาติมาเป็นเวลานาน มีการค้นพบหลักฐานการทำเบียร์อายุกว่า 9000 ปีในประเทศจีน [3] นอกจากนั้น มีการค้นพบแผ่นดินเหนียวจากกรีกอักษรคูนiform ในแถบเมโสโปเตเมียอายุราว 5000 ปี ซึ่งนับเป็น “สลิปเงินเดือน” ชิ้นแรกของโลก แสดงการจ่ายค่าแรงคนงานด้วยเบียร์ [4] เครื่องดื่มเก่าแก่นี้ ได้ถูกพัฒนามาเป็นลำดับ พร้อมๆ กับการเจริญของอารยธรรมโลก เบียร์ในโลกมีอยู่มากมายหลายประเภท ขึ้นกับวัตถุดิบ และเทคนิคที่ใช้ผลิต ปัจจุบันมีการบริโภคเบียร์ทั่วโลกกว่าปีละ 170,000 ล้านลิตร หรือเป็นมูลค่าการตลาดกว่า 10 ล้านล้านบาท [5] ในประเทศไทยเอง ถึงแม้เบียร์ที่มีจำหน่ายในตลาดจะขาดความหลากหลาย เนื่องจากกฎหมายไม่เอื้อให้ประชาชนหรือผู้ผลิตรายย่อยผลิตเบียร์ แต่มูลค่าการตลาดของเบียร์ในประเทศไทยก็ยังมีมูลค่ามหาศาลที่ 131,308 ล้านบาทในปี พ.ศ. 2561 [6]

ทางเลือกของผู้ที่ต้องการดื่มเบียร์ที่มีความหลากหลาย คือ “กราฟท์เบียร์” หรือเบียร์ปรุงมือ ซึ่งหมายถึงการผลิตเบียร์ปริมาณน้อย และการผลิตที่ง่ายที่สุดคือการปรุงเบียร์ดื่มเองที่บ้าน หรือที่เรียกว่าโฮมบรูว์ ซึ่งตามกฎหมายควบคุมการผลิตสุรา (รวมถึงเบียร์) ฉบับใหม่ของประเทศไทย มีผลบังคับใช้เมื่อวันที่ 20 มีนาคม 2560 ได้มีการเพิ่มข้อยกเว้น “การประดิษฐ์ค้นคว้าที่มิได้ทำขึ้นเพื่อขาย” ซึ่งหมายความว่าประชาชนสามารถทำเบียร์เพื่อการศึกษาวิจัย หรือเพื่อการบริโภคที่ไม่ใช่เพื่อจำหน่ายได้ [7]

การปรุงเบียร์ประกอบด้วยสามกระบวนการหลัก คือ การแช่ (mashing) การต้ม (boiling) และการหมัก (fermenting) ทั้งสามกระบวนการต้องอาศัยความรู้ทางวิทยาศาสตร์หลายแขนง ศาสตร์ของการปรุงเบียร์จึงเป็นส่วนสำคัญของหลักสูตร Fermentation Science และ Agricultural Science ในมหาวิทยาลัยใหญ่ๆ หลายแห่งของโลก เช่นที่มหาวิทยาลัยแห่งรัฐ โอเรกอน (Oregon State University) ซึ่งเป็นแหล่งกำเนิดวิทยาการสำคัญเกี่ยวกับเบียร์ในหลายด้าน รวมถึงการคิดค้นสายพันธุ์ฮอปหลายสายพันธุ์ซึ่งเป็นหนึ่งในวัตถุดิบสำคัญของกราฟท์เบียร์

วัตถุดิบหลักสำหรับปรุงเบียร์คือมอลต์ หรือคือข้าวเพาะงอกซึ่งส่วนใหญ่ใช้ข้าวบาร์เลย์ หรือข้าวสาลี เมื่อเพาะงอกแล้ว มอลต์จะถูกอบแห้งด้วยความร้อนระดับต่างๆ กัน การอบแห้งทำให้มอลต์เกิดสี ตั้งแต่เหลืองอ่อน น้ำตาล จนถึงดำ มอลต์ที่ใช้ทำเบียร์จึงจะมีค่าสีที่กำหนดโดยผู้ผลิต ซึ่งสีของเบียร์ที่จะได้ สัมพันธ์กับสีของมอลต์ที่ใช้ โดยในกลุ่มผู้ปรุงเบียร์นิยมประมาณสีเบียร์จากสมการของมอเรย์ (Morey's equation) [8]

$$Color = 1.4922 * MCU^{0.6859} \quad (3)$$

โดย MCU คือ malt color unit ซึ่งเป็นค่าสีรวมของมอลต์ที่ใช้ และค่าสีมีหน่วยเป็น Standard Reference Unit (SRM) ซึ่งนิยามจากการดูดกลืนแสงความยาวคลื่น 430 นาโนเมตร [9]

การเมชนั้นเป็นการสกัดน้ำตาลจากแป้งในมอลต์โดยอาศัยการทำงานของเอนไซม์หลักสองตัวซึ่งอยู่ในมอลต์ คือ อัลฟาอะไมเลส (ย่อยแป้งให้น้ำตาลโมเลกุลใหญ่) และเบตาอะไมเลส (ย่อยแป้งให้น้ำตาลมอลโตส) และสามารถกำหนดคุณลักษณะบางด้าน เช่น ความหนาบางของเบียร์ (ซึ่งเกี่ยวข้องกับสัดส่วนน้ำตาลโมเลกุลใหญ่และน้ำตาลมอลโตสที่ถูกสกัดออกมา) ได้ด้วยการกำหนดอุณหภูมิของการเมชระหว่างอุณหภูมิ 60 – 72 เซลเซียส ซึ่งเป็นสภาวะเหมาะสมของการทำงานของเบตาอะไมเลส และอัลฟาอะไมเลส ตามลำดับ นอกจากนี้ ในขั้นนี้ผู้ปรุงเบียร์ต้องคำนวณปริมาณน้ำตาลที่จะได้จากปริมาณแป้งของมอลต์ที่ใช้ ซึ่งปริมาณน้ำตาลที่ได้จะเป็นตัวกำหนดปริมาณแอลกอฮอล์ในเบียร์

น้ำตาลที่สกัดได้จากมอลต์ เรียกว่าเวิร์ท (wort) หลังจากได้เวิร์ทแล้ว ขั้นตอนต่อไปคือการต้ม ซึ่งนอกจากเป็นการฆ่าเชื้อแบคทีเรียแล้ว ในกระบวนการนี้ยังมีขั้นตอนสำคัญของกระบวนการปรุงเบียร์ คือการใส่ความขมให้กับเบียร์ ความขมของเบียร์นั้นเกิดจากการใส่ฮอป ซึ่งเป็นดอกของพืชไม้เลื้อยในตระกูลแคนาเบส ในดอกฮอปมีสารส่วมไม่ละลายน้ำที่ชื่อฮูมูโลน ซึ่งเมื่อโดนความร้อนจากการต้มจะเกิดการเปลี่ยนรูปทางเคมีผ่านกระบวนการไอโซเมไรเซชัน (isomerization) กลายเป็นสารไอโซฮูมูโลนซึ่งละลายน้ำได้ดี และระดับความขมของเบียร์นั้นกำหนดโดยปริมาณส่วมในล้านส่วม (ppm) ของไอโซฮูมูโลนที่ละลายอยู่ในน้ำเบียร์ โดย 1 IBU (International Bitterness Unit) หมายถึงมีไอโซฮูมูโลน 1 ppm อยู่ในน้ำเบียร์

ระดับความขมของเบียร์คำนวณได้จาก

$$IBU = \frac{W \times A \times U \times 10}{V} \quad (4)$$

โดย W เป็นปริมาณฮอป (กรัม) A เป็นสัดส่วนฮูมูโลนในฮอป (%) V เป็นปริมาตรเบียร์ และ U เป็นอัตราการใช้ฮูมูโลน หรือเรียกว่า utilization ของฮอป

ตัวแปรสำคัญในการคำนวณความขมของเบียร์คือค่า utilization ซึ่งการคำนวณปริมาณดังกล่าวนี้ ยังไม่มีแบบจำลองที่สร้างจากปฏิกิริยาไอโซเมไรเซชันของฮูมูโลนโดยตรง แต่นิยมใช้แบบจำลองเชิงประจักษ์ โดยหนึ่งในแบบจำลองที่นิยมใช้คือ ค่า utilization ที่ขึ้นกับระยะเวลาการต้ม และค่าความถ่วงจำเพาะของเวิร์ท (ซึ่งคือความเข้มข้นน้ำตาล) โดย ค่า utilization ที่เวลาใดๆ ได้จาก [9]

$$U = BF \times BTF \quad (5)$$

โดย BF เรียกว่า Bigness Factor ซึ่งเป็นเทอมที่ขึ้นกับค่าความถ่วงจำเพาะ และ BTF เป็น Boil Time Factor ซึ่งเป็นเทอมที่ขึ้นกับเวลา โดยที่

$$BF = 1.65 * 0.000125^{(OG-1)}$$

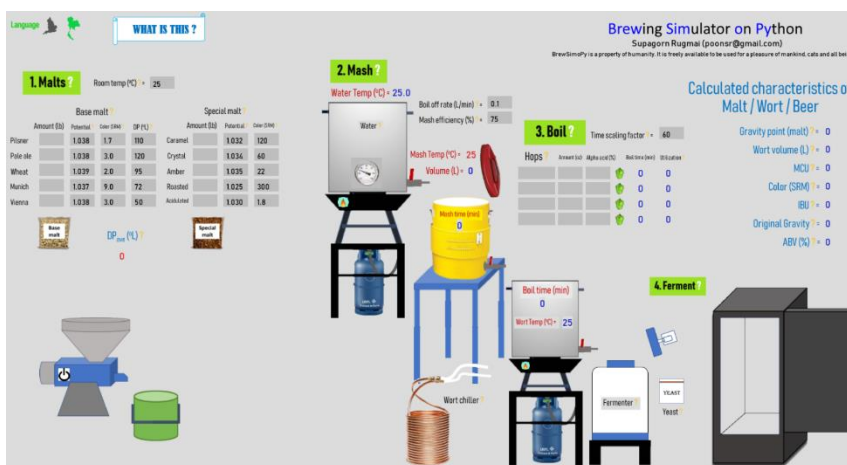
$$BTF = \frac{1 - e^{-0.04t}}{4.15}$$

โดย OG (Original Gravity) เป็นค่าความถ่วงจำเพาะของเวิร์ท และ t เป็นเวลา แต่เนื่องจาก OG ก็เป็นฟังก์ชันของเวลาเช่นกัน ดังนั้นจึงได้ค่า utilization เฉลี่ยที่เวลาต้ม t_{boil} (นาที) เป็น

$$U_{ave}(t_{boil}) = \frac{\int_0^{t_{boil}} U(t, OG(t))}{t_{boil}} \quad (6)$$

ในการปรุงเบียร์ ผู้ปรุงต้องวางแผนเป้าหมายคุณลักษณะของเบียร์ที่ต้องการ จากนั้นจึงเลือกวัตถุดิบ และวางแผนขั้นตอนการปรุง ซึ่งการที่จะได้เบียร์ที่มีลักษณะตามที่ต้องการนั้น จำเป็นต้องคำนวณลักษณะต่างๆ ของเบียร์จากวัตถุดิบและกระบวนการที่ใช้ ดังนั้นความสามารถในการจำลองการปรุงเบียร์บนคอมพิวเตอร์จึงอาจช่วยให้ได้เบียร์ที่ใกล้เคียงกับเป้าหมายมากที่สุด

ไพธอนมีแพ็คเกจชื่อ pygame ซึ่งบรรจุเครื่องมือสำหรับการจัดการกราฟิก และการอินเตอร์เฟสกับเมาส์ และแป้นพิมพ์ ถึงแม้แพ็คเกจ pygame จะถูกสร้างขึ้นเพื่อการเขียนเกมส์ แต่เครื่องมือภายในสามารถใช้ในการสร้างโปรแกรม เพื่อการเรียนรู้ได้เป็นอย่างดี และเมื่อรวมกับแพ็คเกจ scipy จึงสามารถสร้างโปรแกรมทำ calculation-simulation ที่รวมการเรียนรู้เข้ากับการคำนวณทางวิทยาศาสตร์



รูปที่ 3 ภาพหน้าต่างโปรแกรมเบรสิโมไพ (Brewing Simulator on Python) สำหรับการเรียนรู้และออกแบบกราฟที่เบียร์ โดยผู้ใช้งานสามารถเรียนรู้กระบวนการปรุงเบียร์ โดยมีคำอธิบายวัตถุดิบ และอุปกรณ์ต่างๆ พร้อมทั้งสามารถคำนวณคุณลักษณะเบียร์จากวัตถุดิบและกระบวนการที่ใช้ได้

รูปที่ 3 แสดงภาพหน้าต่างโปรแกรมเบรสิโมไพ (Brewing Simulator on Python) ซึ่งเขียนขึ้นด้วยไพธอนโดยใช้ pygame และ scipy สำหรับการเรียนรู้การทำกราฟที่เบียร์แบบโฮมเบรวิ โดยผู้ใช้งานสามารถเลือกใช้วัตถุดิบ และทำการปรุงเบียร์ได้บนหน้าจอคอมพิวเตอร์ตามกระบวนการเหมือนจริง แต่ย่นระยะเวลาสั้นลง และบรรจุคำอธิบายของกระบวนการ วัตถุดิบ และอุปกรณ์ต่างๆ โดยสามารถเลือกเป็นภาษาไทยหรือภาษาอังกฤษ พร้อมกับคำนวณคุณลักษณะของเบียร์ เช่น สี และความขม ตามสมการที่ 3-6 แบบเรียลไทม์ด้วย โปรแกรมเบรสิโมไพ ยังถูกแปลงเป็น executable ที่สามารถใช้งานบนระบบปฏิบัติการ Windows (64bit) ได้โดยไม่ต้องมีไพธอน ผู้สนใจสามารถดาวน์โหลดโปรแกรมเพื่อนำไปใช้งาน เรียนรู้ หรือใช้สำหรับการเรียนการสอนได้ฟรีทาง www.facebook.com/purbeer

สรุป

ไพธอน เป็นภาษาเขียนโปรแกรมเชิงวัตถุที่ใช้งานง่าย และมีประสิทธิภาพสูง ทั้งยังมีเครื่องมือที่เหมาะสมกับการศึกษาวิจัยทางวิทยาศาสตร์ โดยเฉพาะอย่างยิ่งแพ็คเกจ scipy ของไพธอนมีเครื่องมือที่มีประสิทธิภาพสำหรับการวิเคราะห์ข้อมูลและทำแบบจำลองทางวิทยาศาสตร์ ยิ่งไปกว่านั้น ไพธอนยังมีแพ็คเกจ pygame ซึ่งเป็นเครื่องมือที่ใช้สำหรับเขียนเกมแต่เมื่อรวมกับแพ็คเกจ scipy สามารถใช้พัฒนาโปรแกรมแบบ calculation-simulation สำหรับการเรียนรู้และใช้งานทางวิทยาศาสตร์ได้เป็นอย่างดี ในบทความนี้ได้แสดงตัวอย่างโปรแกรมไพธอนชื่อ SAXSoPy สำหรับการวิเคราะห์ข้อมูลการกระเจิงรังสีเอกซ์เพื่อสร้างแบบจำลองโครงสร้างโมเลกุล และโปรแกรม BrewSimoPy สำหรับการเรียนรู้และออกแบบกราฟที่เบียร์ เพื่อแสดงให้เห็นประสิทธิภาพของไพธอน โดยทั้งสองโปรแกรมนั้นแจกจ่ายให้ผู้สนใจได้ใช้ฟรี เพื่อรักษาสปิริตของการแบ่งปันของไพธอน

เอกสารอ้างอิง

- [1] IEEE Spectrum, September 2019
- [2] A. Guinier and G. Fournet, Small-Angle Scattering of X-rays, John Wiley and Sons, 1955, New York.
- [3] P. E. McGovern, J. Zhang, J. Tang, Z. Zhang, G. R. Hall, R. A. Moreau, A. Nuñez, E. D. Butrym, M. P. Richards, C. S. Wang, G. Cheng, Z. Zhao and C. Wang, "Fermented beverages of pre- and proto-historic China", Proceedings of the National Academy of Sciences, 101(51), 17593 (2004).
- [4] A. George, "The world's oldest paycheck was cashed in beer", New Scientist, June 2016
- [5] Beer and Cider Global Industry Guide 2013-2022, Research and Market, March 2019
- [6] สถิติอุตสาหกรรม, สำนักงานเศรษฐกิจอุตสาหกรรม กระทรวงอุตสาหกรรม
- [7] พระราชบัญญัติภาษีสรรพสามิต พ.ศ. 2560
- [8] D. Morey, Brewingtechniques, <http://www.morebeer.com/brewingtechniques/beerslaw/morey.html>
- [9] I. Stone and M. C. Miller, "The standardization of methods for the determination of color in beer", American Society of Brewing Chemists Proceedings, 7, 140 (1949).
- [10] G. Tinseth, Hop utilization numbers, <https://realbeer.com/hops/research.html>