



การพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายเพื่อนำมาใช้ในการตรวจสอบสารปลอมปนใน
แป้งเด็กและแป้งที่ใช้บริโภค

โดย

นางสาวณิกานต์ เต็มสายทอง



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผน ก แบบ ก 1

ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า

มหาวิทยาลัยศิลปากร

ปีการศึกษา 2567

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยศิลปากร

การพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายเพื่อนำมาใช้ในการตรวจสอบสาร
ปลอมปนในแป้งเด็กและแป้งที่ใช้บริโภค



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผน ก แบบ ก 1
ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า
มหาวิทยาลัยศิลปากร
ปีการศึกษา 2567
ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยศิลปากร

DEVELOPMENT OF A NON-DESTRUCTIVE OPTICAL MEASUREMENT
TECHNIQUE FOR THE DETECTION OF ADULTERANTS IN BABY POWDER AND
EDIBLE STARCH.



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	การพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายเพื่อนำมาใช้
	ในการตรวจสอบสารปลอมปนในแป้งเด็กและแป้งที่ใช้บริโภค
โดย	นางสาวณิกานต์ เต็มสายทอง
สาขาวิชา	วิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผนก ก แบบ ก 1
อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก	ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ระพีพันธ์ แก้วอ่อน
อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม	ดร. เกียรติวุฒิ ประเสริฐสุข

คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยศิลปากร ได้รับพิจารณาอนุมัติให้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษา ตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

	คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์และ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. อรุณศรี ลีจิระจำเริญ)	เทคโนโลยีอุตสาหกรรม

พิจารณาเห็นชอบโดย

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

650920012 : วิศวกรรมไฟฟ้าและคอมพิวเตอร์ แผน ก แบบ ก 1

คำสำคัญ : การตรวจวัดทัลก์ (Talc) การจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ (Talc) การทำนายปริมาณของทัลก์ (Talc) พูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโตรสโคปี เทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโตรสโคปี การเรียนรู้ของเครื่อง สารปลอมปน ผลิตภัณฑ์แบ่งเด็ก ผลิตภัณฑ์แบ่งที่ใช้บริโภค

นางสาว นิชกานต์ เต็มสายทอง: การพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายเพื่อนำมาใช้ในการตรวจสอบสารปลอมปนในแบ่งเด็กและแบ่งที่ใช้บริโภค อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ระพีพันธ์ แก้วอ่อน

วิทยานิพนธ์นี้นำเสนอวิธีการตรวจวัดการมีอยู่ของแร่ทัลก์ (Talc) ในผลิตภัณฑ์แบ่งฝุ่นโดยใช้เทคนิคสเปกโตรสโคปีเชิงแสงแบบไม่ทำลายด้วยเทคนิคพูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโตรสโคปี (FT-IR) และเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโตรสโคปี (THz-TDS) เพื่อให้ข้อมูลสเปกตรัมที่ตรวจวัดได้ครอบคลุมช่วงคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าตั้งแต่ย่านอินฟราเรดกลางจนถึงเทราเฮิร์ตซ์ ซึ่งย่านดังกล่าวมีศักยภาพในการระบุอันตรายที่เกิดขึ้นภายในหรือระหว่างโมเลกุลของแร่ทัลก์และมีความเป็นไปได้ในการนำไปประยุกต์ใช้สำหรับการจำแนกประเภทการเคลือบของแร่ทัลก์ โดยในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ได้ทำการศึกษาผลการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายของทั้งสองเทคนิคดังกล่าวข้างต้นและนำข้อมูลที่ได้จากการตรวจวัดไปประมวลผลโดยจะมีการใช้ข้อมูลสเปกตรัมในคลื่นย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far-IR) ร่วมกับการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมด้วยเทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ซึ่งผลทดสอบการจำแนกให้ความแม่นยำสูงสุดถึง 100% ในย่าน Far-IR และ 93.33% ในย่าน Mid-IR สำหรับการวิเคราะห์ปริมาณของแร่ทัลก์ จะมีการใช้ข้อมูลสเปกตรัมคลื่นย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) ในช่วงเลขคลื่นระหว่าง $160-180\text{ cm}^{-1}$ ที่แสดงลักษณะของพีคที่ชัดเจนและสัมพันธ์กับปริมาณของแร่ทัลก์ ซึ่งผลทดสอบการทำนายปริมาณโดยใช้เทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง พบว่าค่าความผิดพลาดในการทำนาย (RMSE) อยู่ที่ 0.23 มิลลิกรัม โดยมีค่าสัมประสิทธิ์แสดงการตัดสินใจ (R^2) อยู่ที่ 0.97 ผลการศึกษาเหล่านี้ชี้ให้เห็นถึงความสามารถของเทคนิคที่นำเสนอในการตรวจวัดแร่ทัลก์ในผลิตภัณฑ์แบ่งฝุ่นได้อย่างแม่นยำ ลดความเสี่ยงจากข้อผิดพลาดในการวิเคราะห์ และเป็นหนึ่งในวิธีทางเลือกที่จะสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการตรวจวัดผลิตภัณฑ์ที่มีส่วนผสมของทัลก์ได้ในอุตสาหกรรมต่อไปในอนาคตได้

650920012 : Major ELECTRICAL AND COMPUTER ENGINEERING

Keyword : Talc detection Talc coating classification Talc concentration prediction

Fourier Transform Infrared Spectroscopy Terahertz Time-Domain Spectroscopy

Machine Learning Adulterant Baby Powder Products Edible Starch

MISS Nichakarn TERMSAITHONG : Development of a non-destructive optical measurement technique for the detection of adulterants in baby powder and edible starch. Thesis advisor : Assistant Professor Rapeepan Keawon, Ph.D.

This thesis presents non-destructive optical spectroscopy method for detecting the presence of talc in powder products using Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) and Terahertz Time-Domain Spectroscopy (THz-TDS) to provide spectral data covering the electromagnetic spectrum from the middle infrared to terahertz regions. These regions has potential to identify intramolecular and intermolecular interactions occurring within or between the molecules of talc. In this thesis, non-destructive measurements from both techniques mentioned above were analyzed using mid-infrared (Mid-IR) and far-infrared (Far-IR) spectral data, along with machine learning (ML) techniques. The classification results achieved an accuracy of up to 100% in the Far-IR region and 93.33% in the Mid-IR region. For quantitative talc analysis, Far-IR spectral data in the wavenumber range of $160\text{--}180\text{ cm}^{-1}$, where clear peaks corresponding to talc concentration were observed, were utilized. Prediction tests using machine learning techniques indicated a prediction error (RMSE) of 0.23 milligrams and a coefficient of determination (R^2) of 0.97. These findings demonstrate the capability of the proposed method for accurate talc detection in powder products, reducing analysis errors and offering an alternative method that can be applied for detecting talc-containing products in future industrial applications.

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้เสร็จสมบูรณ์ได้ด้วยความช่วยเหลือและการให้คำปรึกษาจากหลายท่าน ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณอย่างยิ่ง โดยเฉพาะอย่างยิ่ง อาจารย์ ดร.ระพีพันธ์ แก้วอ่อน อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ที่ได้ให้คำแนะนำอย่างละเอียดและให้การสนับสนุนในทุกขั้นตอนของการทำวิจัย รวมทั้ง อาจารย์ ดร.โสภณ ผู้มีจรรยา ประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์, อาจารย์ ดร.ภมร ศิลาพันธ์ กรรมการผู้ทรงคุณวุฒิภายใน และ ดร.มติ ห่อประทุม ผู้ทรงคุณวุฒิภายนอก ที่ได้กรุณาให้ข้อเสนอแนะและคำแนะนำที่มีคุณค่าในกระบวนการสอบและปรับปรุงผลงานวิจัย ทำให้ผลงานชิ้นนี้มีคุณภาพและเสร็จสมบูรณ์ตามวัตถุประสงค์

นอกจากนี้ ขอขอบพระคุณ ดร.เกียรติวุฒิ ประเสริฐสุข และ ดร.รุ่งโรจน์ จินตเมธาสวัสดิ์ ที่ได้เสียสละเวลาอันมีค่าในการถ่ายทอดความรู้ด้านเครื่องมือวิจัย การวางแผนการทดลองอย่างเป็นระบบ และช่วยแก้ไขปัญหที่เกิดขึ้นตลอดระยะเวลาของการทำงาน ทำให้ผู้วิจัยได้มีโอกาสเรียนรู้วิธีการทำงานอย่างมืออาชีพ และได้แสดงความสามารถในการทำงานวิจัยอย่างเต็มที่

ขอขอบพระคุณ ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยศิลปากร ที่ได้มอบโอกาสในการศึกษาและทำวิจัย รวมถึงขอขอบคุณอาจารย์และเจ้าหน้าที่ทุกท่านที่ให้การสนับสนุนตลอดการศึกษาและการทำวิจัย นอกจากนี้ ขอขอบพระคุณ ทีมวิจัยเทคโนโลยีเทราเฮิรตซ์ ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (เนคเทค-สวทช.) ที่ได้สนับสนุนอุปกรณ์และสถานที่สำหรับการวิจัย พร้อมทั้งบรรยากาศการทำงานที่เปี่ยมไปด้วยความรู้ มิตรภาพ และประสบการณ์ที่ดี

สุดท้ายนี้ ขอขอบคุณทุกคนที่ไม่ได้เอ่ยนาม แต่ได้ให้การสนับสนุนและกำลังใจตลอดระยะเวลาของการศึกษา หากมีข้อบกพร่องประการใด ผู้วิจัยขอน้อมรับไว้และจะนำไปปรับปรุงต่อไป

ณิชานต์ เต็มสายทอง

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.....	3
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	4
บทที่ 2 ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	5
2.1 ความรู้เกี่ยวกับทัลก์ที่ใช้เป็นส่วนผสมหลักในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่น	5
2.1.1 ทัลก์ (Talc) สู่ทัลค์ที่นำไปใช้งานในด้านต่างๆ.....	5
2.1.2 ทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก	5
2.1.3 ทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค	6
2.2 การปนเปื้อนของทัลก์และผลกระทบทางด้านสุขภาพ.....	7
2.2.1 การปนเปื้อนของแร่ใยหิน (Asbestos) ในทัลก์.....	7
2.2.2 ผลกระทบของทัลก์และแร่ใยหินต่อสุขภาพ	8
2.3 เทคนิคการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายเพื่อใช้ตรวจจับสารปลอมปน	10

2.3.1 เทคนิคสเปกโทรสโกปี (Spectroscopy)	10
2.3.2 การประยุกต์ใช้สเปกโทรสโกปีในช่วงคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าต่างๆ	11
2.4 การประยุกต์ใช้การตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายโดยอาศัยคลื่นอินฟราเรดและเทราเฮิร์ตซ์ สำหรับการวิเคราะห์สารปลอมปนในแป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งฝุ่นสำหรับบริโภค.....	13
2.4.1 คลื่นเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz wave; THz).....	14
2.4.2 คลื่นอินฟราเรด (Infrared Wave; IR)	15
2.5 เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy; FT-IR).....	16
2.5.1 หลักการทำงานของเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มสเปกโทรสโกปี (FT-IR).....	18
2.6 เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy; THz-TDS)	19
2.6.1 หลักการทำงานของเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (THz-TDS).....	20
2.7 การใช้ข้อมูลสเปกตรัมเพื่อการวิเคราะห์ในเชิงคุณภาพ (Using spectral data for qualitative analysis).....	22
2.7.1 การใช้สเปกตรัมในการระบุและจำแนกองค์ประกอบของสารเคมี	22
2.7.2 การใช้ตำแหน่งพีคในการจำแนกแป้งที่มีส่วนผสมของทัลก์	23
2.8 การประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมและการประยุกต์ใช้ Machine Learning.....	23
2.8.1 วิธีการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing).....	23
2.8.2 การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA)	24
2.8.3 การสร้างแบบจำลองในการตรวจวัดทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งฝุ่น สำหรับบริโภค	26
2.9 การใช้ข้อมูลสเปกตรัมของทัลก์เพื่อการวิเคราะห์ในเชิงปริมาณ (Using spectral data for quantitative).....	27
2.9.1 การใช้แบบจำลองเชิงเส้นในการตรวจหาทัลก์ในเชิงปริมาณ	27
2.10 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	29

บทที่ 3 วิธีดำเนินการวิจัย.....	39
3.1 การเตรียมสารตัวอย่าง.....	40
3.1.1 สารเคมีที่ใช้ในงานวิจัย	40
3.1.2 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง.....	41
3.2 การใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลาย.....	48
3.2.1 เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย	48
3.2.2 ขั้นตอนการตั้งค่าเครื่อง Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR)	48
3.2.3 ขั้นตอนการตั้งค่าเครื่องเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (THz-TDS).....	49
3.3 วิธีการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing).....	51
3.4 การวิเคราะห์คุณลักษณะการดูดกลืนแสงของสเปกตรัม (Spectral Absorption Characteristics Analysis).....	51
3.5 การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning).....	54
3.5.1 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (Qualitative Analysis): สร้างแบบจำลองเพื่อตรวจวัดและ จำแนกการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กและผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค	54
3.5.2 การวิเคราะห์เชิงปริมาณ (Quantitative Analysis): สร้างแบบจำลองการทำนาย ปริมาณความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่าง	56
3.5.3 การนำไปประยุกต์ใช้ในการจำแนกการเคลือบของทัลก์ในอุตสาหกรรม: สร้าง แบบจำลองเพื่อจำแนกประเภทการเคลือบผิวทัลก์ (Classification of Talc Coatings)	58
บทที่ 4 ผลการทดลองของงานวิจัย.....	62
4.1 การวิเคราะห์ทัลก์มาตรฐาน (Talc Standard)	62
4.1.1 การวิเคราะห์สเปกตรัมของทัลก์มาตรฐาน: การเปรียบเทียบผลลัพธ์ก่อนและหลังการ ประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing)	62
4.1.2 การวิเคราะห์คุณลักษณะสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis).....	67

4.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (Qualitative Analysis): การพัฒนาแบบจำลองตรวจวัดและจำแนกการมีอยู่ของทัลกในผลิตภัณฑ์	69
4.2.1 การวิเคราะห์คุณลักษณะสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis) ของผลิตภัณฑ์แป้งเด็กและแป้งสำหรับบริโภค	69
4.2.2 การนำแบบจำลองมาใช้ในการตรวจวัดทัลกในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภค	72
4.3 การวิเคราะห์เชิงปริมาณ (Quantitative Analysis): การพัฒนาแบบจำลองสำหรับทำนายปริมาณทัลกในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กโดยใช้ข้อมูลจากทัลกมาตรฐาน	73
4.3.1 การวิเคราะห์สเปกตรัมของตัวอย่างทัลกมาตรฐานในความเข้มข้นที่หลากหลาย	74
4.3.2 กระบวนการประมวลผลเบื้องต้นของข้อมูลสเปกตรัม (Spectral Pre-processing Data)	75
4.3.3 การสร้างแบบจำลองทำนายความเข้มข้นของทัลกมาตรฐาน (Modeling for Concentration Prediction)	75
4.3.4 การปรับปรุงแบบจำลอง PLS Regression สำหรับการทำนายความเข้มข้นของทัลกโดยใช้การเลือกช่วงเลขคลื่น (Feature Selection) และคุณลักษณะที่สำคัญ (Feature Importance)	77
4.3.5 การประเมินความแม่นยำในการทำนายความเข้มข้นของทัลกมาตรฐานด้วยแบบจำลอง PLS Regression	80
4.3.6 การนำแบบจำลอง PLS Regression ไปประยุกต์ใช้ทำนายความเข้มข้นของทัลกที่มีอยู่ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก	82
4.4 การประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมเครื่องสำอางที่มีการใช้ทัลกที่ผ่านกระบวนการเคลือบต่างๆ: การสร้างแบบจำลองเพื่อจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก	84
4.4.1 การวิเคราะห์รูปแบบของสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Absorption Spectra) และกระบวนการประมวลผลเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing) ของทัลกที่ผ่านกระบวนการเคลือบที่แตกต่าง	84

4.4.2 การวิเคราะห์เปรียบเทียบคุณลักษณะสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis) ของทัลก์ที่ผ่านกระบวนการประมวลผลเบื้องต้นแล้ว.....	87
4.4.3 การจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์โดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis Results; PCA).....	88
4.4.4 การจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์โดยใช้เทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง (Classification Performance using Machine Learning).....	89
บทที่ 5 สรุปและข้อเสนอแนะ	93
5.1 สรุปผลการวิจัย	93
5.2 ข้อเสนอแนะ	94
5.3 แนวทางการพัฒนาต่อยอด.....	95
รายการอ้างอิง	96
ประวัติผู้เขียน.....	104



สารบัญตาราง

หน้า

ตารางที่ 1 การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคต่างๆในช่วงคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า	11
ตารางที่ 2 ข้อดีและข้อจำกัดของเทคนิคอินฟราเรด (IR) และเทคนิคเทราเฮิรตซ์ (THz)	14
ตารางที่ 3 การเปรียบเทียบงานวิจัยที่ผ่านมาสำหรับการตรวจวัดทัลก์และทำนายปริมาณทัลก์	37
ตารางที่ 4 รายชื่อผลิตภัณฑ์เพื่อใช้เป็นข้อมูลการฝึกสอนโมเดลในการตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์	43
ตารางที่ 5 รายชื่อผลิตภัณฑ์เพื่อใช้เป็นข้อมูลการทดสอบโมเดลในการตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์	44
ตารางที่ 6 สัดส่วนการเตรียมตัวอย่างของทัลก์มาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณ	45
ตารางที่ 7 การเตรียมตัวอย่างทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบแตกต่างกัน 3 แบบ	47
ตารางที่ 8 ตำแหน่งพีกของสเปกตรัมและความสัมพันธ์กับกลุ่มฟังก์ชัน	68
ตารางที่ 9 ผลการทดสอบความแม่นยำของแบบจำลอง Linear Regression และ PLS Regression	76
ตารางที่ 10 การประเมินประสิทธิภาพของโมเดล PLS Regression ในการทำนายความเข้มข้น ของทัลก์มาตรฐานที่สร้างจากช่วงเลขคลื่นต่างๆ	78
ตารางที่ 11 ผลการทำนายความเข้มข้นของทัลก์จากโมเดล PLS Regression (component = 6)	81
ตารางที่ 12 แสดงผลการประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลองที่ใช้ในการจำแนกประเภทการเคลือบ ของทัลก์ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล	91

สารบัญรูปภาพ

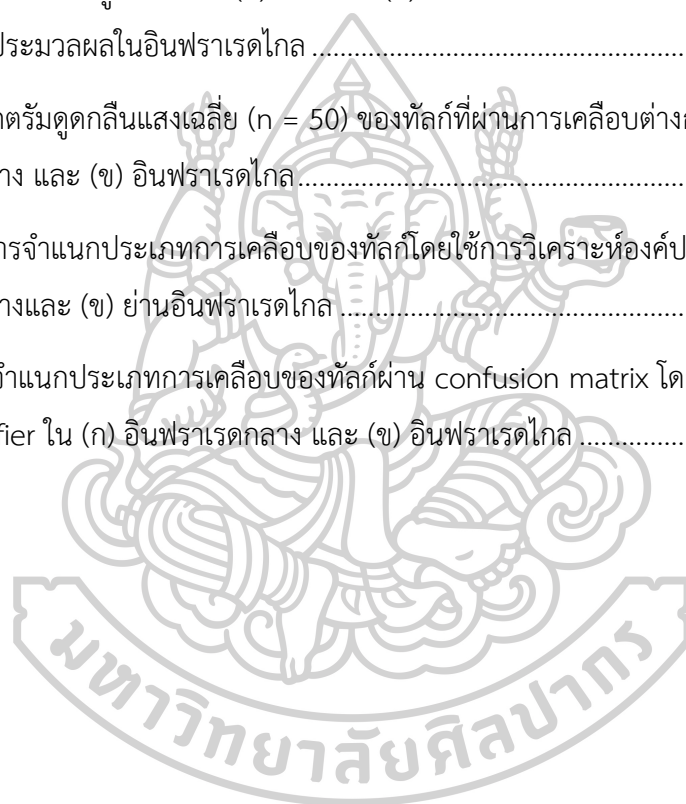
หน้า

รูปที่ 1 แร่ทัลก์ที่แปรรูปเป็นทกคัมแล้วนำไปใช้งานในผลิตภัณฑ์ต่าง ๆ [24]	5
รูปที่ 2 แป้งสำหรับบริโภคชนิดต่างๆ [28]	6
รูปที่ 3 ลักษณะภายนอกของแร่ใยหินและแร่ทัลก์ที่ขุดพบตามธรรมชาติ [35]	8
รูปที่ 4 สเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในช่วงความถี่ต่าง ๆ [48]	10
รูปที่ 5 คลื่นเทราเฮิรตซ์ในสเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า [58]	15
รูปที่ 6 คลื่นอินฟราเรดในสเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า [60]	16
รูปที่ 7 เครื่องฟูเรียร์ทรานฟอร์มสเปกโตรมิเตอร์ (FT-IR) รุ่น VERTEX 80v [62]	17
รูปที่ 8 การศึกษาอันตรกิริยารูปแบบต่างๆ ของสารตัวอย่างในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และ ย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR)	17
รูปที่ 9 หลักการทำงานของเครื่องฟูเรียร์ทรานฟอร์มอินฟราเรดสเปกโตรสโคปี	18
รูปที่ 10 ตัวอย่างสเปกตรัมของโพลีเอทิลีน (PE) กับทัลก์บิสสุทซ์ (Talc) วัดโดยเครื่อง FT-IR ในย่าน อินฟราเรดไกล (Far-IR)	19
รูปที่ 11 เครื่องเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี (THz-TDS) ซึ่งอยู่ในการดูแลของทีมนวิจัยเทรา เฮิรตซ์ ตั้งอยู่ที่ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (เนคเทค-สวทช.)	20
รูปที่ 12 หลักการทำงานของเครื่องเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี [65]	21
รูปที่ 13 ตัวอย่างการดูดซับลักษณะเฉพาะของพันธะเคมีในย่านอินฟราเรด (IR Region) [66]	22
รูปที่ 14 ตัวอย่างสเปกตรัมของกลุ่มตัวอย่างชาที่ผสมกับทัลก์ในปริมาณต่างๆ [15]	23
รูปที่ 15 ตัวอย่างการวิเคราะห์ผลโดยใช้เทคนิค PCA	25
รูปที่ 16 กระบวนการทำงานของการเรียนรู้ด้วยเครื่อง สำหรับใช้สร้างแบบจำลองในตรวจวัดการมีอยู่ ของทัลก์ ทำนายปริมาณความเข้มข้นของทัลก์และจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์	27
รูปที่ 17 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของทัลก์ในย่าน Mid-IR ของงานวิจัยที่อ้างอิง	29

รูปที่ 18 สเปกตรัม Neutron activation prompt γ ของตัวอย่างทัลก์บริสุทธิ์ของงานวิจัยที่อ้างอิง	30
รูปที่ 19 สเปกตรัมเฉลี่ยของ (a) ตัวอย่างชาบริสุทธิ์ (b) ชาที่มีแป้งฝุ่นบริสุทธิ์ 1.50 มก./กรัม (c) แป้งฝุ่นบริสุทธิ์ และ (d) การขยายตัวของยอดเขาหลักของแป้งฝุ่นบริสุทธิ์ในช่วง $990 - 1055 \text{ cm}^{-1}$ ของงานวิจัยที่อ้างอิง	33
รูปที่ 20 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตัวอย่างแป้งสาลีผสมกับแป้งฝุ่น 143 ตัวอย่าง ของงานวิจัยที่อ้างอิง	34
รูปที่ 21 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่ทำนายกับค่าที่แท้จริงของชุดทำนาย (a) ตัวอย่างแป้งสาลีทั้งหมด (b) ตัวอย่างแป้งสาลีประเภท A (c) ตัวอย่างแป้งสาลีประเภท B (d) ตัวอย่างแป้งสาลีประเภท C ของงานวิจัยที่อ้างอิง	35
รูปที่ 22 ตัวอย่างสเปกตรัมทัลก์บริสุทธิ์ที่จำลองขึ้นโดยใช้ชุดฐาน Gaussian-type orbitals (GTO) ของงานวิจัยที่อ้างอิง	36
รูปที่ 23 ภาพรวมทั้งหมดของงานวิจัย	40
รูปที่ 24 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับเครื่อง FT-IR และ THz-TDS	41
รูปที่ 25 การเปลี่ยนตัวตรวจวัด (Detector) สำหรับเครื่อง FT-IR	49
รูปที่ 26 การตรวจสอบความพร้อมของสัญญาณจากเครื่อง THz-TDS ก่อนเริ่มการทดลอง	50
รูปที่ 27 แผนการทำงานการวิเคราะห์สเปกตรัมจากเครื่อง FT-IR โดยใช้เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลที่พัฒนาขึ้นจากการเขียนโปรแกรมด้วยภาษาไพธอน (Python)	52
รูปที่ 28 แผนการทำงานการวิเคราะห์สเปกตรัมจากเครื่อง THz-TDS โดยใช้เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลที่พัฒนาขึ้นจากการเขียนโปรแกรมด้วยภาษาไพธอน (Python)	53
รูปที่ 29 กระบวนการเรียนรู้ของเครื่อง สำหรับใช้ตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์	56
รูปที่ 30 ตัวอย่างกราฟ scatter plot ที่ได้จากกระบวนการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก	59
รูปที่ 31 กระบวนการเรียนรู้ของเครื่อง สำหรับใช้จำแนกประเภทการเคลือบทัลก์	61
รูปที่ 32 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของทัลก์มาตรฐานก่อนทำการประมวลผลจากเครื่อง FT-IR ในย่าน (ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล	63

รูปที่ 33 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตั๊กมาตรฐานหลังทำการประมวลผลจากเครื่อง FT-IR ในย่าน (ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล	64
รูปที่ 34 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตั๊กมาตรฐานก่อนทำการประมวลผลจากเครื่อง THz-TDS ใน ย่านเทราเฮิรตซ์	65
รูปที่ 35 การเปรียบเทียบสัญญาณตัวอย่างตั๊กมาตรฐานและสัญญาณอ้างอิงในโดเมนเวลาและ ความถี่ของการวัดด้วย THz-TDS	66
รูปที่ 36 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของตั๊กมาตรฐานกับสารผสมในย่าน (ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล.....	67
รูปที่ 37 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กสูตรตั๊กในย่านการวัด (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล.....	69
รูปที่ 38 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กสูตรไม่มีตั๊กในย่าน (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล.....	70
รูปที่ 39 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภคในย่านการวัด (ก) อินฟราเรด กลางและ (ข) อินฟราเรดไกล	71
รูปที่ 40 ผลการจำแนกการมีอยู่ของตั๊กในแป้งสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภคผ่านการสร้าง confusion matrix โดยใช้แบบจำลอง Extra Trees Classifier ในย่านการวัดอินฟราเรดกลาง.....	72
รูปที่ 41 ผลการจำแนกการมีอยู่ของตั๊กในแป้งสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภคผ่านการสร้าง confusion matrix โดยใช้โมเดล Extra Trees Classifier ในย่านการวัดอินฟราเรดไกล	73
รูปที่ 42 ตัวอย่างสเปกตรัมการดูดกลืนแสงในย่านอินฟราเรดไกลของตัวอย่างตั๊กมาตรฐานที่ผสมใน ความเข้มข้นต่างๆ.....	74
รูปที่ 43 การเปรียบเทียบแบบจำลอง (ก) Linear Regression กับ (ข) โมเดล PLS Regression ใน การทำนายความเข้มข้นของตั๊กมาตรฐาน.....	76
รูปที่ 44 การเลือกช่วงคลื่นที่แตกต่างกันเพื่อปรับปรุงประสิทธิภาพในการสร้างโมเดลทำนายปริมาณ ตั๊กมาตรฐาน (ก) ช่วงเลขคลื่น 90-300 cm^{-1} (ข) ช่วงเลขคลื่น 160-240 cm^{-1} และ (ค) ช่วงเลข คลื่น 160-180 cm^{-1}	77
รูปที่ 45 ข้อมูลจากพีเจอร์ที่มีความสำคัญสูงสุด 30 จุดแรกในช่วงเลขคลื่นที่มีผลต่อแบบจำลอง PLS Regression สำหรับทำนายปริมาณตั๊กมาตรฐาน	79

รูปที่ 46 สเปกตรัมที่วัดได้จากตัวอย่างแบ่งฝุ่นสำหรับเด็กที่มีและไม่มีทัลก์กับสเปกตรัมของโพลียเอทีลีน (PE) บริสุทธิ์ในย่านอินฟราเรดไกล (FIR)	82
รูปที่ 47 การวิเคราะห์และทำนายความเข้มข้นของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แบ่งฝุ่นสำหรับเด็กเชิงพาณิชย์โดยใช้แบบจำลอง PLS Regression	83
รูปที่ 48 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบต่างกันสามแบบก่อนทำการประมวลผลจากเครื่อง FT-IR ในย่าน (ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล	85
รูปที่ 49 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง (ก) ก่อนและ (ข) หลังประมวลผลในอินฟราเรดกลาง (ค) ก่อนและ (ง) หลังประมวลผลในอินฟราเรดไกล	86
รูปที่ 50 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ย ($n = 50$) ของทัลก์ที่ผ่านการเคลือบต่างกัน ในย่าน (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล	88
รูปที่ 51 ผลการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์โดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลักใน (ก) ย่านอินฟราเรดกลางและ (ข) ย่านอินฟราเรดไกล	89
รูปที่ 52 การจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ผ่าน confusion matrix โดยใช้แบบจำลอง Extra Trees Classifier ใน (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล	92



บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของปัญหา

แม้ว่ารายงานการศึกษาที่ผ่านมาจะระบุว่า การใช้แป้งฝุ่นที่มีส่วนประกอบของทัลก์ (Talc) อาจมีแนวโน้มเพิ่มความเสี่ยงต่อการเกิดโรคมะเร็ง [1-4] ทำให้ผู้บริโภคเริ่มมีความกังวลเกี่ยวกับการใช้ผลิตภัณฑ์ที่มีทัลก์เป็นส่วนประกอบ แต่ในปัจจุบันแร่ทัลก์ยังคงถูกใช้อย่างแพร่หลาย เนื่องจากคุณสมบัติที่โดดเด่นหลายประการ โดยเฉพาะความสามารถในการปรับปรุงคุณสมบัติทางกายภาพของผลิตภัณฑ์ เช่น เพิ่มความยืดเกาะ ความทนทานและความนุ่มนวลของผลิตภัณฑ์ ทัลก์เป็นแร่ที่ประกอบด้วยแมกนีเซียมซิลิเกต โดยมีสูตรทางเคมีคือ $Mg_3Si_4O_{10}(OH)_2$ มีความนุ่มและสามารถบดให้เป็นผงละเอียดได้ง่าย จึงถูกใช้เป็นสารเติมแต่งในผลิตภัณฑ์ต่าง ๆ เช่น แป้งฝุ่น เครื่องสำอาง และผลิตภัณฑ์ดูแลส่วนบุคคล เป็นต้น ทัลก์ที่ใช้ในผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางและผลิตภัณฑ์ดูแลส่วนบุคคลมักผ่านกระบวนการเคลือบด้วยสารเคลือบ เช่น ซิลาน (Silane Coated) ซึ่งมีสูตรเคมีคือ SiH_4 หรือเมทิลโคน (Methicone Coated) ซึ่งมีสูตรเคมีคือ C_2H_5OSi ทั้งนี้ การเลือกใช้ชนิดของสารเคลือบขึ้นอยู่กับลักษณะและความต้องการของผลิตภัณฑ์ [5, 6] อย่างไรก็ตาม การเคลือบผิวด้วยสารเหล่านี้ อาจก่อให้เกิดความเสี่ยงต่อสุขภาพของผู้ใช้และผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม เช่น การแพ้ระคายเคือง รวมถึงการย่อยสลายและการรั่วไหลที่ยากลำบาก [7] นอกจากนี้ ทัลก์ยังมีความเสี่ยงต่อการปนเปื้อนโลหะหนักต่าง ๆ เช่น แร่ใยหิน ตะกั่วและโครเมียม ซึ่งมักพบในบริเวณแหล่งแร่ทัลก์ที่ถูกขุดพบ [8-10] ดังนั้น การตรวจวัดทัลก์และการจำแนกประเภทของการเคลือบผิวจึงเป็นสิ่งสำคัญ เพื่อให้มั่นใจว่าผลิตภัณฑ์มีความเหมาะสมกับการใช้งาน ลดความสูญเสียของทรัพยากรและความเสียหายจากผลิตภัณฑ์ มีความปลอดภัยต่อผู้บริโภค และลดความเสี่ยงด้านสุขภาพ

ปัจจุบันวิธีการตรวจวัดทัลก์ที่มีการใช้อยู่ ได้แก่ เทคนิค X-ray Diffraction (XRD) [11] Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) [12, 13] และ Scanning Electron Microscopy (SEM) [14] ถูกนำมาใช้เพื่อศึกษาลักษณะพื้นผิว โครงสร้างจุลภาค และองค์ประกอบทางเคมี อย่างไรก็ตาม เทคนิคเหล่านี้มีข้อจำกัดหลายประการ เช่น ความซับซ้อนในการเตรียมตัวอย่าง ระยะเวลา ต้นทุนที่สูง และความสามารถในการวิเคราะห์ตัวอย่างได้เพียงจำนวนจำกัดในแต่ละครั้ง ทำให้เทคนิคเหล่านี้ไม่เหมาะสมสำหรับการวิเคราะห์ที่ต้องการความรวดเร็วและความสามารถในการตรวจวัดตัวอย่างจำนวนมากพร้อมกัน ด้วยเหตุนี้ เทคนิคสเปกโทรสโกปีในย่าน Near-Infrared (NIR) จึงถูกนำมาใช้เพื่อลดข้อจำกัดดังกล่าว [15, 16] อย่างไรก็ตาม NIR ก็ยังมีข้อจำกัดในการ

วิเคราะห์เชิงปริมาณ เนื่องจากสเปกตรัมในช่วงนี้มักมีการซ้อนทับของสัญญาณจากการสั่นของพันธะโมเลกุล ซึ่งทำให้การแยกแยะองค์ประกอบเฉพาะในตัวอย่างทำได้ยาก ส่งผลให้ความแม่นยำในการวิเคราะห์ลดลง งานวิจัยนี้จึงได้นำเทคนิคสเปกโทรสโกปี (Spectroscopy) นอกเหนือจากย่าน NIR มาประยุกต์ใช้ในการตรวจวัดทล็ก ซึ่งเป็นเทคนิคที่รวดเร็ว มีกระบวนการที่ไม่ซับซ้อน และไม่ทำลายตัวอย่าง (non-destructive) ทำให้เทคนิคนี้ได้รับความนิยมในการวิเคราะห์ตัวอย่างทั้งเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ [17-20] ในงานวิจัยนี้ใช้เครื่อง Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) และ Terahertz Time Domain Spectroscopy (THz-TDS) ซึ่งข้อมูลที่ได้จากเครื่องดังกล่าวจะอยู่ในรูปแบบของสเปกตรัมที่บ่งบอกการเปลี่ยนแปลงพลังงานของโมเลกุลและให้ข้อมูลการดูดกลืนเฉพาะตัวของสารเคมีแต่ละชนิด (Fingerprint) อย่างไรก็ตาม เทคนิคนี้มีข้อจำกัดในการวัดตัวอย่างที่อยู่ในรูปของแข็งหรือก๊าซ เนื่องจากการใช้ FT-IR ในการวัดของเหลวอาจมีข้อจำกัดในการเตรียมตัวอย่าง และการละลายของสารที่มีความเข้มข้นต่ำหรือไม่ละลายดีพอสำหรับการวัด

ในการศึกษานี้ได้ใช้เทคนิค Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ในการวัดสเปกตรัมของทล็กบริสุทธิ์ ทล็กที่ผ่านกระบวนการเคลือบต่างๆ ผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็ก และผลิตภัณฑ์แป้งสำหรับบริโภคที่อยู่ในรูปแบบผง โดยวัดในย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region; Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; Far-IR) นอกจากนี้ยังใช้เทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy; THz-TDS) ซึ่งมีคุณสมบัติเฉพาะในการดูดกลืนแสงที่ช่วยในการจำแนกประเภทการเคลือบของทล็ก ในวิทยานิพนธ์นี้ยังได้นำการวิเคราะห์ข้อมูลด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) มาประยุกต์ใช้เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพและความแม่นยำของกระบวนการวิเคราะห์ ส่งผลให้สามารถสร้างแบบจำลองที่ตรวจวัดการมีอยู่ จำแนกผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีทล็กและไม่มีทล็กได้ ทำนายปริมาณความเข้มข้นของทล็กที่อยู่ในผลิตภัณฑ์ รวมทั้งจำแนกประเภทการเคลือบของทล็กได้ ผลการทดลองแสดงให้เห็นว่าแนวทางนี้ช่วยให้สามารถตรวจวัดทล็กในเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณได้อย่างรวดเร็ว ลดต้นทุน ลดความซับซ้อนในการวิเคราะห์ และลดการพึ่งพาบุคลากรเฉพาะทาง

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

1.2.1 พัฒนาวิธีการตรวจวัดทัลกในแป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งที่ใช้บริโภคในเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณด้วยเทคนิคเชิงแสงแบบไม่ทำลาย

1.2.3 พัฒนาวิธีการเพิ่มประสิทธิภาพและความแม่นยำในการตรวจวัดแป้งที่ใช้ในการอุปโภคและบริโภคด้วยเทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง

1.2.3 พัฒนาวิธีการจำแนกและตรวจวัดประเภทการเคลือบผิวของทัลกที่อยู่ในแป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งบริโภค ที่อาจเป็นอันตรายต่อร่างกาย

1.3 สมมติฐานของงานวิจัย

1.3.1 การใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีในย่านความถี่ต่างๆ สามารถนำมาประยุกต์ใช้ในการตรวจสอบสารปลอมปนในแป้งที่ใช้บริโภคและบริโภคที่อาจเป็นอันตรายต่อร่างกายได้

1.3.2 การตรวจวัดการมีอยู่ของทัลกในแป้งสำหรับบริโภคและบริโภคที่สามารถนำมาประยุกต์ใช้กับเทคนิคการเรียนรู้ของเครื่องในการตรวจสอบในเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณได้

1.4 ขอบเขตของงานวิจัย

1.4.1 ตัวอย่างทัลกบริสุทธิ์ไม่ผ่านการเคลือบ (Original) และที่ผ่านการเคลือบด้วยสารเคลือบด้วยซิลาน (Silane) เมทิโคน (Methicone) ซึ่งถูกนำมาใช้เพื่อปรับปรุงคุณสมบัติของทัลกให้เหมาะสมกับการใช้งานในผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางและยา ตัวอย่างเหล่านี้จะถูกตรวจวัดด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีในย่านความถี่ที่แตกต่างกัน

1.4.2 ประเภทของแป้งที่ใช้ในการตรวจวัดทัลก ประกอบด้วย แป้งฝุ่นสำหรับเด็กที่เป็นสูตรทัลก, แป้งเด็กสูตรไม่มีทัลก, แป้งสำหรับบริโภค โดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีในย่านความถี่ที่แตกต่างกัน

1.4.3 ใช้เครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มสเปกโทรสโกปี (FT-IR) ในย่านอินฟราเรดกลาง (Middle-Infrared; MIR) กับย่านอินฟราเรดไกล (Far-Infrared; FIR) และเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (THz-TDS) เพื่อเก็บข้อมูลสเปกตรัม

1.4.4 วิเคราะห์ผลของสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) เลขคลื่น (wavenumber) ตั้งแต่ $400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ และย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) เลขคลื่นตั้งแต่ $30\text{--}300\text{ cm}^{-1}$

1.4.5 วิเคราะห์ผลของสเปกตรัมจากเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (THz-TDS) ในย่านความถี่ 1-3 THz

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1.5.1 ได้ทราบถึงวิธีการการตรวจวัดการมีอยู่ทัลก์และจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งบริโคมที่อาจเป็นสารปลอมปนที่อาจเป็นอันตราย ด้วยวิธีการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลาย

1.5.2 ได้ทราบถึงความสามารถของเทคนิคของสเปกโทรสโกปีเพื่อใช้ตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ในย่านการวัดต่าง ๆ

1.5.3 การนำเทคนิคการวิเคราะห์ผลด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) เพิ่มประสิทธิภาพในการตรวจวัดทัลก์ในด้านอุปโภคและบริโภค

1.5.4 สามารถนำเทคนิคที่ได้พัฒนาไปประยุกต์ใช้ในการตรวจสอบสารปลอมปนในด้านอื่นๆ ได้ เช่น ด้านการเกษตร ด้านอุตสาหกรรม เป็นต้น



บทที่ 2

ทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 ความรู้เกี่ยวกับทัลก์ที่ใช้เป็นส่วนผสมหลักในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่น

2.1.1 ทัลก์ (Talc) สู่ทัลค์ที่นำไปใช้งานในด้านต่างๆ

ทัลก์ (Talc) เป็นแร่ธาตุที่ประกอบด้วยแมกนีเซียม (Magnesium; Mg) ซิลิคอน (Silicon; Si) และออกซิเจน (Oxygen; O) เป็นส่วนใหญ่ โดยมีสูตรเคมีคือ $Mg_3Si_4O_{10}(OH)_2$ เมื่อนำมาเข้าสู่กระบวนการผลิตจนสามารถนำไปใช้งานได้จะเรียกว่า ทัลค์ (Talcum) แสดงในรูปที่ 1 มีลักษณะเป็นผงที่สามารถดูดซับความชื้นได้ดีและช่วยลดการเสียดสี จึงมีประโยชน์ในการทำให้ผิวแห้งและป้องกันผื่น [21] ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในผลิตภัณฑ์ต่างๆ เช่น แป้งฝุ่นเด็ก แป้งสำหรับทาผิวกาย และผิวน้ำสำหรับผู้ใหญ่ เครื่องสำอาง ผลิตภัณฑ์ดูแลส่วนบุคคล เซรามิกซ์ กระดาษ เป็นต้น [22] ในบางกรณีใส่ลงในผลิตภัณฑ์แป้งสำหรับบริโภคหลายชนิดเพื่อปรับปรุงสี เพิ่มปริมาณและทำให้แป้งที่ใช้ในการปรุงอาหารหรือทำขนมมีความเนียนนุ่มและไม่เกาะกันเป็นก้อน [23]



รูปที่ 1 แร่ทัลก์ที่แปรรูปเป็นทัลค์แล้วนำไปใช้งานในผลิตภัณฑ์ต่าง ๆ [24]

2.1.2 ทัลค์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก

ในหลายทศวรรษที่ผ่านมา ผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กมักมีทัลค์เป็นส่วนประกอบหลัก เนื่องจากคุณสมบัติที่ช่วยในการดูดซับความชื้นและลดการเสียดสีระหว่างผิวน้ำกับเสื้อผ้าหรือผ้าอ้อม ทำให้ผิวเด็กคงความแห้งสบายและป้องกันการเกิดผื่นหรือการระคายเคือง อย่างไรก็ตาม เนื่องจากความกังวลเกี่ยวกับความปลอดภัยของทัลค์ มีการเพิ่มความสนใจในการหาสารประกอบที่ปลอดภัยและสามารถทดแทนการใช้ทัลค์ได้เพื่อตอบสนองความต้องการของผู้บริโภคทุกวัย ผู้ผลิตหลายรายได้พัฒนาผลิตภัณฑ์ที่มีเป็นสูตรไม่มีทัลค์ (Talc-Free) และสูตรที่มีทัลค์ (Talc-Based) เพื่อให้มั่นใจว่าผลิตภัณฑ์มีคุณภาพสูงและปลอดภัย

ปัจจุบันความสนใจในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กที่ไม่มีทัลก์มีแนวโน้มเพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่อง โดยผู้ผลิตมักเลือกใช้วัตถุดิบจากพืช เช่น แป้งข้าวโพด (Corn starch) แป้งมันสำปะหลัง (Tapioca starch) หรือแป้งข้าวเจ้า (Rice flour) มาเป็นส่วนผสมหลักแทนทัลก์ แม้ว่าสูตรแป้งฝุ่นจะแตกต่างกันระหว่างสูตรที่มีทัลก์และสูตรที่ไม่มีทัลก์ แต่กระบวนการผลิตยังคงมีขั้นตอนที่คล้ายคลึงกัน โดยอาจมีการปรับปรุงเล็กน้อยตามลักษณะของสารประกอบที่ใช้ในแต่ละสูตร โดยกระบวนการผลิตของทั้งสองสูตรเริ่มจากการบดและคัดกรองวัตถุดิบ เพื่อให้ได้แป้งที่ละเอียดและมีความเนียนนุ่ม จากนั้นจึงผสมสารเติมแต่งต่างๆ เช่น วิตามิน น้ำหอม หรือสารสกัดจากพืช เพื่อเพิ่มคุณค่าทางอาหารและลดความเหนียวของแป้ง ในขั้นตอนสุดท้ายผลิตภัณฑ์จะถูกนำเข้าสู่กระบวนการฆ่าเชื้อ เพื่อรักษาคุณภาพและความปลอดภัยก่อนที่จะบรรจุในภาชนะที่สะอาดและปลอดภัย ทั้งนี้เพื่อให้ผู้บริโภคมั่นใจในคุณภาพของแป้งฝุ่นที่ได้รับ

2.1.3 ทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค

ทัลก์เป็นส่วนผสมที่มักพบในผลิตภัณฑ์แป้งสำหรับการบริโภคทั่วไป มีบทบาทสำคัญในการปรับปรุงเนื้อสัมผัสของผลิตภัณฑ์ ช่วยให้แป้งมีความเนียนนุ่มและไม่เกาะกันเป็นก้อน [23] ซึ่งเป็นประโยชน์อย่างมากในการรักษาคุณภาพของผลิตภัณฑ์ระหว่างการเก็บรักษา นอกจากนี้ยังช่วยเพิ่มปริมาณแป้งที่ใช้ในผลิตภัณฑ์ ทำให้สามารถลดต้นทุนการผลิตได้

แป้งที่มาจากพืชเป็นผลิตภัณฑ์ที่ได้จากการบดเมล็ดพืชต่างๆ เช่น ข้าวโพด มันสำปะหลัง และข้าวเจ้า แสดงในรูปที่ 2 โดยโครงสร้างเคมีของแป้งพืชประกอบด้วยโมเลกุลของกลูโคส ($C_6H_{12}O_6$) ที่เป็นส่วนประกอบของโพลีเมอร์สองชนิดหลัก ได้แก่ อะไมโลส (Amylose) และอะไมโลเพกทิน (Amylopectin) ซึ่งสัดส่วนของทั้งสองชนิดจะแตกต่างกันไปตามแหล่งที่มาของพืชนั้นๆ นอกจากนี้ แป้งพืชยังมีองค์ประกอบอื่นๆ ที่มีผลต่อคุณสมบัติของแป้ง เช่น ไขมัน (Fat) โปรตีน (Proteins) และแร่ธาตุต่างๆ เช่น โซเดียม (Sodium; Na) แมกนีเซียม (Magnesium; Mg) แคลเซียม (Calcium; Ca) ฟอสฟอรัส (Phosphorus; P) และโพแทสเซียม (Potassium; K) [25-27]



รูปที่ 2 แป้งสำหรับบริโภคชนิดต่างๆ [28]

2.2 การปนเปื้อนของทัลก์และผลกระทบทางด้านสุขภาพ

ทัลก์เป็นแร่ธาตุที่เกิดขึ้นตามธรรมชาติ ซึ่งขุดได้จากดิน ประกอบด้วยแมกนีเซียม (Magnesium; Mg) ซิลิคอน (Silicon; Si) ออกซิเจน (Oxygen; O) และไฮโดรเจน (Hydrogen; H) ในทางเคมี แบ่งเป็นแมกนีเซียมซิลิเกตที่เกิดขึ้นตามธรรมชาติในหินแปร การสกัดทัลก์มักเกี่ยวข้องกับการขุด โดยทั่วไปจะพบร่วมกับแร่ธาตุอื่นๆ เช่น คลอไรด์ (Chloride; Cl⁻) แมกนีไซต์ (Magnesite; MgCO₃) และโดโลไมต์ (Dolomite; CaMg(CO₃)₂) ทัลก์อาจมีสีที่แตกต่างกันขึ้นอยู่กับแร่ธาตุที่เกี่ยวข้อง ตั้งแต่สีขาวไปจนถึงสีเทา สีเขียว และแม้กระทั่งสีน้ำตาลมีเนื้อสัมผัสคล้ายสบู [29, 30]

2.2.1 การปนเปื้อนของแร่ใยหิน (Asbestos) ในทัลก์

การสัมผัสแร่ใยหิน (Asbestos) ซึ่งมีสูตรเคมีที่แตกต่างกันตามประเภท เช่น คริสโตไทล์ (Chrysotile) ที่มีสูตรทางเคมี คือ $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ และอโมซิไทท์ (Amosite) ที่มีสูตรทางเคมี คือ $((Fe^{2+})_7Si_8O_{22}(OH)_2 \cdot (Mg, Fe)_3Si_4O_{10}(OH)_2)$ ได้รับการยอมรับว่าสามารถนำไปสู่ปัญหาสุขภาพรวมถึงความเสี่ยงที่เพิ่มขึ้นในการเกิดโรคมะเร็งบางชนิดแร่ใยหินเป็นแร่ธรรมชาติที่มีคุณสมบัติเฉพาะตัว เช่น ทนต่อความร้อน ไฟ และสารเคมี จึงถูกนำมาใช้กันอย่างแพร่หลายในอุตสาหกรรมต่างๆ โดยเฉพาะในอุตสาหกรรมก่อสร้าง ยานยนต์ และการผลิต สำหรับเป็นฉนวนและป้องกันไฟ โดยเส้นใยของแร่ใยหินสามารถสะสมในปอด ทำให้เกิดการอักเสบและการเกิดแผลเป็นที่เยื่อหุ้มปอด ซึ่งอาจนำไปสู่ปัญหาสุขภาพที่ร้ายแรงได้ [9, 31, 32] แม้ในช่วงไม่กี่ปีที่ผ่านมาจะมีมาตรการด้านกฎระเบียบและความปลอดภัยได้ถูกนำมาใช้เพื่อลดการสัมผัสแร่ใยหินและปกป้องสุขภาพของแรงงาน แต่ยังคงเป็นสิ่งสำคัญที่จะต้องตระหนักถึงความเสี่ยงที่เกี่ยวข้องกับแร่ใยหิน และใช้มาตรการป้องกันที่เหมาะสมเพื่อลดความเสี่ยงในการสัมผัสให้น้อยที่สุด

แร่ทัลก์และแร่ใยหินมักเกิดขึ้นใกล้กันตามธรรมชาติบนโลก ด้วยกระบวนการทางธรณีวิทยา และลักษณะภายนอกที่คล้ายคลึงกัน แสดงในรูปที่ 3 ทำให้เมื่อขุดขึ้นมาอาจมีความเสี่ยงต่อการปนเปื้อน โดยแร่ทัลก์อาจมีเส้นใยแร่ใยหินและปนเปื้อนแร่ใยหินประเภทแอมไฟโบล (Amphiboles) [9] ซึ่งเป็นประเภทที่ประกอบด้วยแร่ใยหิน 5 ชนิด การศึกษาหลายฉบับแสดงให้เห็นว่าการสัมผัสแร่ใยหินประเภทนี้สามารถนำไปสู่โรคที่เกี่ยวข้องกับแร่ใยหินได้ ในช่วงไม่กี่ปีที่ผ่านมา มีงานวิจัยเริ่มศึกษาถึงความเชื่อมโยงระหว่างทัลก์และการเกิดมะเร็ง โดยพบว่าผู้หญิงที่ใช้แป้งฝุ่นบริเวณจุดซ่อนเร้นมีแนวโน้มที่จะเป็นมะเร็งรังไข่มากขึ้น [32-34] จากการวิจัยต่อเนื่อง ผลลัพธ์ที่แบ่งฝุ่และเครื่องสำอางหลายชนิดยังคงพบว่าการปนเปื้อนเส้นใยแร่ใยหินอยู่ ซึ่งเป็นสิ่งที่เพิ่มความกังวลเกี่ยวกับความปลอดภัยของผลิตภัณฑ์เหล่านี้ในท้องตลาด [9]



รูปที่ 3 ลักษณะภายนอกของแร่ใยหินและแร่ทัลก์ที่ขุดพบตามธรรมชาติ [35]

2.2.2 ผลกระทบของทัลก์และแร่ใยหินต่อสุขภาพ

ในปี 1976 สมาคมเครื่องสำอาง แป้ง และน้ำหอม (Cosmetic, Toiletry, and Fragrance Association หรือ CTFA) ซึ่งเป็นสมาคมการค้าที่เป็นตัวแทนของอุตสาหกรรมเครื่องสำอางและผลิตภัณฑ์ดูแลส่วนบุคคล ได้ออกแนวปฏิบัติให้แบ่งที่ใช้ในผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางในสหรัฐฯ ปราศจากแร่ใยหินตามมาตรฐานที่กำหนด ข้อกังวลหลักเกี่ยวกับความเสี่ยงของการใช้แป้งฝุ่นกับโรคมะเร็งมุ่งเน้นไปที่สองประเด็นสำคัญ ประเด็นแรกคือความเสี่ยงต่อโรคมะเร็งปอดในคนงานเหมืองทัลก์และผู้ผลิตทัลก์ ซึ่งบางการศึกษาพบว่ามีความเสี่ยงเพิ่มขึ้น ประเด็นที่สองคือความเสี่ยงต่อมะเร็งรังไข่จากการใช้แป้งฝุ่นบริเวณอวัยวะเพศ การศึกษาหลายชิ้นพบว่าผู้หญิงที่ใช้แป้งฝุ่นในบริเวณนี้มีความเสี่ยงเพิ่มขึ้นในการเป็นมะเร็งรังไข่ ซึ่งก่อให้เกิดข้อกังวลเกี่ยวกับความปลอดภัยของการใช้ผลิตภัณฑ์ในระยะยาว โดยเฉพาะในเรื่องความเสี่ยงของโรคมะเร็งบางชนิด ได้แก่

โรคมะเร็งรังไข่ หากอนุภาคแป้งจากการใช้ในบริเวณอวัยวะเพศ บนผ้าอนามัย หรือถุงยางอนามัยสามารถเคลื่อนผ่านช่องคลอด มดลูก และท่อนำไข่ไปถึงรังไข่ได้ การศึกษานี้รวมข้อมูลจากผู้หญิงกว่า 50,000 คน ซึ่งเผยให้เห็นอัตราส่วนความเสี่ยง (HR) อยู่ในช่วง 1.17 ถึง 3.34 สำหรับผู้ใช้แป้งที่มีส่วนผสมของทัลก์ที่อวัยวะเพศตลอดช่วงวัยผู้ใหญ่ตอนต้น [36] ผลการศึกษาชี้ให้เห็นถึงความเชื่อมโยงที่ชัดเจนแม้จะมีอคติที่อาจเกิดขึ้นในการประเมินการสัมผัส [2, 3]

โรคมะเร็งปอด การสัมผัสทัลก์สัมพันธ์กับความเสี่ยงต่อมะเร็งปอดที่เพิ่มขึ้น การวิเคราะห์นี้รวมถึงการศึกษาแบบสังเกต 14 ครั้ง และรายงานอัตราการเสียชีวิตตามมาตรฐาน (SMR) ที่ 1.45 สำหรับมะเร็งปอดในกลุ่มคนที่สัมผัสกับทัลก์ ซึ่งบ่งชี้ถึงความสัมพันธ์ที่สำคัญ การศึกษานี้เน้นย้ำถึงความจำเป็นในการทำวิจัยเพิ่มเติมเพื่อชี้แจงความปลอดภัยของคนงานที่สัมผัสกับทัลก์ [37]

โรคมะเร็งปากมดลูก การวิจัยยังได้พิจารณาถึงความเสี่ยงของโรคมะเร็งระบบสืบพันธุ์ นอกเหนือจากมะเร็งรังไข่ว่ามีการเพิ่มขึ้นในกลุ่มผู้ใช้แป้งฝุ่นหรือไม่ แต่ผลการวิจัยมีการแตกต่างกันในการศึกษาหนึ่งที่ได้ศึกษาผู้หญิงมากกว่า 49,000 รายพบว่าผู้ใช้แป้งฝุ่นในบริเวณใต้ร่มผ้า ไม่มี

ความเสี่ยงสูงต่อการเป็นมะเร็งเยื่อบุโพรงมดลูก (มะเร็งเยื่อบุมดลูก) เว้นแต่จะอยู่ในวัยหมดประจำเดือนและผู้หญิงที่ใช้แท่งทาลก์และผ่านวัยหมดประจำเดือนไปแล้วมีความเสี่ยงเพิ่มขึ้น 21% ถึง 24% ที่จะเป็นมะเร็งเยื่อบุโพรงมดลูก [38, 39]

โรคมะเร็งชนิดอื่น งานวิจัยยังได้พิจารณาถึงความเชื่อมโยงที่เป็นไปได้ระหว่างการสูดดมแป้งในที่ทำงานกับมะเร็งชนิดอื่นๆ เช่น มะเร็งกระเพาะอาหารและมะเร็งเยื่อหุ้มปอด อย่างไรก็ตาม ยังไม่มีหลักฐานที่ชัดเจนเกี่ยวกับความเชื่อมโยงดังกล่าวในขณะนี้ และยังจำเป็นต้องมีการศึกษาเพิ่มเติมในอนาคตเพื่อให้ได้ข้อสรุปที่ชัดเจนยิ่งขึ้น [40, 41]

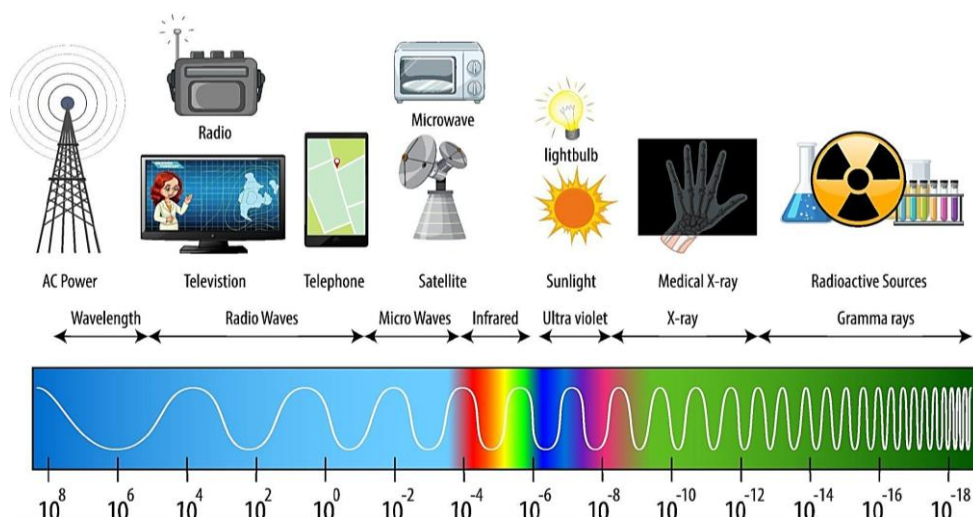
นอกจากนี้การใช้แป้งฝุ่นกับทารกและเด็กเล็กอาจเป็นอันตรายได้ หากทารกสูดดมแป้งฝุ่นที่มีส่วนผสมของทัลก์เข้าไป อาจทำให้เกิดอาการทางระบบทางเดินหายใจ เช่น เจ็บหน้าอก ไอ หายใจลำบาก หายใจมีเสียงหวีด และหายใจเร็ว แม้ว่าความเชื่อมโยงระหว่างทัลก์กับมะเร็งรังไข่ยังคงเป็นประเด็นถกเถียง แต่มีผู้หญิงหลายพันคนที่เป็มะเร็งรังไข่ได้ยื่นฟ้องบริษัท Johnson & Johnson และบริษัทอื่น ๆ คดีความบางคดีนำไปสู่คำพิพากษาที่เป็นประวัติศาสตร์ ซึ่งกระทบต่อยอดขายของบริษัท จนในเดือนสิงหาคม 2565 Johnson & Johnson ประกาศว่าจะยุติการผลิตแป้งเด็กที่มีส่วนผสมของแป้งทัลก์ทั่วโลกในปี 2566 โดยยืนยันว่าการตัดสินใจนี้เป็นไปเพื่อเหตุผลทางการเงินเท่านั้น และผลิตภัณฑ์ของบริษัทไม่ได้ปนเปื้อนแร่ใยหินหรือก่อให้เกิดมะเร็ง แม้ว่าโครงการพิชิตยาแห่งชาติของสหรัฐฯ ยังไม่ได้ข้อสรุปเกี่ยวกับทัลก์ว่าเป็นสารก่อมะเร็ง [42]

ปัจจุบันประเทศต่าง ๆ เช่น สาธารณรัฐประชาชนจีนและสหภาพยุโรป [43, 44] สหรัฐอเมริกา [45] ดำเนินการควบคุมการใช้ทัลก์อย่างเข้มงวดและกำหนดค่ามาตรฐานสูงสุด (MRL) ในผลิตภัณฑ์อาหารเพื่อปกป้องสุขภาพของผู้บริโภค หลายหน่วยงานระดับชาติและนานาชาติได้ศึกษาทัลก์เพื่อประเมินความเสี่ยงต่อการเกิดมะเร็ง สำนักงานวิจัยโรคมะเร็งระหว่างประเทศ (IARC) ขององค์การอนามัยโลก (WHO) จัดประเภทแป้งที่มีแร่ใยหินเป็น "สารก่อมะเร็งในมนุษย์" โดยอิงจากข้อมูลการศึกษาในสัตว์และมนุษย์ สำหรับทัลก์ที่สูดดมซึ่งไม่มีแร่ใยหินปนเปื้อน IARC จัดประเภทว่า "ไม่สามารถจัดประเภทได้ว่าเป็นสารก่อมะเร็งในมนุษย์และทัลก์ที่ใช้ในบริเวณจุดซ่อนเร้นถูกจัดว่าอาจเป็นสารก่อมะเร็งในมนุษย์" [46, 47]

2.3 เทคนิคการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายเพื่อใช้ตรวจจับสารปลอมปน

2.3.1 เทคนิคสเปกโทรสโกปี (Spectroscopy)

สเปกโทรสโกปี (Spectroscopy) เป็นเทคนิคที่มีความเกี่ยวข้องกับการเก็บข้อมูลของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในย่านความถี่ต่างๆ โดยข้อมูลที่ได้จะอยู่ในรูปแบบของสเปกตรัม (Spectrum) ที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มของคลื่นกับค่าความถี่ ในงานวิจัยนี้ เราใช้หลักการการดูดกลืน (Absorption) ของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในการวิเคราะห์สารตัวอย่าง โดยเมื่อคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าตกกระทบกับสารตัวอย่าง (Sample) จะเกิดการกระทำระหว่างคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้ากับโมเลกุลหรือโครงสร้างของสารที่ต้องวัด โดยที่คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในช่วงที่มีความถี่ตรงกันกับความถี่ของการสั่นของพันธะโมเลกุลจะถูกดูดกลืนไป ซึ่งส่งผลต่อความเข้มของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ทะลุผ่านสารตัวอย่าง (Transmission) โดยทำให้ความเข้มของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าลดลงในช่วงความถี่ ทำให้เกิดลักษณะของสเปกตรัมที่แตกต่างกันไป ดังนั้นในงานวิจัยนี้ การใช้หลักในแบ่งฝุ่นสำหรับเด็กและแบ่งฝุ่นสำหรับบริโภคในการทดลองจะส่งผลให้เกิดสเปกตรัมที่แตกต่างกันออกไป เนื่องจากคุณสมบัติทางเคมีที่แตกต่างกันของแป้งหรือสารแต่ละชนิด แม้ว่าเทคนิคสเปกโทรสโกปีจะสามารถใช้วิเคราะห์ในย่านความถี่ต่างๆ ตั้งแต่คลื่นวิทยุ (Radio Waves) คลื่นไมโครเวฟ (Microwaves) คลื่นอินฟราเรด (Infrared) คลื่นแสงที่ตามองเห็น (Visible) ไปจนถึงคลื่นอัลตราไวโอเล็ต (Ultraviolet) และอื่นๆ แต่ละย่านความถี่จะให้ลักษณะสเปกตรัมที่แตกต่างกัน แสดงในรูปที่ 4



รูปที่ 4 สเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าในช่วงความถี่ต่าง ๆ [48]

2.3.2 การประยุกต์ใช้สเปกโทรสโกปีในช่วงคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าต่างๆ

สเปกโทรสโกปีเป็นเทคนิคสามารถประยุกต์ใช้ได้ในช่วงคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าหลายย่าน แต่ละย่านมีลักษณะเฉพาะและการใช้งานที่แตกต่างกัน เพื่อให้การตรวจสอบสารมีประสิทธิภาพการเลือกใช้ย่านความถี่และเครื่องมือวัดที่เหมาะสมกับสารตัวอย่างจึงมีความสำคัญอย่างยิ่ง ตารางที่ 1 แสดงรายละเอียดของการใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีในย่านความถี่ที่นิยมสำหรับการใช้งานในด้านต่างๆ

ตารางที่ 1 การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคต่างๆในช่วงคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า

ย่าน	การใช้งาน	ตัวอย่าง	เครื่องมือ	ข้อดี	ข้อเสีย
คลื่นวิทยุ	NMR Spectroscopy [49]	ศึกษาโครงสร้าง 3 มิติของโมเลกุล	NMR Spectrometer	ระบุชนิดของนิวเคลียสสภาพแวดล้อมทางเคมี	เครื่องมือราคาแพงใช้เวลาวิเคราะห์
คลื่นไมโครเวฟ	Rotational Spectroscopy [50]	ศึกษาขนาดและรูปร่างของโมเลกุล	Microwave Spectrometer	วิเคราะห์ขนาดและรูปร่างของโมเลกุลตรวจสอบสารเคมีที่เป็นก๊าซ	ใช้งานกับของเหลวหรือของแข็งไม่ได้เครื่องมือมีความซับซ้อน
คลื่นเทราเฮิรตซ์	Terahertz Spectroscopy [51]	วัดและวิเคราะห์คุณสมบัติต่างๆของสาร	THz-TDS	ศึกษาโครงสร้างและพลวัตของโมเลกุล	ไม่สามารถเคลื่อนผ่านโลหะและน้ำได้

ตารางที่ 1(ต่อ) การวิเคราะห์ด้วยเทคนิคต่างๆในช่วงคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า

ย่าน	การใช้งาน	ตัวอย่าง	เครื่องมือ	ข้อดี	ข้อเสีย
คลื่นอินฟราเรด	Infrared Spectroscopy [52]	วัดและวิเคราะห์สารประกอบทางเคมีของสารนั้นๆ	FT-IR Spectrometer	ระบุชนิดของพันธะเคมี วิเคราะห์สารประกอบทางเคมี	การซ้อนทับของสเปกตรัม
คลื่นที่ตามองเห็น	Visible Spectroscopy [53]	วัดความเข้มข้นของสารละลาย	UV-Vis Spectrometer	วัดความเข้มข้นของสารละลาย วิเคราะห์สารที่มีสี	การเตรียมตัวอย่างซับซ้อน
คลื่นอัลตราไวโอเล็ต	Ultraviolet Spectroscopy [54]	วิเคราะห์สารประกอบอินทรีย์	UV-Vis Spectrometer	วิเคราะห์สารประกอบทางการแพทย์ ตรวจสอบสารปนเปื้อนในอาหาร	ใช้งานกับสารที่ไม่ดูดกลืนแสงไม่ได้
เอกซเรย์	X-ray Spectroscopy [55]	วิเคราะห์โครงสร้างและสมบัติทางกายภาพของสาร	X-ray Spectrometer	วิเคราะห์โครงสร้างอะตอมในโมเลกุล แสดงภาพโครงสร้างที่ซับซ้อนได้	เครื่องมือราคาแพง ใช้งานกับสารที่เป็นของแข็ง

จากตารางที่ 1 แสดงให้เห็นว่าคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าต่างช่วงมีการใช้งานและข้อดีเฉพาะตัว ใน การศึกษานี้ เราเลือกใช้คลื่นอินฟราเรด (Infrared wave) และคลื่นเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz wave) โดยใช้เครื่อง Fourier Transform Infrared (FT-IR) Spectroscopy และเครื่อง Terahertz Time-Domain Spectroscopy (THz-TDS) สำหรับการตรวจสอบสารปลอมปนในแป้งอุปโภคและบริโภค เนื่องจากคลื่นทั้งสองมีคุณสมบัติที่มีประโยชน์หลายประการ คลื่นอินฟราเรดและคลื่นเทราเฮิร์ตซ์ สามารถเจาะลึกเข้าไปในโครงสร้างโมเลกุลของสารตัวอย่าง ทำให้สามารถจำแนกและระบุ

สารประกอบทางเคมีได้ เนื่องจากคลื่นทั้งสองย่านนี้มีพลังงานต่ำไม่เป็นอันตรายต่อร่างกายมนุษย์เมื่อเปรียบเทียบกับรังสีเอกซ์ (X-rays) นอกจากนี้ การใช้คลื่นทั้งสองย่านนี้ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปีสามารถดำเนินการได้อย่างรวดเร็วและสะดวก ดังนั้น การใช้คลื่นอินฟราเรดและเทราเฮิรตซ์ในการตรวจสอบสารปลอมปนในแป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งฝุ่นสำหรับบริโภคจึงเป็นย่านที่น่าสนใจในการนำมาประยุกต์ใช้ โดยเฉพาะในกรณีที่ต้องการความรวดเร็วและประสิทธิภาพในการวิเคราะห์

2.4 การประยุกต์ใช้การตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายโดยอาศัยคลื่นอินฟราเรดและเทราเฮิรตซ์สำหรับการวิเคราะห์สารปลอมปนในแป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งฝุ่นสำหรับบริโภค

ในการศึกษานี้ เราเลือกใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีด้วยคลื่นอินฟราเรดและคลื่นเทราเฮิรตซ์ ซึ่งสามารถใช้ในการวิเคราะห์สารเคมีในตัวอย่างต่างๆ เทคนิคเหล่านี้สามารถตรวจสอบการดูดกลืนแสงในช่วงอินฟราเรดที่เกิดจากการสั่นของพันธะเคมีในโมเลกุล ทำให้สามารถระบุชนิดของพันธะและกลุ่มฟังก์ชันในโมเลกุลได้ นอกจากนี้ คลื่นเหล่านี้ยังสามารถตรวจจับลายนิ้วมือของสเปกตรัม (fingerprint region) ที่เป็นเอกลักษณ์ของสารประกอบแต่ละชนิด ทำให้สามารถระบุและแยกแยะสารปลอมปน เช่น ทาลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก การเลือกใช้เทคนิคอินฟราเรดและเทคนิคเทราเฮิรตซ์ในการตรวจจับทาลก์ในแป้งขึ้นอยู่กับคุณสมบัติและลักษณะเฉพาะของทาลก์ที่ต้องการตรวจสอบ ทั้งสองเทคนิคมีข้อดีและข้อจำกัดที่ต้องพิจารณาในการวิเคราะห์ เช่น การเลือกความยาวคลื่นที่เหมาะสม และความไวในการตรวจจับสารปลอมปน แสดงในตารางที่ 2



ตารางที่ 2 ข้อดีและข้อจำกัดของเทคนิคอินฟราเรด (IR) และเทคนิคเทราเฮิร์ตซ์ (THz)

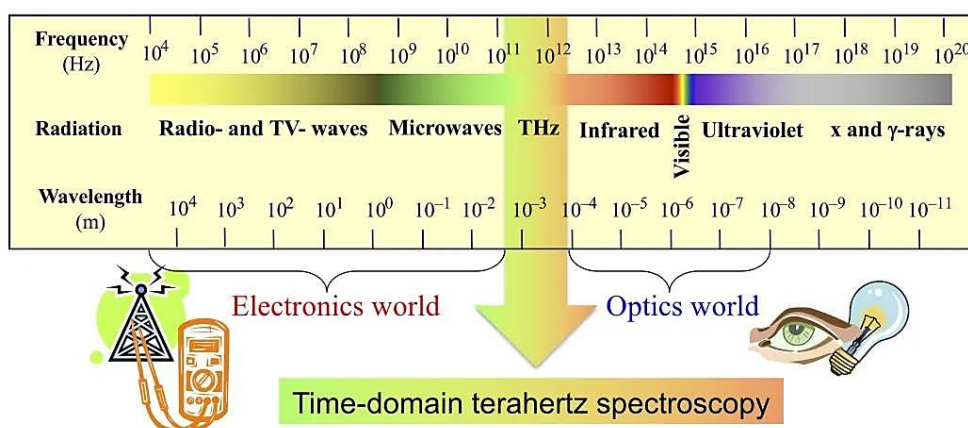
เทคนิค	ข้อดี	ข้อจำกัด
เทราเฮิร์ตซ์ (THz)	- ทะลุผ่านวัสดุที่ไม่โปร่งใส เช่น พลาสติกและเสื้อผ้า - สามารถตรวจจับคุณสมบัติโครงสร้างโมเลกุลได้ดี - การเตรียมตัวอย่างไม่ซับซ้อนและไม่ต้องใช้ตัวทำลายละลาย - วิเคราะห์ตัวอย่างโดยไม่ทำลาย	- ความซับซ้อนในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัม - ความละเอียดของสัญญาณอาจต่ำเมื่อเทียบกับย่านอินฟราเรด - ในการวัดที่มีความถี่สูง อาจทำให้ข้อมูลที่ได้มีสัญญาณรบกวนสูง - ไม่เหมาะสำหรับการวิเคราะห์ที่โครงสร้างสารซับซ้อน
อินฟราเรด (IR)	- สามารถให้ข้อมูลเกี่ยวกับโครงสร้างทางเคมีและกลุ่มฟังก์ชันของตัวอย่างได้ - สามารถให้ข้อมูลที่เกี่ยวข้องกับการสั่นสะเทือนของพันธะในโมเลกุล - การเตรียมตัวอย่างไม่ซับซ้อนและไม่ต้องใช้ตัวทำลายละลาย - วิเคราะห์ตัวอย่างโดยไม่ทำลาย - วิเคราะห์ได้รวดเร็ว	- ข้อมูลสเปกตรัมอาจซับซ้อนในกรณีที่มีสารผสมหลายชนิด - สเปกตรัมอาจมีพีคของสเปกตรัมจำนวนมากที่ทำให้ยากต่อการตีความและแยกแยะสารประกอบ - ไม่เหมาะสมสำหรับการวิเคราะห์วัสดุที่มีความหนาแน่นมากเกินไป

จากข้อมูลในตารางดังกล่าว สามารถเห็นได้ว่าเทคนิคทั้งสองมีคุณสมบัติที่เหมาะสมสำหรับการตรวจวัดหลักในผลิตภัณฑ์แบ่งผ่านตามลักษณะการใช้งานที่ต่างกัน รายละเอียดเกี่ยวกับการประยุกต์ใช้คลื่นอินฟราเรดและเทราเฮิร์ตซ์ในการวิเคราะห์สารปลอมปนในแป้งสำหรับอุปโภคและบริโภค ดังนี้

2.4.1 คลื่นเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz wave; THz)

คลื่นเทราเฮิร์ตซ์เป็นย่านคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าช่วงสุดท้ายที่นำประยุกต์ใช้งานทางด้านวิทยาศาสตร์ โดยมีความถี่ประมาณ 0.1 ถึง 10 เทราเฮิร์ตซ์ (หรือความยาวคลื่นประมาณ 30 ไมโครเมตรถึง 3 มิลลิเมตร) อยู่ระหว่างคลื่นไมโครเวฟ (Microwave) และคลื่นอินฟราเรด (Infrared) แสดงในรูปที่ 5 เป็นย่านความถี่ที่มีพลังงานต่ำมากส่งผลให้มีความปลอดภัยสูงเนื่องจากพลังงานของคลื่นต่ำกว่าแสงอัลตราไวโอเล็ตและรังสีเอ็กซ์ ทำให้ไม่ทำลายเซลล์หรือเนื้อเยื่อของมนุษย์ อีกทั้งยังมีความสามารถในการตรวจวัดและระบุสารเคมีและโครงสร้างโมเลกุลที่มีความละเอียดสูงเนื่องจากการ

ดูดกลืนและการสั่นของโมเลกุลในช่วงนี้ สามารถทะลุผ่านวัสดุหลายชนิด เช่น กระดาษ พลาสติก และเสื้อผ้า [56] แต่มีข้อจำกัดในการทะลุผ่านโลหะและน้ำ คุณสมบัติเหล่านี้ทำให้เกิดการพัฒนาและนำคลื่นความถี่ในย่านนี้มาประยุกต์ใช้งานอย่างแพร่หลาย เช่น การตรวจสอบและวิเคราะห์ทางการแพทย์ การรักษาความปลอดภัยในระบบสนามบินเพื่อตรวจสอบวัตถุต้องสงสัยที่ซ่อนอยู่ในเสื้อผ้า การวิจัยทางเคมีและชีววิทยา และการวิเคราะห์คุณภาพและความปลอดภัยของอาหาร โดยใช้ในการตรวจสอบสารปนเปื้อนและวิเคราะห์คุณภาพของอาหาร เป็นต้น [57]



$$1 \text{ THz} \leftrightarrow 1 \text{ ps} \leftrightarrow 33 \text{ cm}^{-1} \leftrightarrow 0.3 \text{ mm} \leftrightarrow 48 \text{ K} \leftrightarrow 4.1 \text{ meV}$$

รูปที่ 5 คลื่นเทราเฮิร์ตซ์ในสเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า [58]

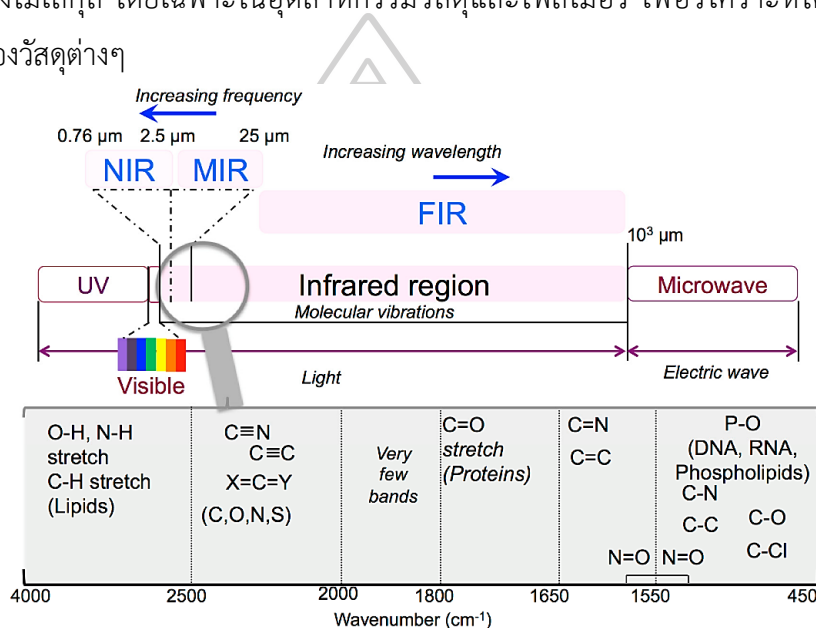
2.4.2 คลื่นอินฟราเรด (Infrared Wave; IR)

คลื่นอินฟราเรด เป็นคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ไม่สามารถมองเห็นได้ด้วยตาเปล่า คลื่นอินฟราเรดอยู่ระหว่างย่านที่มองเห็น (Visible region) กับย่านไมโครเวฟ (Microwave region) โดยมีความยาวคลื่นตั้งแต่ประมาณ 780 นาโนเมตรถึง 1 มิลลิเมตร คลื่นอินฟราเรดมีบทบาทสำคัญในการวิเคราะห์ทางเคมีและฟิสิกส์ เนื่องจากสามารถตรวจสอบการสั่นของพันธะเคมีในโมเลกุล ทำให้สามารถระบุชนิดของสารเคมีในตัวอย่างได้ การวิเคราะห์ด้วยคลื่นอินฟราเรดสามารถทำได้กับตัวอย่างในรูปแบบต่างๆ ไม่ว่าจะเป็นของแข็ง ของเหลว หรือก๊าซ นอกจากนี้ยังสามารถใช้ในการวิเคราะห์ตัวอย่างที่มีปริมาณน้อยได้อย่างมีประสิทธิภาพ แสดงในรูปที่ 6 โดยอินฟราเรดแบ่งออกเป็นช่วงต่างๆ ตามความยาวคลื่น [59] ดังนี้

1) ย่านอินฟราเรดใกล้ (Near-infrared region; Near-IR): ความยาวคลื่น 4,000 – 12,800 cm^{-1} (อยู่ในช่วง 780 นาโนเมตรถึง 2.5 ไมโครเมตร) มักถูกใช้ในการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของสารอินทรีย์และสารประกอบชีวภาพ เนื่องจากโมเลกุลในช่วงนี้มีการดูดกลืนแสงที่สามารถบ่งชี้ถึงการมีอยู่ของพันธะเคมีบางชนิดได้

2) ย่านอินฟราเรดกลาง (Middle-infrared region; Mid-IR): ความยาวคลื่น 200-4,000 cm^{-1} (อยู่ในช่วง 2.5 ถึง 25 ไมโครเมตร) ได้รับความนิยมมากที่สุดในการวิเคราะห์ทางเคมี โดยเฉพาะอย่างยิ่งในการตรวจสอบการสั่นของพันธะเคมีในโมเลกุล ช่วงนี้เหมาะสำหรับการระบุชนิดของพันธะเคมีและกลุ่มฟังก์ชันในโมเลกุลต่างๆ ทำให้เป็นเครื่องมือสำคัญในหลายอุตสาหกรรม เช่น อุตสาหกรรมยา อาหาร และเครื่องสำอาง

3) ย่านอินฟราเรดไกล (Far-infrared region; Far-IR): ความยาวคลื่น 10 - 300 cm^{-1} (อยู่ในช่วง 25 ไมโครเมตรถึง 1 มิลลิเมตร) ถูกนำมาใช้ในการศึกษาสมบัติทางกายภาพของโมเลกุลและการหมุนของโมเลกุล โดยเฉพาะในอุตสาหกรรมวัสดุและโพลิเมอร์ เพื่อวิเคราะห์โครงสร้างและพฤติกรรมของวัสดุต่างๆ



รูปที่ 6 คลื่นอินฟราเรดในสเปกตรัมของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า [60]

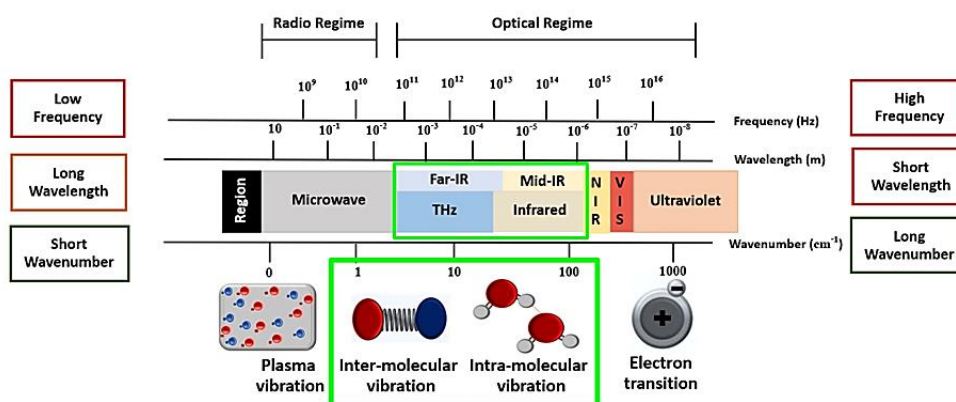
2.5 เครื่องฟูริเยร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy; FT-IR)

เครื่องฟูริเยร์ทรานส์ฟอร์มสเปกโทรสโกปี (FT-IR) ได้รับการพัฒนาจากเครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีแบบดั้งเดิม ซึ่งเครื่องแบบดั้งเดิมใช้กระบวนการแยกแสงด้วยกรง (dispersive) เพื่อวิเคราะห์สเปกตรัมของสารต่าง ๆ ในการศึกษาครั้งนี้ได้เลือกใช้เครื่อง Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) รุ่น VERTEX 80v จาก Bruker, MA, USA แสดงในรูปที่ 7 ซึ่งมีข้อดีคือทำงานได้รวดเร็วขึ้น มีความสามารถในการจำแนกสารที่สูงขึ้น และสามารถวิเคราะห์สารตัวอย่างที่ต้องการในปริมาณน้อยได้อย่างแม่นยำ ในการวิเคราะห์ข้อมูลในคลื่นย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region; Mid-IR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; Far-IR) ซึ่งเป็นย่านที่ใช้ในการจำแนกสารอินทรีย์ สารอนินทรีย์และพันธะเคมีในโมเลกุล โดยย่าน Mid-IR เน้นการศึกษา

พันธะภายในโมเลกุล (intramolecular) ส่วนย่าน Far-IR เน้นการศึกษาปฏิสัมพันธ์ระหว่างโมเลกุล (intermolecular) [61] แสดงในรูปที่ 8 การวัดจากทั้งสองย่านนี้ช่วยในการตรวจสอบและวิเคราะห์คุณลักษณะเฉพาะของสารได้อย่างครอบคลุม ข้อมูลที่ได้จากการวัดในทั้งสองย่านนี้ถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์สเปกตรัมของทัลก์บริสุทธิ์ ทัลก์ที่ผ่านการเคลือบในรูปแบบต่าง ๆ รวมถึงผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งฝุ่นสำหรับบริโศก ซึ่งช่วยให้สามารถตรวจสอบสารที่เราสนใจได้อย่างมีประสิทธิภาพ



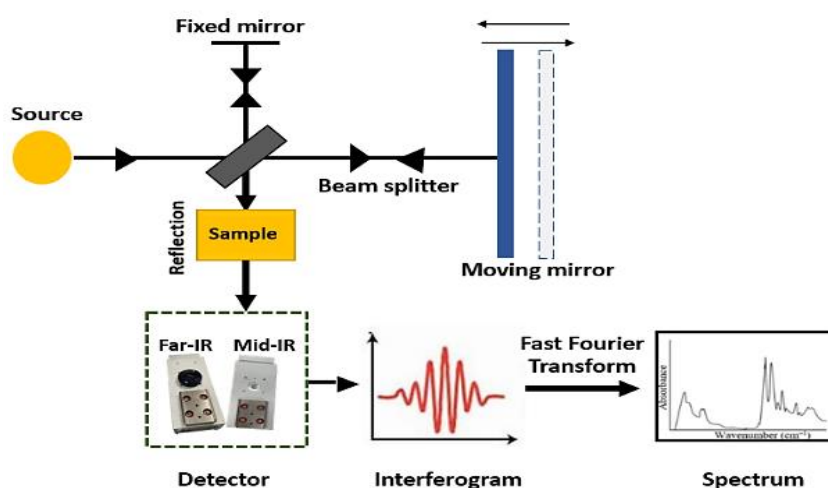
รูปที่ 7 เครื่องฟูเรียร์ทรานฟอร์มสเปกโตรมิเตอร์ (FT-IR) รุ่น VERTEX 80v [62]



รูปที่ 8 การศึกษาอันตรกิริยาในรูปแบบต่างๆ ของสารตัวอย่างในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR)

2.5.1 หลักการทำงานของเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มสเปกโทรสโกปี (FT-IR)

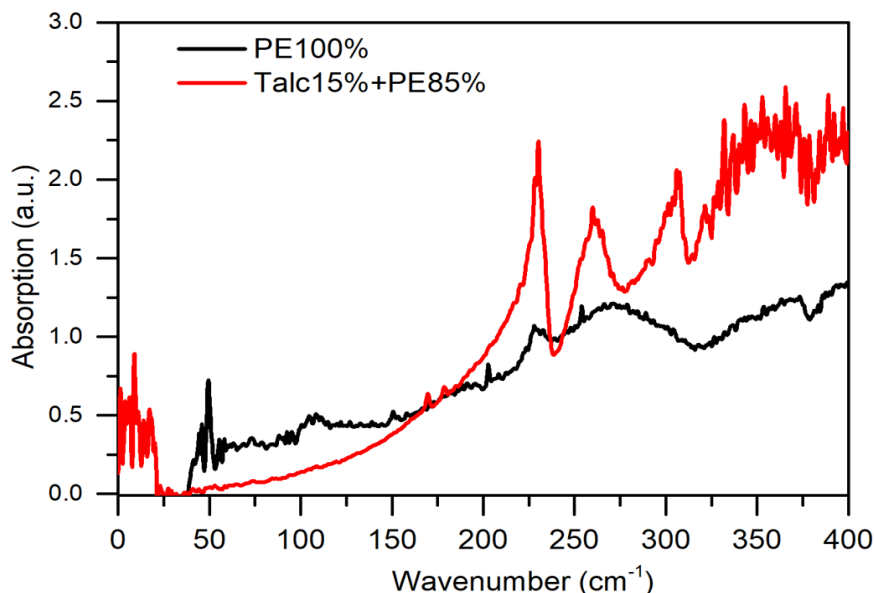
เครื่อง FT-IR นั้นจะเริ่มจากการแสงรังสีเข้าไป โดยที่ตัวแยกลำแสง (Beam Splitter) ทำการแยกลำแสงออกเป็นสองส่วน ลำแสงแรกจะทอนไปสู่กระจกที่อยู่กับที่ (Fixed mirror) ลำแสงที่สองไปยังกระจกที่เคลื่อนที่ไปมา (Moving mirror) โดยที่ลำแสงทั้งสองนี้จะรวมกันอีกครั้งที่ตัวแยกลำแสงอีกครั้งก่อนที่จะส่งไปยังตัวรับสัญญาณ (Detector) จนเกิดการแทรกสอดของสัญญาณที่มีความเข้มของแสงที่แตกต่างกันขึ้นอยู่กับการตอบสนองของตัวอย่างนั้นๆ จากนั้นตัวรับสัญญาณจะวัดความเข้มของแสงที่มารวมกันและบันทึกสัญญาณไฟฟ้า (Interferogram) ที่เป็นลักษณะของคลื่นที่แสดงการเปลี่ยนแปลงของความเข้มสัญญาณในช่วงเวลาต่างๆ สัญญาณจะถูกประมวลผลโดยการแปลงฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์ม (Fourier Transform) เพื่อสร้างกราฟสเปกตรัมที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มสัญญาณและความถี่ โดยเราสามารถแปลงความถี่เป็นเลขคลื่นได้เพื่อใช้ในการระบุและวิเคราะห์สารตัวอย่างต่อไป แสดงในรูปที่ 9



รูปที่ 9 หลักการทำงานของเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

เมื่อทำการวัดสเปกตรัมด้วยเครื่อง FT-IR และได้รับข้อมูลสเปกตรัมมาแล้ว การวิเคราะห์สามารถทำได้โดยการเปรียบเทียบความคล้ายคลึงของสเปกตรัมของสารมาตรฐาน (Reference) กับสารตัวอย่างที่ต้องการทดสอบในตัวอย่างหรือสารผสมเดียวกัน แสดงในรูปที่ 10 จะเห็นว่ามีความโดดเด่น (Peaks) ที่แสดงการดูดกลืนแสงในช่วงความถี่ต่างๆ ที่มีความสูงต่ำแตกต่างกัน สารตัวอย่างที่แตกต่างกันควรมีสเปกตรัมที่แตกต่างกัน โดยแต่ละย่านความถี่แสดงถึงกายภาพทางเคมีของสารที่แตกต่างกัน โดยสามารถอธิบายร่วมกับทฤษฎีความหนาแน่นฟังก์ชัน (Density Functional Theory; DFT) [63] นอกจากนี้ งานวิจัยยังประยุกต์ใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพและความน่าเชื่อถือของการวิเคราะห์ ลดระยะเวลา และจัดการกับข้อมูลขนาดใหญ่ได้อย่างมีประสิทธิภาพ กระบวนการนี้นำไปสู่การสร้างแบบจำลองที่จำแนกประเภทการเคลื่อนของทลก็ได้ รวมถึงตรวจวัดและจำแนกผลิตภัณฑ์แบ่งฟุ้งที่มีทลและไม่ทล ผลการทดลองแสดงว่าแนวทางนี้

สามารถช่วยตรวจวัดพัลส์ที่ผ่านการเคลือบในแบบต่างๆ ได้อย่างรวดเร็วในแป่งฝุ่นสำหรับเด็กและแป่งสำหรับบริโภค ลดต้นทุน ความซับซ้อนในการวิเคราะห์ และการพึ่งพาบุคลากรเฉพาะทาง



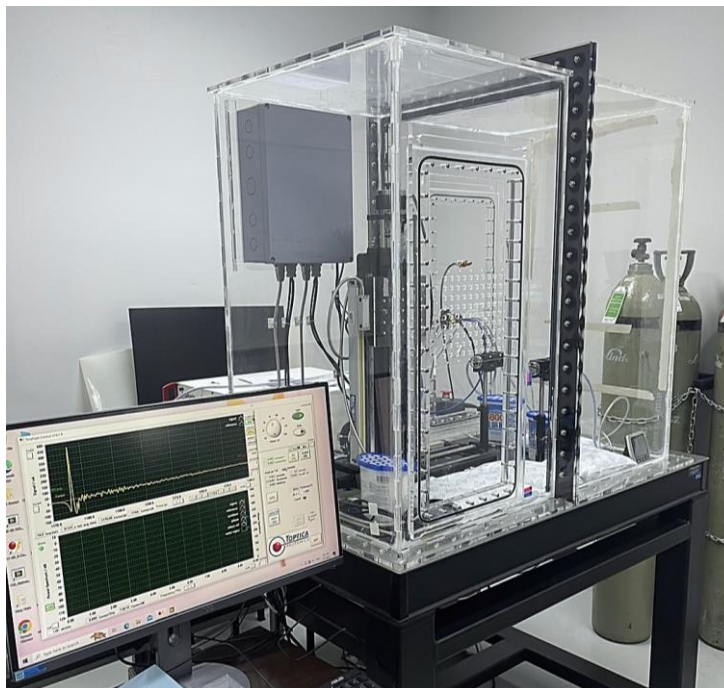
รูปที่ 10 ตัวอย่างสเปกตรัมของโพลิเอทิลีน (PE) กับทัลก์บริสุทธิ์ (Talc) วัดโดยเครื่อง FT-IR ในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR)

2.6 เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy; THz-TDS)

เทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy; THz-TDS) TOPTICA Photonics AG, Munich, Germany แสดงในรูปที่ 11 เป็นเทคนิคทางสเปกโทรสโกปีที่ใช้ในการวัดพลังงานของรังสีแม่เหล็กไฟฟ้าในช่วงความถี่เทราเฮิร์ตซ์ตามฟังก์ชันเวลา ช่วงความถี่นี้ครอบคลุมระหว่าง 0.1 THz ถึง 10 THz (ความยาวคลื่นประมาณ 3.3 มม. - 333 มม.) เป็นช่วงที่มีความสำคัญในการศึกษาคุณสมบัติของสารต่างๆ โดยเฉพาะการตอบสนองของน้ำและสารเคมีในย่านความถี่ต่ำ เช่น การสั่นสะเทือนของโมเลกุลในของเหลว เช่น น้ำ เมทานอล (Methanol) และเอทานอล (Ethanol) เป็นต้น

เครื่อง THz-TDS เป็นเทคนิคที่มีความสามารถในการศึกษาปรากฏการณ์ในช่วงความถี่ต่ำของผลึกโมเลกุล โดยสามารถใช้ร่วมกับทฤษฎีความหนาแน่นฟังก์ชัน (Density Functional Theory; DFT) เพื่อคำนวณและระบุตำแหน่งของพีคที่เกิดจากการสั่นของอะตอมหรือโมเลกุลในสเปกตรัมของสารได้ [64] การแปลงข้อมูลจาก THz-TDS เป็นสเปกตรัมทำได้โดยใช้การแปลงฟูเรียร์ (Fourier Transformation) ซึ่งช่วยในการแยกแยะการตอบสนองที่แตกต่างกันในย่านความถี่นี้ และยังสามารถใช้ในการคำนวณเฟส (Phase) ของข้อมูลเพื่อศึกษาเชิงลึกเพิ่มเติมได้ในย่านความถี่นี้ เมื่อโมเลกุลดูด

ซับพลังงานจะเกิดการสั่นของโมเลกุลทั้งภายในและภายนอก โดยการสั่นสามารถเกิดในรูปแบบการยืด (Stretching) และการงอ (Bending) ซึ่งลักษณะการสั่นเหล่านี้มีเอกลักษณ์เฉพาะสำหรับแต่ละโมเลกุล ดังนั้น THz-TDS จึงเป็นเครื่องมือสำคัญที่สามารถวิเคราะห์และศึกษาคุณสมบัติของสารในย่านความถี่เทราเฮิร์ตซ์ได้



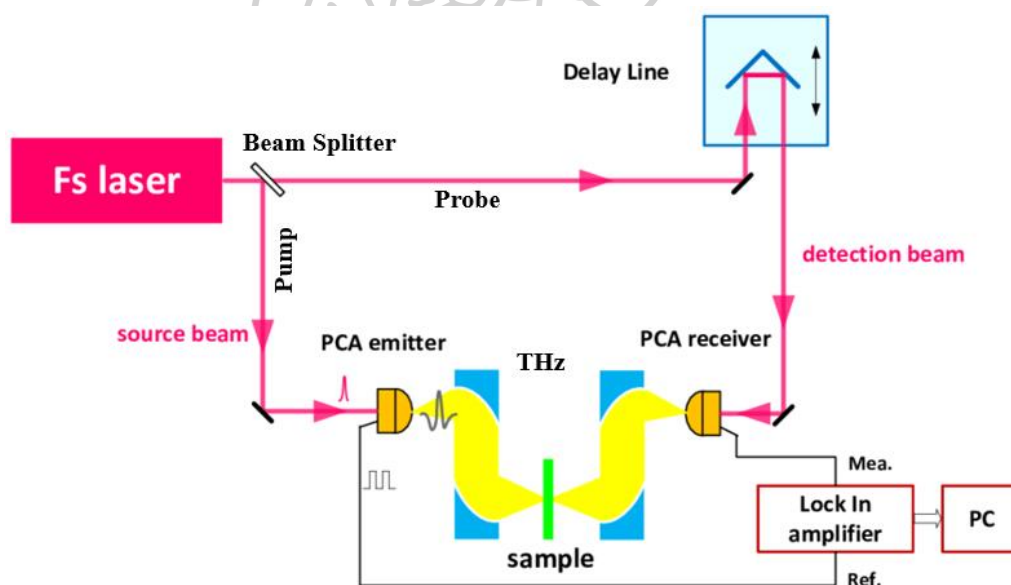
รูปที่ 11 เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี (THz-TDS) ซึ่งอยู่ในการดูแลของทีมหาวิทยาลัยเทราเฮิร์ตซ์ ตั้งอยู่ที่ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (เนคเทค-สวทช.)

2.6.1 หลักการทำงานของเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี (THz-TDS)

ในกระบวนการตรวจวัดสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ (THz) โดยใช้เทคนิค Time Domain Spectroscopy (TDS) ระบบจะเริ่มต้นด้วยการใช้เลเซอร์เฟมโตวินาที (Femtosecond Laser) ซึ่งเป็นเลเซอร์ที่สามารถสร้างพัลส์แสงในช่วงเวลาสั้นมากๆ ระดับเฟมโตวินาที พัลส์แสงนี้จะถูกใช้เป็นตัวกำเนิดของคลื่นเทราเฮิร์ตซ์ (THz) ซึ่งเป็นช่วงคลื่นความถี่ที่อยู่ระหว่างย่านไมโครเวฟและอินฟราเรด โดยมีความถี่อยู่ในช่วง 0.1-6 THz

ระบบ THz-TDS พัลส์แสงจากเลเซอร์เฟมโตวินาทีจะถูกแบ่งออกเป็นสามส่วนหลักๆ ส่วนแรกถูกนำไปใช้สำหรับการสร้างสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ ซึ่งทำได้โดยการยิงพัลส์แสงไปยังเสาอากาศโฟโตคอนดักทีฟ (Photoconductive Antenna, PCA) ทำการแปลงพัลส์แสงเฟมโตวินาที (femtosecond pulse) ให้เป็นพัลส์แสงพิโควินาที (Picosecond pulse) พัลส์แสงพิโควินาทีนี้จะเปลี่ยนให้กลายเป็นสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ หลังจากทีสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ถูกสร้างขึ้น สัญญาณจะถูกส่งไปยัง

ตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์ สัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ที่ผ่านตัวอย่างจะเกิดการอันตรกิริยา (Interaction) กับโครงสร้างของตัวอย่าง เช่น การดูดซับ การสะท้อน และการหักเห ซึ่งการเปลี่ยนแปลงเหล่านี้จะสะท้อนให้เห็นถึงคุณสมบัติทางไฟฟ้าหรือทางกายภาพของตัวอย่าง จากนั้นสัญญาณที่เปลี่ยนแปลงจะถูกตรวจวัดโดยเสาอากาศโฟโตคอนดักทีฟอีกครั้ง ซึ่งจะทำหน้าที่ตรวจจับพัลส์สัญญาณที่ผ่านตัวอย่าง ในการตรวจจับสนี้ จะมีการใช้ลำแสงตรวจจับ (probe beam) เพื่อกระตุ้นให้เสาอากาศโฟโตคอนดักทีฟสามารถตรวจจับสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ได้ โดยเสาอากาศนี้จะเปลี่ยนแปลงสัญญาณเทราเฮิร์ตซ์ให้เป็นสัญญาณไฟฟ้าที่สามารถวัดและบันทึกได้ ข้อมูลที่ได้จากการตรวจจับสัญญาณจะประกอบไปด้วย เฟส (Phase) และแอมพลิจูด (Amplitude) ของคลื่นเทราเฮิร์ตซ์ ซึ่งข้อมูลเหล่านี้แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงของพลังงานคลื่นที่เกิดอันตรกิริยากับตัวอย่าง สัญญาณที่ได้จะถูกบันทึกในรูปแบบของเวลา (Time Domain) ซึ่งสามารถนำไปแปลงเป็นข้อมูลในโดเมนความถี่ (Frequency Domain) โดยใช้การแปลงฟูเรียร์ (Fourier Transform) การแปลงข้อมูลนี้จะช่วยให้สามารถวิเคราะห์สเปกตรัมของตัวอย่างได้อย่างละเอียด โดยข้อมูลสเปกตรัมเหล่านี้จะช่วยให้เราสามารถระบุโครงสร้างทางเคมีของตัวอย่างได้ นอกจากนี้ยังสามารถใช้ในการตรวจสอบการดูดซับที่ความถี่เฉพาะ ซึ่งมักเกี่ยวข้องกับโครงสร้างโมเลกุลหรือการสั่นสะเทือนของพันธะในตัวอย่าง แสดงในรูปที่ 12

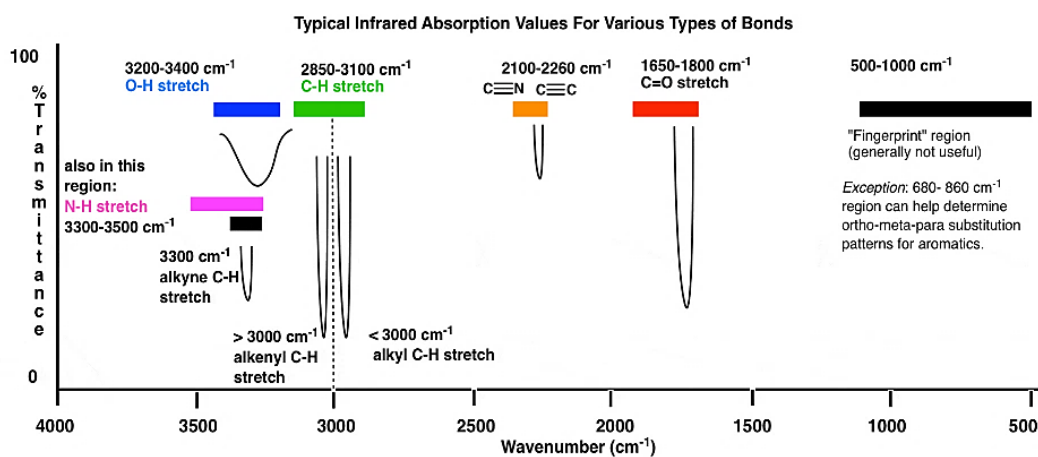


รูปที่ 12 หลักการทำงานของเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี [65]

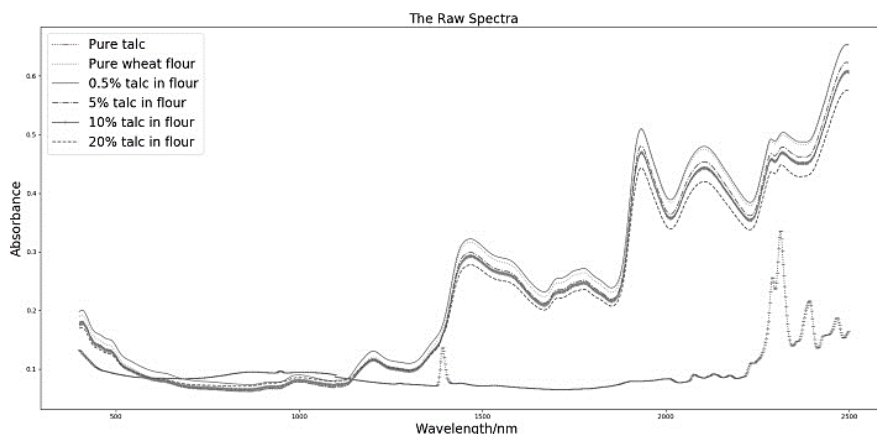
2.7 การใช้ข้อมูลสเปกตรัมเพื่อการวิเคราะห์ในเชิงคุณภาพ (Using spectral data for qualitative analysis)

2.7.1 การใช้สเปกตรัมในการระบุและจำแนกองค์ประกอบของสารเคมี

เมื่อแสงอินฟราเรดและเทอร์าเฮิรตซ์ถูกส่งผ่านสารตัวอย่าง โมเลกุลในสารนั้นจะดูดซับพลังงานแสงในช่วงความถี่ที่เฉพาะ ซึ่งสัมพันธ์กับการสั่น (Stretching) หรือบิดงอ (Bending) ของพันธะเคมีต่างๆ ในโมเลกุลนั้น การดูดซับนี้จะทำให้เกิด พีคในสเปกตรัมที่ตำแหน่งความถี่เฉพาะที่เรียกว่าการดูดซับลักษณะเฉพาะ (Characteristic Absorption) การใช้ตำแหน่งพีคที่เกิดจากการดูดซับในสเปกตรัมเพื่อระบุพันธะเคมีของสารเป็นวิธีที่มีประสิทธิภาพในการพิสูจน์หรือระบุสารตัวอย่าง แสดงในรูปที่ 13 โดยพีคที่เกิดขึ้นในตำแหน่งบางตำแหน่งของสเปกตรัมมักมีความสัมพันธ์กับโครงสร้างโมเลกุลของสารนั้น ๆ ตัวอย่างเช่น ถ้าพบว่ามีการดูดซับที่เกิดขึ้นในตำแหน่งที่ระบุเฉพาะเมื่อเทียบกับสารมาตรฐานที่รู้จักอย่างชัดเจน ซึ่งเป็น fingerprint ของโครงสร้างที่เชื่อมโยงกับแนวโน้มของผลลัพธ์ที่ได้จากการดูดซับ การพบพีคที่ตรงกับตำแหน่งที่ระบุของสารมาตรฐานสามารถช่วยให้เราระบุสารตัวอย่างได้อย่างชัดเจน เนื่องจากมีความเป็นไปได้สูงว่าสารตัวอย่างนั้นมีโครงสร้างโมเลกุลที่คล้ายคลึงกับสารมาตรฐานนั้น ๆ แสดงในรูปที่ 14 ดังนั้นการใช้ตำแหน่งของพีคที่เกิดจากการดูดซับในสเปกตรัมเพื่อระบุพันธะเคมีของสารตัวอย่างเป็นวิธีที่มีความเป็นไปได้สูงและมีประสิทธิภาพในการพิสูจน์หรือระบุสารตัวอย่างได้อย่างชัดเจน



รูปที่ 13 ตัวอย่างการดูดซับลักษณะเฉพาะของพันธะเคมีในย่านอินฟราเรด (IR Region) [66]



รูปที่ 14 ตัวอย่างสเปกตรัมของกลุ่มตัวอย่างชาที่ผสมกับทัลก์ในปริมาณต่างๆ [15]

2.7.2 การใช้ตำแหน่งพิกในการจำแนกแบ่งที่มีส่วนผสมของทัลก์

ในการทดลองนี้ เราจะใช้สเปกตรัมทัลก์ความบริสุทธิ์ $> 95\%$ เป็นตัวเทียบเพื่อวิเคราะห์แบ่งฝุ่นสำหรับเด็ก (สูตรทัลก์และสูตรมีทัลก์) กับแบ่งสำหรับบริโภคเพื่อตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ โดยดูจากการเกิดพิกในตำแหน่งของสเปกตรัมของทัลก์บริสุทธิ์เพื่อเป็นสารมาตรฐานสำหรับเทียบสเปกตรัม จากนั้นเปรียบเทียบสเปกตรัมที่ได้วัดได้จากตัวอย่างผลิตภัณฑ์แบ่งที่นำมาทดสอบที่มีองค์ประกอบที่เกี่ยวข้องกับแร่ทัลก์ การเปรียบเทียบตำแหน่งพิกระหว่างสเปกตรัมของแร่ทัลก์และสารตัวอย่างจะช่วยให้เราทราบถึงความคล้ายคลึงของสารตัวอย่างกับแร่ทัลก์ว่ามีส่วนประกอบที่เหมือนกันหรือไม่ หากพบว่ามีพิกที่ตำแหน่งเดียวกันหรือใกล้เคียงกัน เราสามารถสรุปได้ว่าสารตัวอย่างมีส่วนประกอบของทัลก์อยู่ และการพบพิกที่ไม่ตรงกับตำแหน่งของแร่ทัลก์อาจบ่งชี้ว่าสารตัวอย่างไม่มีส่วนประกอบของทัลก์ การวิเคราะห์นี้จะช่วยให้เราทราบถึงความเป็นไปได้ของการมีหรือไม่มีแร่ทัลก์ในสารตัวอย่างที่ทดสอบได้อย่างชัดเจนมากยิ่งขึ้น

2.8 การประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมและการประยุกต์ใช้ Machine Learning

2.8.1 วิธีการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing)

การประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้นเป็นขั้นตอนสำคัญที่ทำให้ข้อมูลมีความพร้อมก่อนที่จะนำไปใช้ในกระบวนการวิเคราะห์ด้วย Machine Learning (ML) เนื่องจากข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการวัดผ่านเครื่อง FT-IR และเครื่อง THz-TDS มักจะมีสัญญาณรบกวนหรือความไม่สม่ำเสมอที่อาจส่งผลต่อความแม่นยำในการวิเคราะห์ ดังนั้น การประมวลผลเบื้องต้นจึงมีความสำคัญเพื่อปรับปรุงคุณภาพของข้อมูล เพื่อให้การวิเคราะห์ผลลัพธ์และการตีความข้อมูลเป็นไปอย่างมีประสิทธิภาพ ในที่นี้ได้ทำการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมเบื้องต้นด้วยวิธีการต่าง ๆ ดังนี้

1) การเลือกช่วงของสเปกตรัม (Wavenumber Selection): การเลือกช่วงเลขคลื่น (wavenumber) ที่มีความสำคัญและเกี่ยวข้องกับการศึกษาจะช่วยลดข้อมูลที่ไม่จำเป็นออกไป ทำให้ข้อมูลที่เหลืออยู่มีความชัดเจนและมีความสัมพันธ์กับสารที่กำลังศึกษา ตัวอย่างเช่น การตัดข้อมูลในช่วงที่มีสัญญาณรบกวนสูงหรือช่วงที่ไม่มีการดูดกลืนแสง (absorption) ของสารตัวอย่าง ทำให้การวิเคราะห์ข้อมูลมีความแม่นยำมากขึ้นและช่วยลดขนาดของข้อมูลในการประมวลผล

2) การปรับเส้นฐานสเปกตรัม (Baseline Removal): การวิเคราะห์การกระเจิงของแสงที่เกิดขึ้นระหว่างการเก็บข้อมูลอาจทำให้เส้นฐานของสเปกตรัมมีความซับซ้อนผิดปกติ การปรับเส้นฐานจะช่วยลดผลกระทบนี้ทำให้เส้นสัญญาณสเปกตรัมที่ได้แสดงรูปแบบการดูดกลืนแสงของสารตัวอย่างได้ชัดเจนมากขึ้น วิธีการปรับเส้นฐานมีหลายวิธี ในการศึกษาครั้งนี้เลือกใช้ polynomial fitting หรือการใช้เทคนิคการปรับเส้นฐานแบบเฉลี่ย (mean subtraction) ซึ่งจะช่วยให้สามารถวิเคราะห์ข้อมูลได้ง่ายขึ้นและมีความถูกต้องมากขึ้น

3) การปรับความเรียบของสเปกตรัม (Smoothing Surface): การทำ smoothing ความไม่สม่ำเสมอในสเปกตรัมที่เกิดจากสัญญาณรบกวน (noise) วิธีนี้ช่วยให้เส้นกราฟของสเปกตรัมดูเรียบและสม่ำเสมอมากขึ้น เทคนิคที่ใช้ในการทำ smoothing มีหลายแบบ ในครั้งนี้เลือกใช้ Savitzky-Golay filter ซึ่งเป็นวิธีที่ช่วยให้ข้อมูลเรียบขึ้นโดยการปรับเส้นกราฟให้สอดคล้องกับพหุนาม (polynomial) ที่คำนวณจากข้อมูลใกล้เคียงกัน การใช้เทคนิคนี้ทำให้สามารถรักษารูปแบบและลักษณะสำคัญของสเปกตรัมไว้

4) การลบค่าผิดปกติ (Outlier Removal): ในการเก็บข้อมูลสเปกตรัมอาจเกิดค่าผิดปกติ (outliers) ซึ่งเป็นข้อมูลที่มีค่าห่างจากค่าปกติ ส่งผลต่อการวิเคราะห์และการตีความผลลัพธ์ วิธีการลบค่าผิดปกติสามารถทำได้หลายวิธี ในการศึกษาครั้งนี้เลือกใช้เทคนิคทางสถิติในการตรวจจับและลบค่าที่ผิดปกติออกจากชุดข้อมูล การใช้เทคนิคนี้จะช่วยให้ข้อมูลมีความเป็นระเบียบและเชื่อถือได้มากยิ่งขึ้น

2.8.2 การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA)

หลังจากที่ข้อมูลสเปกตรัมได้ผ่านการประมวลผลเบื้องต้นแล้ว ข้อมูลเหล่านี้จะถูกนำมาวิเคราะห์ด้วยเทคนิค PCA ซึ่งเป็นขั้นตอนสำคัญก่อนการสร้างโมเดล Machine Learning การทำ PCA ช่วยในการลดขนาดมิติ (Dimensionality Reduction) ของข้อมูล โดยการแปลงข้อมูลเดิมไปเป็นข้อมูลใหม่ที่เรียงลำดับความสำคัญในการอธิบายความแปรปรวนของข้อมูลจากมากไปน้อย แม้ว่าจำนวนมิติของข้อมูลจะยังคงเท่าเดิม การวิเคราะห์ด้วย PCA ช่วยลดความซับซ้อนของข้อมูลโดยเลือกเฉพาะข้อมูลที่มีความสำคัญมากที่สุด ซึ่งไม่เพียงทำให้โมเดลทำงานได้เร็วขึ้นและมีประสิทธิภาพมากขึ้น แต่ยังลดโอกาสเกิดการ overfitting โดยกระบวนการทำ PCA มีดังนี้

1) การเตรียมข้อมูลสเปกตรัม: ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่วัดได้จากทั้งสองเครื่อง หลังจากผ่านการประมวลผลเบื้องต้นด้วยขั้นตอนที่ได้กล่าวไปในหัวข้อ 2.8.1 สเปกตรัมเหล่านี้จะถูกนำมาจัดเตรียมเพื่อทำ PCA โดยปกติจะมีการปรับสเกลข้อมูลให้มีค่าเฉลี่ยเป็นศูนย์และความแปรปรวนเป็นหนึ่ง (Standardization) เพื่อให้แต่ละตัวแปรมีความสำคัญเท่าเทียมกัน

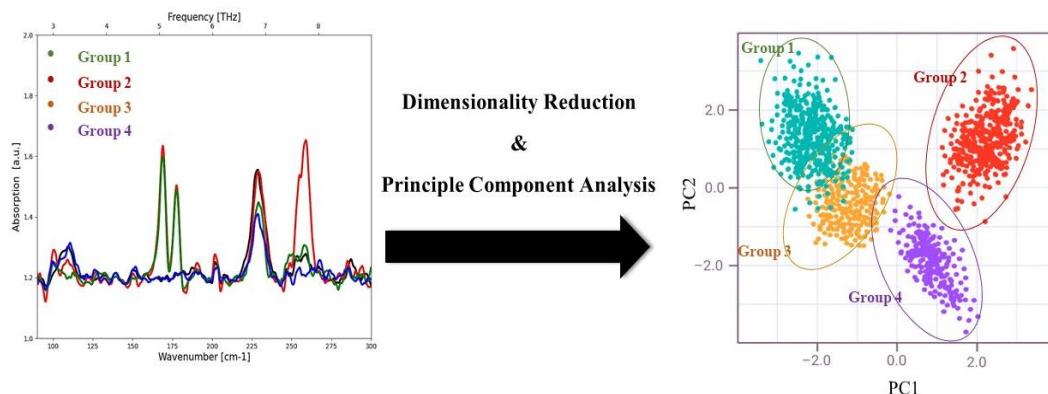
2) การคำนวณเมทริกซ์ความแปรปรวนร่วม (Covariance Matrix): เมทริกซ์ความแปรปรวนร่วมแสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรแต่ละคู่ในชุดข้อมูล โดยการคำนวณเมทริกซ์นี้จะช่วยให้เราสามารถหาทิศทางหลัก (Principal Components) ของข้อมูลได้

3) การหาค่าลักษณะเฉพาะและเวกเตอร์ลักษณะเฉพาะ (Eigenvalues and Eigenvectors): จากเมทริกซ์ความแปรปรวนร่วม จะมีการหาค่าลักษณะเฉพาะ (Eigenvalues) และเวกเตอร์ลักษณะเฉพาะ (Eigenvectors) ซึ่ง Eigenvalues จะแสดงถึงความสำคัญของแต่ละ Principal Component ในขณะที่ Eigenvectors จะแสดงทิศทางของ Principal Component ในข้อมูลใหม่

4) การเลือก Principal Components (PCs): Principal Components จะถูกเรียงลำดับจากความสำคัญมากไปน้อยตามค่า Eigenvalues ในกรณีนี้เราสามารถเลือกใช้ Principal Components เพียง 2 ตัวก็เพียงพอที่จะอธิบายคุณลักษณะของข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด เนื่องจาก Principal Components ที่อยู่ใน 2 มิติสามารถอธิบายรูปแบบข้อมูลในสเปกตรัมได้เกือบทั้งหมด

5) การแปลงข้อมูล (Transformation): ข้อมูลสเปกตรัมจะถูกแปลงจากเดิมไปยังแบบใหม่ตามทิศทางของ Principal Components ที่เราเลือก ทำให้ข้อมูลที่ได้มีการกระจายที่แสดงถึงความแตกต่างของข้อมูลอย่างชัดเจน

ดังนั้น การวิเคราะห์ PCA นี้มีบทบาทสำคัญในการลดขนาดมิติของข้อมูลในขณะที่ยังคงรักษาความสำคัญของข้อมูลเอาไว้ ช่วยให้การวิเคราะห์ข้อมูลและการแสดงผลทำได้ง่ายขึ้น นอกจากนี้ PCA ยังช่วยในการจำแนกประเภท (Classification) ได้โดยการสร้างกราฟหรือแผนภาพการกระจายของข้อมูลที่มีมิติที่ลดลง ช่วยให้สามารถเห็นการแยกกลุ่มของข้อมูลได้ชัดเจน ซึ่งแสดงในรูป 15



รูปที่ 15 ตัวอย่างการวิเคราะห์ผลโดยใช้เทคนิค PCA

2.8.3 การสร้างแบบจำลองในการตรวจวัดทล็กในผลิตภัณฑ์แบ่งผู้สำหรับผู้และแบ่งผู้สำหรับผู้

กระบวนการสร้างแบบจำลองโดยอาศัยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) เป็นขั้นตอนสำคัญในการวิเคราะห์ข้อมูลที่สามารถนำข้อมูลมาใช้ในการคาดการณ์หรือจำแนกประเภทได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยแบบจำลองจะถูกสร้างขึ้นจากข้อมูลสเปกตรัมที่ได้ผ่านการประมวลผลเบื้องต้นและผ่านกระบวนการ PCA เรียบร้อยแล้ว เพื่อให้แบบจำลองมีความแม่นยำและไม่เกิดการ Overfitting ข้อมูลสเปกตรัมจะถูกแบ่งออกเป็น 2 ส่วน ได้แก่ 1) ข้อมูลสเปกตรัมสำหรับฝึกอบรม (Training Data) ที่มีปริมาณ 70% ของข้อมูลทั้งหมดข้อมูลส่วนนี้ใช้ในการฝึกสอนโมเดลเพื่อเรียนรู้รูปแบบและความสัมพันธ์ในข้อมูล 2) ข้อมูลสเปกตรัมสำหรับทดสอบ (Testing Data) ที่มีปริมาณ 30% ของข้อมูลทั้งหมดเพื่อใช้ในการตรวจสอบประสิทธิภาพของโมเดลว่าสามารถทำนายหรือจำแนกประเภทได้อย่างถูกต้องในข้อมูลที่ไม่เคยเห็นมาก่อน กระบวนการนี้ช่วยให้มั่นใจได้ว่าโมเดลสามารถทำงานได้ดีทั้งในชุดข้อมูลฝึกอบรมและชุดข้อมูลทดสอบ ซึ่งลดความเสี่ยงของการเกิด Overfitting ที่โมเดลสามารถทำนายข้อมูลในชุดฝึกอบรมได้อย่างแม่นยำ แต่ความแม่นยำจะลดลงอย่างมากเมื่อทำนายข้อมูลใหม่ที่ไม่ได้อยู่ในชุดฝึกอบรม

หลังจากนั้นจึงนำข้อมูลที่แบ่งเหล่านี้เข้าสู่กระบวนการเรียนรู้ด้วยเครื่องแบบอัตโนมัติ โดยนำข้อมูลในชุดฝึกอบรมเข้าสู่กระบวนการเรียนรู้ด้วยเครื่อง (Training) และในระหว่างกระบวนการนี้ ข้อมูลในชุดฝึกอบรมส่วนหนึ่งจะถูกแบ่งออกมาเป็นข้อมูลตรวจสอบ (Validation Dataset) เพื่อทำการปรับปรุง Hyperparameters ของโมเดลเพิ่มเติม เพื่อให้โมเดลมีความถูกต้องในการจำแนก ในการศึกษาครั้งนี้ เราได้เลือกใช้โมเดลการเรียนรู้ของเครื่อง 3 ประเภท ได้แก่ Extra Trees Classifier, Random Forest Classifier, Logistic Regression โดยที่เลือกใช้โมเดลเหล่านี้มาเปรียบเทียบเนื่องจากแต่ละโมเดลมีคุณสมบัติที่ต่างกันและสามารถครอบคลุมลักษณะข้อมูลที่หลากหลายได้ โดยแต่ละโมเดลจะถูกปรับปรุง Hyperparameters ผ่านกระบวนการตรวจสอบข้อมูล (Validation) เพื่อให้ได้โมเดลที่มีประสิทธิภาพสูงสุด ทั้งนี้ ประสิทธิภาพของแบบจำลองจะถูกประเมินผ่านค่าความถูกต้อง (Accuracy) และค่าความแม่นยำ (Precision) เมื่อได้โมเดลที่มีประสิทธิภาพมากที่สุดแล้ว จึงนำค่าที่คำนวณได้ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกลมาเปรียบเทียบกัน เพื่อหาว่าสเปกตรัมในช่วงคลื่นความถี่ใดให้ผลลัพธ์การจำแนกที่ดีที่สุด ซึ่งขั้นตอนนี้จะช่วยให้สามารถเลือกใช้ช่วงคลื่นความถี่ที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการวิเคราะห์ต่อไป แสดงในรูปที่ 16

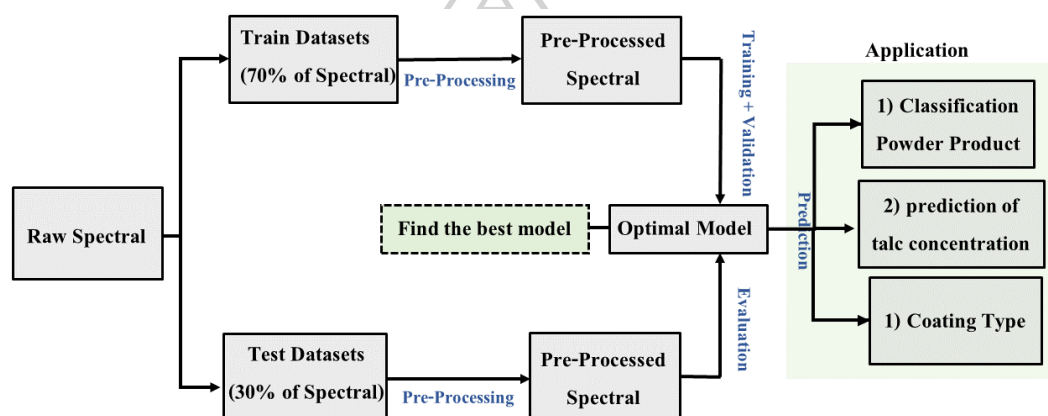
ในการศึกษาครั้งนี้ ได้มีการสร้างแบบจำลอง 3 แบบ ได้แก่ แบบแรกใช้สำหรับตรวจวัดและการจำแนกการมีอยู่ของทล็กในผลิตภัณฑ์ แบบที่สองทำนายความเข้มข้นของทล็กที่อยู่ในผลิตภัณฑ์ และแบบที่สามสำหรับการจำแนกประเภทการเคลือบ โดยแบบจำลองใช้กระบวนการทำงานเดียวกัน

ที่ได้อธิบายไว้ข้างต้น โดยมีความแตกต่างเฉพาะที่ข้อมูลสเปกตรัมที่ใช้ในการฝึกอบรมและทดสอบเท่านั้น

โมเดลแรก: การตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ ถูกออกแบบมาเพื่อจำแนกประเภทผลิตภัณฑ์แบ่งที่มีส่วนผสมของทัลก์และไม่มีส่วนผสมของทัลก์

โมเดลที่สอง: การตรวจวัดทัลก์ปริมาณความเข้มข้นของทัลก์ ถูกออกแบบมาเพื่อทำนายความเข้มข้นของทัลก์ที่มีอยู่ในผลิตภัณฑ์

โมเดลสาม: การจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ ถูกออกแบบมาเพื่อจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ที่แตกต่างกัน โดยมีการเคลือบ 3 ประเภทที่ต้องการจำแนก ข้อมูลที่ใช้ในการฝึกอบรมโมเดลนี้มาจากสเปกตรัมของทัลก์ที่ผ่านการเคลือบแต่ละประเภท



รูปที่ 16 กระบวนการทำงานของการเรียนรู้ด้วยเครื่อง สำหรับใช้สร้างแบบจำลองในตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ ทำนายปริมาณความเข้มข้นของทัลก์และจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์

2.9 การใช้ข้อมูลสเปกตรัมของทัลก์เพื่อการวิเคราะห์ในเชิงปริมาณ (Using spectral data for quantitative)

2.9.1 การใช้แบบจำลองเชิงเส้นในการตรวจหาทัลก์ในเชิงปริมาณ

การวิเคราะห์ปริมาณทัลก์ในสารตัวอย่าง การใช้แบบจำลองเชิงเส้นในการสร้างความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสง (Absorbance) และความเข้มข้นของทัลก์ (Concentrations of talc) เป็นวิธีที่ช่วยให้เราสามารถคำนวณความเข้มข้นของทัลก์จากข้อมูลที่ได้จากการวัดสเปกตรัมโดยใช้เครื่อง FT-IR กระบวนการนี้ประกอบด้วยขั้นตอนหลัก ดังนี้

1) การเตรียมตัวอย่าง: เตรียมตัวอย่างทัลก์ในความเข้มข้นต่าง ๆ จากนั้นทำการวัดสเปกตรัมของสารมาตรฐานด้วยเครื่อง FT-IR และ THz-TDS เพื่อใช้เป็นมาตรฐานในการสร้างกราฟความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสงและความเข้มข้นของทัลก์

2) การสร้างโมเดล Partial Least Squares (PLS) Regression: โมเดลนี้จะช่วยหาความสัมพันธ์ระหว่างค่าการดูดกลืนแสงและความเข้มข้นของทัลก์ โดยการสร้างตัวแปรใหม่ขึ้นมาที่เรียกว่า Latent Variables (X) เป็นตัวแปรที่สกัดออกมาจากข้อมูลการดูดกลืนแสง โดยสร้างตัวแปรใหม่ที่เลือกเฉพาะข้อมูลที่มีความสำคัญในการทำนายความเข้มข้นของทัลก์ ตัวแปรแต่ละตัวจะมีข้อมูลที่สามารถอธิบายถึงการเปลี่ยนแปลงของค่าการดูดกลืนแสงและความสัมพันธ์กับความเข้มข้นของทัลก์ โดยสมการที่ได้จากการสร้างโมเดล PLS จะอยู่ในรูปแบบเชิงเส้น แสดงในสมการที่ (1)

$$Y = B_1X_1 + B_2X_2 + \dots B_nX_n + c \quad (1)$$

โดยที่: Y คือ ความเข้มข้นของทัลก์ที่เราต้องการทำนาย
 $X_1, X_2, \dots, X_n$ คือ ตัวแปรใหม่ (Latent Variables) ที่ได้จากการวิเคราะห์การดูดกลืนแสงของข้อมูลสเปกตรัม
 $B_1, B_2, \dots, B_n$ คือ ค่าสัมประสิทธิ์ (coefficients) ที่บอกถึงความสำคัญของแต่ละ Latent Variable
 C คือ ค่าคงที่ (intercept) ซึ่งบอกตำแหน่งที่เส้นกราฟตัดกับแกน Y

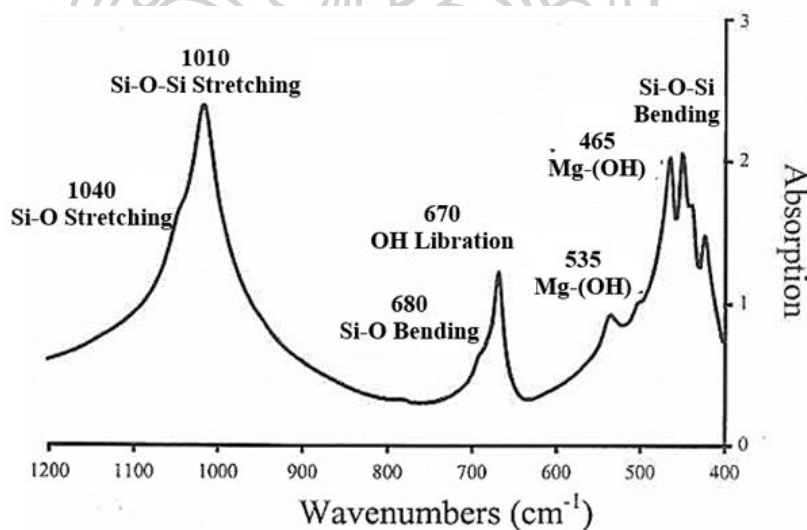
3) การทำนายความเข้มข้น: หลังจากที่เราได้สมการ PLS Regression จากการสร้างโมเดลแล้ว เราสามารถใช้สมการนี้ในการทำนายความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่างใหม่ (ตัวอย่างทัลก์บริสุทธิ์ที่เตรียมในความเข้มข้นต่างๆ) กระบวนการนี้เริ่มจากการวัดค่าการดูดกลืนแสงของตัวอย่างใหม่โดยใช้เครื่อง FT-IR เพื่อเก็บข้อมูลสเปกตรัมในช่วงความถี่ที่ต้องการ ข้อมูลที่ได้จากการดูดกลืนแสงนี้จะถูกนำมาคำนวณเป็นค่า Latent Variables (X) ค่าตัวแปรเหล่านี้จะถูกนำมาแทนลงในสมการ PLS ที่เราสร้างขึ้น ซึ่งจะใช้ในการคำนวณความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่างที่ต้องการ สุดท้าย ผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณนี้จะเป็นค่าความเข้มข้นที่คาดการณ์ไว้ ซึ่งสามารถนำไปเปรียบเทียบกับความเข้มข้นที่แท้จริงในตัวอย่างเพื่อตรวจสอบความแม่นยำของโมเดล

2.10 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.10.1 งานวิจัยของ F. Martin, P. Micoud, L. Delmotte, C. Marichal, R. Le Dred, P. de Parseval, A. Mari, J. P. Fortune, S. Salvi, D. Beziat, O. Grauby, และ J. Ferret เรื่อง “The structural formula of talc from the Trimouns Deposit, Pyrenees, France” [67]

ศึกษาเกี่ยวกับโครงสร้างทางเคมีของแร่ทัลก์จากประเทศฝรั่งเศส งานวิจัยนี้มีเป้าหมายเพื่อทำความเข้าใจโครงสร้างและองค์ประกอบของทัลก์ ซึ่งเป็นแร่ที่มีการใช้อย่างกว้างขวางในอุตสาหกรรมต่าง ๆ ในงานวิจัยมีการใช้ FT-IR ในย่าน Mid-IR ระบุลักษณะเฉพาะของการดูดกลืนในช่วง $400-4000\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งแสดงถึงการสั่นสะเทือนของพันธะเคมีในทัลก์ โดยเฉพาะในช่วงของการสั่นสะเทือนของพันธะเคมี เช่น Si-O (Silicon-Oxygen), Mg-O (Magnesium-Oxygen), และ O-H (Oxygen-Hydrogen) ซึ่งมีความสำคัญในการกำหนดลักษณะทางเคมีของทัลก์ แสดงในรูปที่ 17

ทั้งนี้ข้อจำกัดของงานมุ่งเน้นการศึกษาเฉพาะแร่ทัลก์ ในการศึกษาจึงมีความสำคัญในการวิเคราะห์ลักษณะเฉพาะของแร่ทัลก์ แต่ก็มีข้อจำกัดในการศึกษาแร่ทัลก์เท่านั้น ไม่มีการประยุกต์ใช้กับผลิตภัณฑ์ ซึ่งอาจจำกัดการประเมินความเหมาะสมในการใช้งานจริงในอุตสาหกรรม

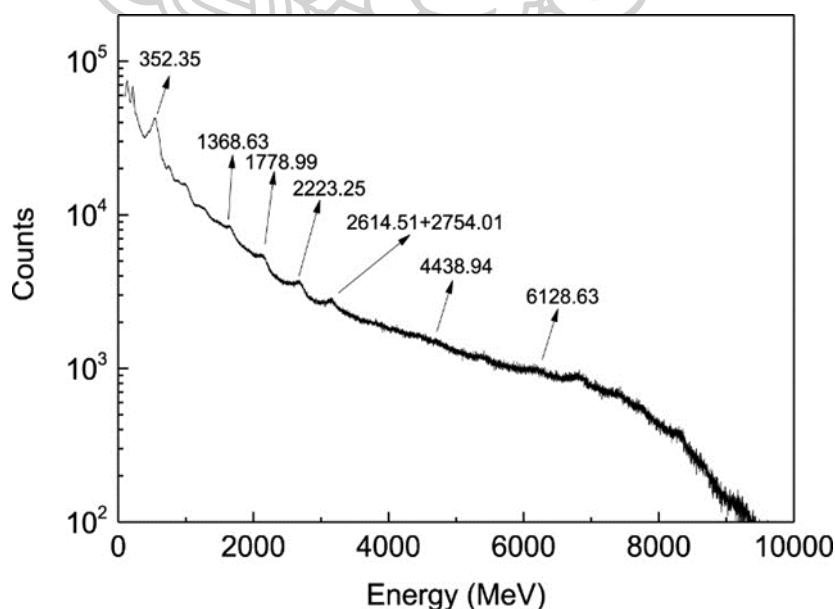


รูปที่ 17 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของทัลก์ในย่าน Mid-IR ของงานวิจัยที่อ้างอิง

2.10.2 งานวิจัยของ Xu Xu, Jingbin Lu, Yi Chang, Wanyue Tang, Yuanming Sun, Long Zhao, Jiayi Liu, Chengqian Li, Xiaoyi Li, Renzhou Zheng, Yu Wang เรื่อง “Measurement of talc in flour by the prompt-gamma ray neutron activation analysis method” [68]

งานวิจัยนี้ได้ศึกษาวิธีการวัดปริมาณทัลก์ในแป้งโดยใช้เทคนิค Prompt-Gamma Ray Neutron Activation (PGNAA) วิธีนี้ถูกเลือกเนื่องจากความไวและความแม่นยำในการตรวจจับธาตุต่างๆ ในสารผสมที่ซับซ้อน ตัวอย่างที่เตรียมโดยการบดให้ละเอียดจะถูกฉายด้วยนิวตรอนจากแหล่งนิวตรอน นิวตรอนจะมีปฏิกิริยากับนิวเคลียสของอะตอมในตัวอย่าง ทำให้เกิดความเป็นรังสี เมื่อรังสีที่เป็นรังสีแกมมาถูกปล่อยออกมาในระหว่างการเสื่อมสภาพของนิวเคลียสที่เป็นรังสี ตัวตรวจจับจะทำการวัดและวิเคราะห์รังสีแกมมา ความเข้มและพลังงานของรังสีแกมมาจะใช้ในการระบุปริมาณทัลก์และธาตุต่างๆในตัวอย่าง แสดงในรูปที่ 18 แสดงตัวอย่างของตัวอย่างทัลก์บริสุทธิ์

ทั้งนี้ข้อจำกัดของวิธี PGNAA คือมีการใช้พลังงานนิวตรอนสูง ซึ่งอาจทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงในโครงสร้างของตัวอย่างหรือเกิดการรบกวนจากการกระตุ้นนิวตรอนและต้องมีการจัดการด้านความปลอดภัยเพื่อป้องกันผลกระทบจากรังสีต่อผู้ปฏิบัติงาน ตัวอย่างที่ศึกษาเป็นการวิเคราะห์เพื่อหาปริมาณทัลก์อย่างเดียว โดยไม่มีการประยุกต์ผลลัพธ์ต่อในผลิตภัณฑ์แป้งผู้อื่น ๆ



รูปที่ 18 สเปกตรัม Neutron activation prompt γ ของตัวอย่างทัลก์บริสุทธิ์ของงานวิจัยที่อ้างอิง

2.10.3 งานวิจัยของ Teresa Pi-Puig, Dante Yosafat Animas-Torices และ Jesús Solé เรื่อง “Mineralogical and Geochemical Characterization of Talc from Two Mexican Ore Deposits (Oaxaca and Puebla) and Nine Talcs Marketed in Mexico: Evaluation of Its Cosmetic Use” [30]

ในงานวิจัยนี้มีการนำเสนอเกี่ยวกับการศึกษาลักษณะทางแร่วิทยาและเคมีของแร่ทัลก์จากแหล่ง Puebla และ Oaxaca ในประเทศเม็กซิโกจำนวน 2 ตัวอย่าง และตัวอย่างเครื่องสำอางที่มีส่วนผสมของทัลก์จากผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางหลากหลายระดับราคา ตั้งแต่ถูกสุดไปจนถึงแพงสุดจำนวน 9 ตัวอย่าง การศึกษาใช้เทคนิคหลากหลาย ดังนี้ 1) X-ray diffraction (XRD) เพื่อกำหนดองค์ประกอบและชนิดของแร่ธาตุในตัวอย่างทัลก์ 2) Infrared short wave (IR) เพื่อระบุประเภทของแร่ธาตุในตัวอย่างผ่านการวิเคราะห์การดูดกลืนแสงอินฟราเรด 3) Scanning electron microscopy (SEM) เพื่อศึกษารูปร่างและโครงสร้างทางกายภาพของทัลก์ และ 4) Thermogravimetric Analysis (TGA) เพื่อศึกษาเกี่ยวกับการเปลี่ยนแปลงทางเคมีที่เกิดขึ้นในทัลก์เมื่อถูกให้ความร้อน ซึ่งรวมถึงการถ่ายโอนน้ำและการเกิดสารประกอบใหม่

รวมถึงการตรวจสอบการปนเปื้อนของแร่ใยหิน ซึ่งไม่พบในตัวอย่างใด ๆ ในด้านองค์ประกอบทางเคมี ใช้เทคนิคเคมีวิเคราะห์ ICP-MS (Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry) เพื่อวัดปริมาณและประเภทของสิ่งปนเปื้อนในตัวอย่าง ผลการวิจัยพบว่าเฉพาะแป้งนำเข้าที่มีราคาสูงเท่านั้นที่มีความบริสุทธิ์ตรงตามข้อกำหนดมาตรฐานสำหรับการใช้ในผลิตภัณฑ์เครื่องสำอาง ในขณะที่แป้งที่มีราคาถูกและแป้งจากแหล่งในประเทศเม็กซิโกนั้นพบสิ่งปนเปื้อนที่ไม่ผ่านมาตรฐานความบริสุทธิ์

จากงานวิจัยเหล่านี้แม้ว่าการใช้เครื่องมือวิเคราะห์ที่หลากหลาย แต่ยังคงมีข้อจำกัดในการเตรียมตัวอย่างที่ซับซ้อนและใช้ นอกจากนี้ การวัดผลแต่ละขั้นตอน เช่น การวิเคราะห์สี โครงสร้างผลึก และการวิเคราะห์ขนาดอนุภาค ต้องใช้เครื่องมือที่มีความแม่นยำสูง ซึ่งต้องอาศัยผู้เชี่ยวชาญในการดำเนินการ การใช้เครื่องมือขั้นสูง เช่น XRD, SEM, ICP-MS และ TGA ยังต้องใช้เวลานานในการวัดและประมวลผลข้อมูล ทำให้ขั้นตอนนี้ค่อนข้างซับซ้อนและใช้ทรัพยากรในการประมวลผลที่ค่อนข้างมาก

จะเห็นได้ว่าวิธีข้างต้นที่ได้นำเสนอมานั้น มีข้อจำกัดอยู่มาก เช่น การใช้พลังงานสูงและขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างที่ซับซ้อน ด้วยเหตุนี้จึงได้นำ Near-Infrared Spectroscopy (NIR) เข้ามาใช้ในการตรวจวัดพัลค์เพื่อลดข้อจำกัดเหล่านี้ NIR สามารถวัดได้อย่างรวดเร็วและไม่ทำลายตัวอย่าง ต้องการพลังงานต่ำ และมีขั้นตอนการเตรียมที่ง่ายขึ้น [69] นอกจากนี้ยังสามารถวิเคราะห์ข้อมูลที่หลากหลาย ทำให้สามารถตรวจสอบคุณภาพและปริมาณของพัลค์ได้อย่างมีประสิทธิภาพ

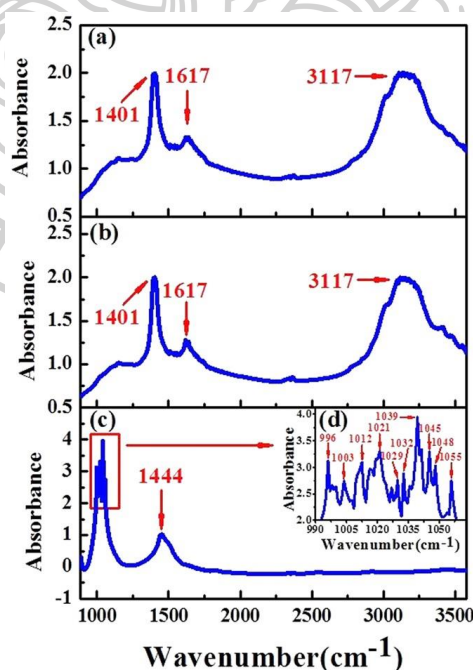
2.10.4 งานวิจัยของ Doe, J., Smith, A., และ Brown, R. เรื่อง “Near-Infrared Spectroscopy Study of OH Stretching Modes in Pyrophyllite and Talc” [70]

ศึกษาการยืดตัวของโหมดไฮดรอกซิล (Hydroxyl; OH) ในแร่ไพโรฟิลไลต์ (Pyrophyllite) และทัลค์ ผ่านการใช้เทคนิคการใช้เทคนิค NIR (Near-Infrared) และ MIR (Mid-Infrared) ซึ่งเป็นวิธีในการวิเคราะห์องค์ประกอบและโครงสร้างของแร่ ในงานวิจัยนี้ สเปกตรัม NIR (Near-Infrared Spectroscopy) มีตำแหน่งพีกที่สำคัญซึ่งเกี่ยวข้องกับการยืดตัวของพันธะไฮดรอกซิล (Hydroxyl bond; OH) และพันธะคาร์บอน-ไฮโดรเจน (Methyl bond; CH) โดยพีกที่พบ สำหรับแร่ที่มีการดูดซับ OH ของพัลค์และไพโรฟิลไลต์จะอยู่ในช่วงความยาวคลื่นประมาณ 1400-1900 นาโนเมตร ในขณะที่ในย่าน Mid-IR จะปรากฏที่ตำแหน่ง 450, 465, 538, 669 และ 690 cm^{-1} การระบุตำแหน่งเหล่านี้มีความสำคัญในการศึกษาคุณสมบัติทางกายภาพและเคมีของแร่ โดยเฉพาะในด้านการนำไปใช้ในอุตสาหกรรมต่างๆ เช่น เซรามิกส์ และเครื่องสำอาง

โดยรวมแล้ว การใช้ทั้งสองเทคนิค NIR และ Mid-IR ในการวิเคราะห์แร่มีข้อดีหลายประการ เทคนิค NIR มีความสามารถในการวัดที่รวดเร็วและไม่ทำลายตัวอย่าง ในขณะที่ Mid-IR ให้ข้อมูลที่ละเอียดและสามารถอธิบายถึงโครงสร้างและการมีอยู่ของพันธะเคมีได้อย่างชัดเจน การรวมข้อมูลจากทั้งสองเทคนิคนี้ช่วยให้การวิเคราะห์มีความน่าเชื่อถือมากขึ้น แต่การวิเคราะห์ในงานนี้เป็นการศึกษาเชิงคุณภาพเท่านั้น และไม่ได้มีการวิเคราะห์เชิงปริมาณหรืองานศึกษาโครงสร้างเคมีอื่น ๆ ของพัลค์ โดยงานวิจัยไม่ได้นำเสนอข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับการประยุกต์ใช้ในผลิตภัณฑ์

2.10.5 งานวิจัยของ Changhao Bao, Changhao Zeng, Jinming Liu, Dongjie Zhang เรื่อง “Rapid detection of talc content in flour based on near-infrared spectroscopy combined with feature wavelength selection” [16]

งานวิจัยนี้ พัฒนาวิธีการตรวจสอบปริมาณทัลกในแป้งโดยใช้เทคนิคสเปกโตรสโกปีอินฟราเรดใกล้ (NIR) โดยใช้ Fourier Transform Near-Infrared Spectrometer และการเลือกช่วงความยาวคลื่น (Feature wavelength selection; FWS) เพื่อระบุช่วงความยาวคลื่นที่สำคัญที่สุดในการวิเคราะห์ แสดงในรูปที่ 19 ซึ่งรวมถึงวิธีการ Backward interval partial-least-square (BiPLS), Competitive adaptive reweighted sampling (CARS), Hybrid genetic algorithm (HGA) และการผสมผสานระหว่าง BiPLS กับ CARS, BiPLS กับ HGA, และ CARS กับ HGA จากนั้นสร้างโมเดล partial-least-square regression เปรียบเทียบกับการสร้างโมเดลจากสเปกตรัมทั้งหมด พบว่าการเลือกช่วงความยาวคลื่นโดยใช้วิธีที่กล่าวมาทำให้โมเดลมีความแม่นยำและประสิทธิภาพดีขึ้น ผลการศึกษาแสดงให้เห็นว่า BiPLS ร่วมกับ HGA ให้ผลการสร้างโมเดลที่ดีที่สุด โดยมีค่า $R^2 = 0.929$, ค่า RMSE = 1.097 และค่า RPD = 3.795 ในชุดทดสอบ ส่วน BiPLS ร่วมกับ CARS ให้ผลในการลดมิติข้อมูลที่สุด โดยลดจำนวนความยาวคลื่นจาก 1845 เหลือ 72 และลดค่า RMSE ของชุดทดสอบลง 11.6% เมื่อเทียบกับโมเดลจากสเปกตรัมทั้งหมด ทั้งนี้ การตรวจจับปริมาณทัลกในระดับต่ำอาจเป็นเรื่องยากและอาจทำให้ผลลัพธ์ไม่แม่นยำ



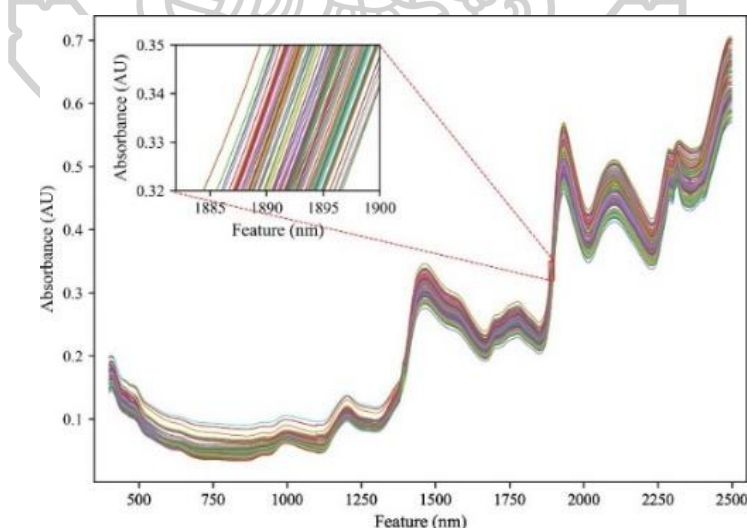
รูปที่ 19 สเปกตรัมเฉลี่ยของ (a) ตัวอย่างชาบริสุทธิ์ (b) ชาที่มีแป้งฝุ่นบริสุทธิ์ 1.50 มก./กรัม (c) แป้งฝุ่นบริสุทธิ์ และ (d) การขยายตัวของยอดเขาหลักของแป้งฝุ่นบริสุทธิ์ในช่วง $990 - 1055 \text{ cm}^{-1}$ ของ

งานวิจัยที่อ้างอิง

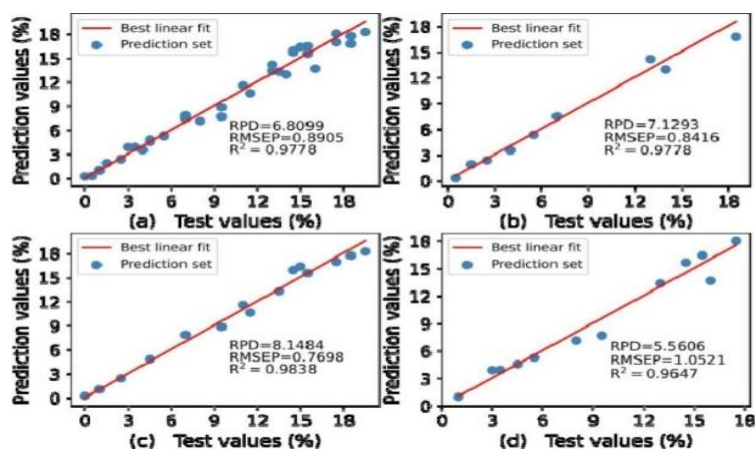
2.10.6 งานวิจัยของ Chengsi Du, Laijun Sun, Hongyi Bai, Zhide Zhao, Xiaoxu Li, Zhaodong Gai เรื่อง “Quantitative detection of talcum powder in wheat flour based on near-infrared spectroscopy and hybrid feature selection” [23]

งานวิจัยนี้พัฒนาวิธีการตรวจสอบปริมาณทัลก์ในแป้งสาลีโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีใกล้อินฟราเรด (NIR) และการเลือกฟีเจอร์แบบไฮบริด (hybrid feature selection) จากการศึกษาแป้งสาลี 123 ตัวอย่างจากแป้งสาลี 3 ประเภท (ประเภทละ 41 ตัวอย่าง) ซึ่งมีปริมาณทัลก์ตั้งแต่ 0% ถึง 20% และมีการปรับความเข้มข้นครั้งชั้นละ 0.5% แสดงในรูปที่ 20 พบว่าการใช้วิธี Gradient Boosted Decision Tree (GBDT) ร่วมกับการแปลง Standard Normal Variate (SNV) และการหาอนุพันธ์ครั้งแรก (1D) ให้ผลลัพธ์ที่ดีที่สุด โดยโมเดลทำนายปริมาณทัลก์ในแป้งสาลีได้อย่างแม่นยำ ด้วยค่าความสัมพันธ์ (R^2) 0.9242, ค่า RMSEP 1.3185 และค่า RPD 3.3443 แสดงในรูปที่ 21 ผลการศึกษาชี้ให้เห็นว่าวิธีนี้สามารถตรวจสอบทัลก์ในแป้งสาลีได้อย่างรวดเร็ว แม่นยำ และไม่ทำลายตัวอย่าง

ทั้งนี้ แม้วิธีนี้จะให้ผลลัพธ์ที่แม่นยำ แต่ยังคงมีข้อจำกัดในการเตรียมผิวหน้าของตัวอย่าง ให้เรียบสำหรับการวัดสเปกตรัม NIR หากผิวหน้าของตัวอย่างไม่เรียบแสงต้องผ่านจะไม่สม่ำเสมอ ทำให้แสง NIR ถูกดูดซับต่างกันในแต่ละจุด การเลือกฟีเจอร์แบบไฮบริดในการสร้างโมเดลขึ้นมาต้องใช้การปรับแต่งพารามิเตอร์หลายขั้นตอนและซับซ้อน หากเลือกฟีเจอร์ที่ไม่เหมาะสมอาจทำให้ข้อมูลที่สำคัญสูญหาย



รูปที่ 20 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของตัวอย่างแป้งสาลีผสมกับแป้งฝุ่น 143 ตัวอย่าง ของงานวิจัยที่อ้างอิง



รูปที่ 21 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าที่ทำนายกับค่าที่แท้จริงของชุดทำนาย (a) ตัวอย่างแป้งสาลีทั้งหมด (b) ตัวอย่างแป้งสาลีประเภท A (c) ตัวอย่างแป้งสาลีประเภท B (d) ตัวอย่างแป้งสาลีประเภท C ของงานวิจัยที่อ้างอิง

2.10.7 งานวิจัยของ James P. Larentzos, Jeffery A. Greathouse และ Randall T. Cygan เรื่อง “An ab Initio and Classical Molecular Dynamics Investigation of the Structural and Vibrational Properties of Talc and Pyrophyllite” [71]

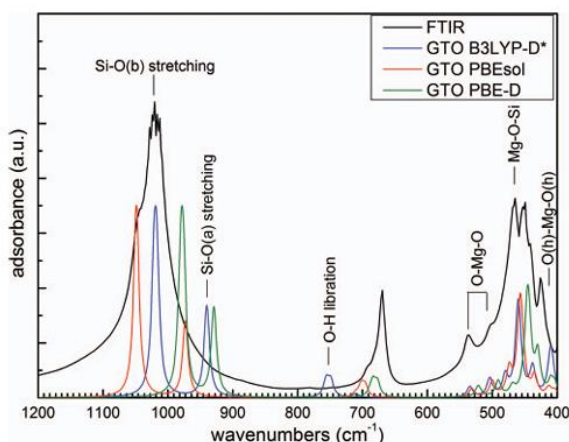
ในการศึกษาโครงสร้างและคุณสมบัติการสั่นสะเทือนของแร่ทัลก์และไพโรฟิลไลต์ การใช้การจำลองทางทฤษฎีแบบ *ab initio* และ Classical Molecular Dynamics ถือเป็นวิธีที่มีความสำคัญ อย่างไรก็ตาม การใช้ Density Functional Theory (DFT) ซึ่งช่วยให้สามารถคำนวณพลังงานที่เกี่ยวข้องกับการจัดเรียงอะตอมในวัสดุเหล่านี้ได้อย่างแม่นยำ การจำลองนี้ได้ให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับลักษณะการสั่นสะเทือนที่สำคัญในวัสดุ โดยเฉพาะการระบุพิกัดในสเปกตรัมการดูดกลืนที่เกี่ยวข้องกับการสั่นสะเทือนของอะตอมต่างๆ พิศาลการดูดกลืนที่สำคัญได้แก่ การสั่นสะเทือนของอะตอมแมกนีเซียมที่ตำแหน่ง 168 cm^{-1} ซึ่งแสดงถึงการจัดเรียงของอะตอมในโครงสร้างทัลก์ นอกจากนี้ยังมีการเคลื่อนไหวของพันธะไฮดรอกซิล (hydroxyl bond; OH) ที่ตำแหน่ง 177 cm^{-1} การเคลื่อนไหวนี้รวมถึง libration และ lattice breathing ที่ส่งผลต่อคุณสมบัติทางเคมีและฟิสิกส์ของทัลก์ การสั่นสะเทือนที่ตำแหน่ง 260 cm^{-1} แสดงถึงพันธะระหว่างแมกนีเซียมและไฮดรอกซิล ซึ่งเป็นองค์ประกอบสำคัญที่ช่วยในการศึกษาเกี่ยวกับคุณสมบัติและการเปลี่ยนแปลงของทัลก์ในสภาพแวดล้อมที่แตกต่างกัน

ดังนั้น การจำลอง DFT เป็นเครื่องมือที่มีความแม่นยำสูงและมีประสิทธิภาพในการให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับโครงสร้างและคุณสมบัติตัวอย่าง อย่างไรก็ตาม DFT อาจมีข้อจำกัดในด้านการจำลองลักษณะทางกายภาพที่ซับซ้อนหรือไม่สามารถจำลองสถานการณ์ที่หลากหลายได้อย่างครบถ้วน เช่น พฤติกรรมในสภาพแวดล้อมจริง

2.10.8 งานวิจัยของ Gianfranco Ulian; Sergio Tosoni; Giovanni Valdrè เรื่อง “Comparison between Gaussian-type orbitals and plane wave ab initio density functional theory modeling of layer silicates: Talc $[\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2]$ as model system” [72]

ศึกษาเกี่ยวกับพีคการดูดกลืนในสเปกตรัมอินฟราเรดกลางของแร่ทัลก์ โดยมีการวิเคราะห์การเคลื่อนไหวของอะตอมและการดูดกลืนของรังสีอินฟราเรดในช่วงที่สำคัญ ใช้ Gaussian-type orbitals และ plane wave ab initio density functional theory modeling สามารถให้ข้อมูลเชิงลึกเกี่ยวกับพฤติกรรมของทัลก์เมื่อถูกตรวจสอบด้วย Mid-IR spectroscopy โดยเฉพาะอย่างยิ่งในการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างโครงสร้างทางเคมีได้ โดยพบ O-Si-O bending ที่พีคประมาณ 425 cm^{-1} และ 449 cm^{-1} ซึ่งชี้ให้เห็นถึงการเคลื่อนที่ของพันธะระหว่างออกซิเจนและซิลิคอนในโครงสร้างของทัลก์ Mg-(O) stretching ที่พีคประมาณ 536 cm^{-1} แสดงถึงการเคลื่อนที่ของอะตอมแมกนีเซียมและออกซิเจนในโครงสร้าง O-H libration ที่พีคประมาณ 669 cm^{-1} ซึ่งเกี่ยวข้องกับการเคลื่อนที่ของพันธะไฮดรอกซิลในแร่ทัลก์ Si-O stretching ที่พีคประมาณ 1020 cm^{-1} และ 1060 cm^{-1} ชี้ให้เห็นถึงการเคลื่อนไหวที่สัมพันธ์กับพันธะซิลิคอน-ออกซิเจน แสดงในรูปที่ 22

แม้ว่าจะมีการจำลองทางทฤษฎีที่ชัดเจน แต่การนำข้อมูลเหล่านี้ไปใช้ในระดับอุตสาหกรรมยังต้องการข้อมูลเพิ่มเติมเกี่ยวกับประสิทธิภาพในสภาพการใช้งานจริง ข้อมูลที่ได้จากการจำลองอาจไม่สามารถทำนายได้อย่างแม่นยำเมื่อเปรียบเทียบกับสภาพแวดล้อมที่ซับซ้อนและหลากหลายในการผลิตจริง นอกจากนี้ ข้อมูลเชิงทฤษฎีหรือการจำลองอาจไม่สามารถแสดงถึงคุณสมบัติที่ซับซ้อนของทัลก์ได้ เช่น ความหลากหลายขององค์ประกอบแร่ธาตุหรือโครงสร้างทางกายภาพที่แตกต่างกัน ในตัวอย่างจริง ดังนั้น การเข้าใจและระบุข้อจำกัดเหล่านี้จึงเป็นสิ่งสำคัญในการพัฒนาความเข้าใจเกี่ยวกับทัลก์และส่งเสริมการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม



รูปที่ 22 ตัวอย่างสเปกตรัมทัลก์บริสุทธิ์ที่จำลองขึ้นโดยใช้ชุดฐาน Gaussian-type orbitals (GTO) ของงานวิจัยที่อ้างอิง

ในการวิจัยที่ผ่านมาเกี่ยวกับการตรวจวัดและทำนายปริมาณของทัลก์ในวัสดุต่าง ๆ เช่น แป้ง และเครื่องสำอาง มีการใช้เทคนิคที่หลากหลายเพื่อให้ได้ข้อมูลที่ถูกต้องและครอบคลุมมากที่สุด นักวิจัยใช้วิธีการต่าง ๆ ทั้งการวิเคราะห์ด้วยรังสีเอกซ์ (XRD), สเปกโตรสโกปีแบบใกล้อินฟราเรด (Near-IR) และการวิเคราะห์การกระตุ้นนิวตรอนด้วยรังสีแกมมา (Prompt-Gamma Ray Neutron Activation Analysis) เพื่อประเมินคุณสมบัติทางเคมีและโครงสร้างของทัลก์ การศึกษานี้ช่วยให้เข้าใจถึงข้อจำกัดและประโยชน์ของแต่ละเทคนิคที่นำมาใช้ ทั้งในแง่ของค่าใช้จ่าย ความซับซ้อนของอุปกรณ์ และการประยุกต์ใช้กับแหล่งทัลก์ที่แตกต่างกัน ตารางที่ 3 แสดงการเปรียบเทียบงานวิจัยเกี่ยวกับการตรวจวัดและทำนายปริมาณทัลก์ในหลากหลายรูปแบบ รวมถึงวัตถุประสงค์ของแต่ละงานวิจัย ข้อจำกัดของเทคนิคที่ใช้ และรายละเอียดของวิธีการที่นำมาใช้ในการวิเคราะห์

ตารางที่ 3 การเปรียบเทียบงานวิจัยที่ผ่านมาสำหรับการตรวจวัดทัลก์และทำนายปริมาณทัลก์

ผู้แต่ง/ปี	เทคนิคที่ใช้	วัตถุประสงค์	ข้อจำกัด
F. Martin, et al. (2019) [67]	XRD, Mid-IR Spectroscopy	วิเคราะห์สูตรโครงสร้าง ของทัลก์จากฝรั่งเศส	เน้นเฉพาะแหล่งแร่ เดียว ทำให้ผลอาจไม่ ครอบคลุมแหล่งอื่น
Xu Xu, et al. (2020) [68]	PGNAA	วัดปริมาณทัลก์ในแป้ง	อุปกรณ์ที่ใช้มีค่าใช้จ่าย สูงและต้องใช้ความไวที่ แม่นยำ
Teresa Pi-Puig, et al. (2021) [70]	XRD	ศึกษาลักษณะทางแร่และ เคมีของทัลก์จากแหล่งแร่ใน เม็กซิโกเพื่อประเมินการใช้ ในเครื่องสำอาง	การเตรียมตัวอย่างและ การวิเคราะห์มีความ ซับซ้อน
Doe, J., et al. (2020) [30]	Near-IR Spectroscopy	ศึกษาการยึดตัวของ OH ใน แร่ไฟโรไฟไลต์และทัลก์	ไม่เหมาะกับการ วิเคราะห์ทัลก์ที่มี ปริมาณน้อย สเปกตรัม มีการซ้อนทับ
Changhao Bao, et al. (2021) [16]	Near-IR Spectroscopy and Wavenumber Selection	ตรวจหาปริมาณทัลก์ในแป้ง	ความแม่นยำอาจลดลง เมื่อทัลก์อยู่ในปริมาณ น้อยหรือไม่เหมาะสมกับ แป้งที่ซับซ้อน

ผู้แต่ง/ปี	เทคนิคที่ใช้	วัตถุประสงค์	ข้อจำกัด
Chengsi Du, et al. (2022) [23]	Near-IR Spectroscopy	ตรวจวัดทัลกโนแปงสาลี	มีความเสี่ยงในเรื่องความถูกต้องของตรวจจับเนื่องจากการมีอยู่ของสารอื่นที่คล้ายกันไนแปง
James P. Larentzos, et al. (2016) [71]	Molecular Dynamics Simulation	วิเคราะห์โครงสร้างและคุณสมบัติการสั่นของทัลก	ใช้เวลานานและทรัพยากรสูง เป็นการทดลองทางทฤษฎีเท่านั้น
Gianfranco Ulian, et al. (2018) [72]	DFT	เปรียบเทียบ Gaussian-type orbitals และ plane wave DFT ในการจำลองตรวจวัดทัลก	ใช้เวลานานและทรัพยากรสูง เป็นการทดลองทางทฤษฎีเท่านั้น

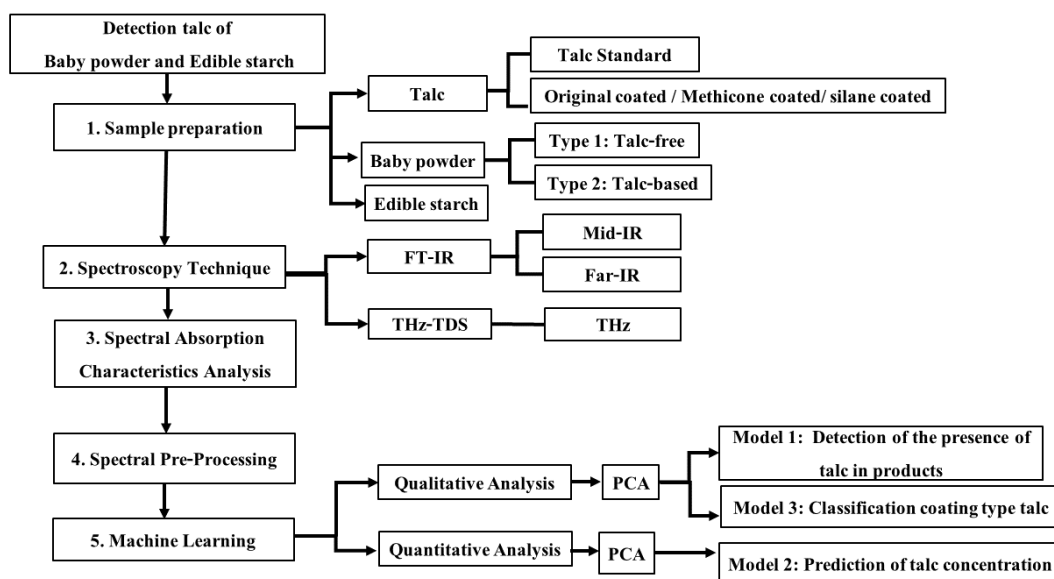


บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

จากที่มาและความสำคัญของเทคนิคสเปกโตรสโกปีโดยการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายที่ได้กล่าวมาในบทที่ 1 และศึกษาทฤษฎีที่เกี่ยวข้องในบทที่ 2 ในวิทยานิพนธ์นี้ ผู้วิจัยได้เลือกใช้เทคนิคสเปกโตรสโกปีแบบไม่ทำลายเพื่อใช้ตรวจวัดการมีอยู่ของทัลกในแป้งสำหรับเด็กและแป้งที่ใช้บริโภค โดยเลือกใช้เครื่องมือและย่านความถี่ที่สามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้ ได้แก่ 1. เครื่องฟูเรียร์ทรานฟอร์มอินฟราเรดสเปกโตรสโกปี (Fourier Transform Infrared spectroscopy; FT-IR) เลือกวัดในย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region; MIR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; FIR) 2. เครื่องเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโตรสโกปี (Terahertz Time Domain Spectroscopy; THz-TDS) จากงานวิจัยที่ผ่านมา เทคนิค NIR มีข้อจำกัดในด้านความไวในการตรวจสอบสาร เนื่องจากสเปกตรัม NIR มักเกิดจากการดูดซับพลังงานในช่วงที่เกี่ยวข้องกับการสั่นสะเทือนของพันธะ OH (Oxygen-Hydrogen) และ CH (Carbon-Hydrogen) ซึ่งมีในสารตัวอย่าง การมีพันธะหลายชนิดในสารเดียวกันทำให้เกิดการดูดซับในช่วงความยาวคลื่นเดียวกัน ส่งผลให้เกิดการซ้อนทับของพีค การซ้อนทับกันของพีคในสเปกตรัมที่ได้ทำให้การระบุตำแหน่งของพีคเป็นเรื่องยาก ส่งผลให้การวัดเชิงปริมาณมีความซับซ้อนมากขึ้น [69] การเลือกใช้ FT-IR และ THz-TDS จึงช่วยเพิ่มประสิทธิภาพในการระบุและวิเคราะห์การมีอยู่ของทัลก สามารถเป็นทางเลือกในการพัฒนาและควบคุมคุณภาพของผลิตภัณฑ์ในอุตสาหกรรมได้อย่างมีประสิทธิภาพในเวลาที่สั้นกว่าและลดความซับซ้อนของขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างลง

ในบทนี้จะกล่าวถึงลำดับขั้นตอนและวิธีการดำเนินงานในการทำงานวิจัยนี้ เป็นการอธิบายถึงการเตรียมสารตัวอย่าง การออกแบบการทดลองและขั้นตอนการทำงานของเครื่องมือต่าง ๆ โดยในงานวิจัยนี้ได้แบ่งขั้นตอนและวิธีการดำเนินงานออกเป็น 5 ขั้นตอน ประกอบด้วย ขั้นตอนที่ 1. การเตรียมสารตัวอย่างที่ต้องการตรวจสอบ ขั้นตอนที่ 2. การใช้เทคนิคสเปกโตรสโกปีโดยการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลาย ขั้นตอนที่ 3. การประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมล่วงหน้า (Pre-processing) ขั้นตอนที่ 4. การวิเคราะห์คุณลักษณะการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis) และขั้นตอนที่ 5. วิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) โดยจะอธิบายลำดับขั้นตอน Block diagram แสดงในรูปที่ 23



รูปที่ 23 ภาพรวมทั้งหมดของงานวิจัย

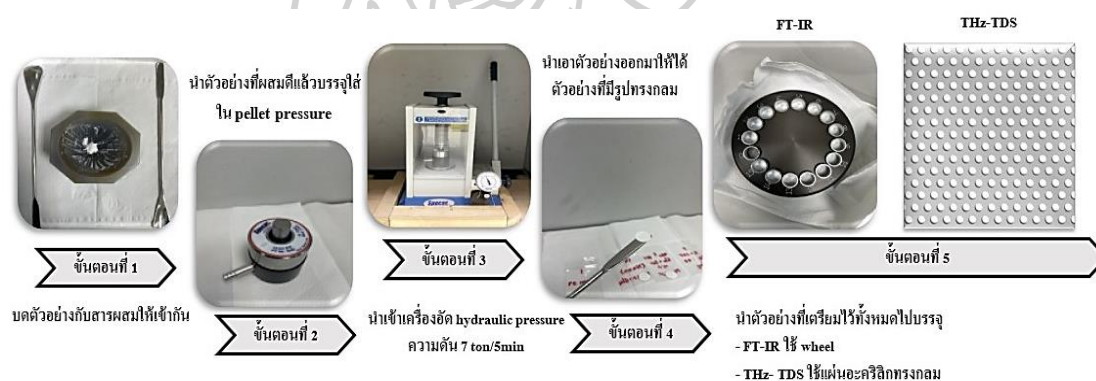
3.1 การเตรียมสารตัวอย่าง

3.1.1 สารเคมีที่ใช้ในงานวิจัย

- 1) โพลีเอทิลีน (Polyethylene; PE) จัดซื้อจาก Sigma-Aldrich, MO, USA ความบริสุทธิ์ > 98% สำหรับใช้เป็นสารผสมในย่านอินฟราเรดไกล
- 2) โพแทสเซียมโบรไมด์ (Potassium Bromide; KBr) จัดซื้อจาก Sigma-Aldrich, MO, USA ความบริสุทธิ์ > 98% สำหรับใช้เป็นสารผสมในย่านอินฟราเรดใกล้
- 3) ทัลก์บริสุทธิ์ไม่ผ่านการเคลือบ (Original) จัดซื้อจาก S.M. Chemical supplies, Toronto Research Chemicals (TRC), Canada ความบริสุทธิ์ > 95% สำหรับใช้เป็นสารอ้างอิงมาตรฐาน
- 4) ผลิตภัณฑ์จากสารเติมแต่งเครื่องสำอาง จากบริษัท จันทร์เจ้า ลองจิวตี้
- 5) ผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภคเชิงพาณิชย์จากห้างสรรพสินค้า
- 6) ทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบไซเลน (Silane Coated) และการเคลือบเมทิลโคน (Methicone Coated) อนุภาคขนาด 5 ไมครอน จากบริษัท จันทร์เจ้า ลองจิวตี้ ผู้จำหน่ายผลิตภัณฑ์เครื่องสำอางและผลิตภัณฑ์ดูแลสุขภาพหลายชนิด

3.1.2 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่าง

สารตัวอย่างทั้งหมดที่ใช้เป็นเกรดเชิงวิเคราะห์ (ความบริสุทธิ์ >96%) ส่วนโพลีเอทิลีน (PE) และโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr) (Sigma-Aldrich, MO, USA) ถูกใช้เป็นสารยึดเกาะสำหรับการใช้ในการผสมสารตัวอย่างทึบ ตัวอย่างทั้งหมดจะถูกจัดเตรียมในรูปแบบผงโดยเริ่มจากการนำสารตัวอย่างทึบผสมกับสารยึดเกาะในอัตราส่วนที่ต่างกันตามย่านความถี่ กล่าวคือ ในย่านอินฟราเรดกลาง จะผสมตัวอย่างกับ KBr ที่อัตราส่วน 1:99 (w/w) ตวงสารผสมน้ำหนัก 100 มิลลิกรัม ส่วนในย่านอินฟราเรดไกลจะผสมตัวอย่างกับ PE ที่อัตราส่วนมวล 15:85 (w/w) ตวงสารผสมน้ำหนัก 30 มิลลิกรัม และใน THz-TDS ผสมตัวอย่างกับ PE ที่อัตราส่วนมวล 15:85 (w/w) ตวงสารผสมน้ำหนัก 100 มิลลิกรัม จากนั้นนำไปบรรจุใส่ในเครื่องอัดเม็ดกลม (Pellet Press) ที่มีเส้นผ่านศูนย์กลาง 13 มิลลิเมตร จากนั้นนำไปใส่เครื่องอัดแรงดันแบบไฮดรอลิก (Hydraulic Pressure) ภายใต้ความดัน 7 ตันเป็นเวลา 5 นาที สารตัวอย่างจึงจะอยู่ในรูปแบบเม็ด ซึ่งสามารถนำตัวอย่างเม็ดไปเก็บไว้ในถุงพลาสติก (PE) เพื่อเตรียมบรรจุใส่ล้อบรรจุตัวอย่าง (Sample Wheel) สำหรับเครื่อง FT-IR และบรรจุใส่แผ่นอะคริลิกที่ตัดในลักษณะกลมสำหรับเครื่อง THz-TDS เพื่อนำไปวัดในลำดับถัดไป โดยแต่ละเม็ดจะใช้เวลาในการวัดประมาณ 4-5 นาทีต่อหนึ่งสเปกตรัม แสดงในรูปที่ 24



รูปที่ 24 ขั้นตอนการเตรียมตัวอย่างสำหรับเครื่อง FT-IR และ THz-TDS

ในการศึกษานี้ มีการเตรียมตัวอย่างโดยแบ่งออกเป็น 4 ส่วน ได้แก่ 1. การเตรียมตัวอย่างทัลก์มาตรฐาน (Talc Standard) ซึ่งตัวอย่างทัลก์มาตรฐานจะถูกเก็บและวิเคราะห์เพื่อศึกษาลักษณะเฉพาะของทัลก์ที่ใช้เป็นเกณฑ์เปรียบเทียบในการวิเคราะห์ขั้นตอนต่าง ๆ 2. การเตรียมตัวอย่างผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กและแป้งฝุ่นสำหรับบริโภค โดยตัวอย่างเหล่านี้จะถูกจัดเตรียมเพื่อวิเคราะห์การมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์ 3. การเตรียมตัวอย่างทัลก์มาตรฐานที่มีความเข้มข้นต่างกันเพื่อนำมาใช้ในการวิเคราะห์เชิงปริมาณ เพื่อพัฒนาการทำนายปริมาณความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่าง และ 4. การเตรียมตัวอย่างทัลก์อุตสาหกรรมที่ผ่านการเคลือบที่ต่างกัน ซึ่งจะถูกเก็บรวบรวมเพื่อจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ให้เหมาะสมสำหรับการใช้งานในผลิตภัณฑ์ต่าง ๆ

1. การเตรียมตัวอย่างทัลก์มาตรฐาน (Talc Standard): การเตรียมตัวอย่างทัลก์มาตรฐานจำนวน 10 เม็ดทำการวัดสเปกตรัมเม็ดละ 2 รอบ รวมทั้งหมด 20 สเปกตรัม โดยเน้นไปที่การศึกษาสเปกตรัมและการตอบสนองของทัลก์ต่อแสงในย่านอินฟราเรดกลางจนถึงเทราเฮิร์ตซ์ ข้อมูลนี้จะช่วยให้ผู้วิจัยสามารถระบุตำแหน่งพีคหลักที่สำคัญซึ่งเกี่ยวข้องกับทัลก์ได้ ซึ่งจะช่วยยืนยันว่าตำแหน่งพีคในสเปกตรัมตรงกับข้อมูลในงานวิจัยที่เคยมีมา

2. การเตรียมตัวอย่างผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กและแป้งฝุ่นสำหรับบริโภคเพื่อใช้วิเคราะห์ในเชิงคุณภาพ: การเก็บตัวอย่างสำหรับโมเดลที่ 1 สำหรับตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กและแป้งสำหรับบริโภค โดยเราจะทำการแบ่งข้อมูลที่ใช้ในการฝึกสอน (Training Data) ออกเป็นสองชุด ได้แก่

1) ชุดข้อมูลที่มีทัลก์ (Talc-Based) ใช้สเปกตรัมจากการเคลือบทั้งหมด 3 ประเภท ได้แก่ แบบไม่เคลือบ แบบเคลือบด้วยไฮเลน และแบบเคลือบเมทิลโคน (ประเภทละ 50 สเปกตรัม) ซึ่งมาจากชุดข้อมูลของโมเดลก่อนหน้า รวมทั้งสิ้น 150 สเปกตรัม

2) ชุดข้อมูลที่ไม่มีทัลก์ (Talc-Free) ประกอบด้วยสเปกตรัมที่เก็บได้จากผลิตภัณฑ์จากสารเติมแต่งเครื่องสำอาง 4 ชนิด (ชนิดละ 30 สเปกตรัม) และผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค 4 ชนิด (ชนิดละ 5 สเปกตรัม) รวมทั้งสิ้น 140 สเปกตรัม ดังนั้น ชุดข้อมูลสเปกตรัมที่ใช้ในการฝึกสอนโมเดลที่สองเพื่อใช้ในการตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์จะมีทั้งหมด 290 สเปกตรัม แสดงในตารางที่ 4

ตารางที่ 4 รายชื่อผลิตภัณฑ์เพื่อใช้เป็นข้อมูลการฝึกสอนโมเดลในการตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์

ชุดข้อมูล ฝึกสอน	ประเภท ผลิตภัณฑ์	ชื่อสาร	จำนวน สเปกตรัมต่อ ชนิด	รวม
มีทัลก์ (Talc-Based)	ทัลก์	Magnesium Silicate	-	150
ไม่มีทัลก์ (Talc-Free)	สารเติมแต่ง เครื่องสำอาง	Lithium Magnesium	อย่างละ 30 สเปกตรัม	120
		Magnesium Aluminum		
		Magnesium Stearate		
		Rice sorb		
	แป้งสำหรับ บริโภค	แป้งข้าวเหนียว	อย่างละ 5 สเปกตรัม	20
		แป้งมะพร้าว		
		แป้งถั่วเขียว		
		แป้งมัน		
รวม	290 สเปกตรัม			

นอกจากนี้ งานวิจัยยังได้มีการเก็บตัวอย่างจากผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่หาซื้อได้ตามห้างสรรพสินค้าชั้นนำ โดยแบ่งเป็นผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก โดยมีทั้งสูตรที่มีส่วนผสมของทัลก์ (จำนวน 5 แบรินด์) และสูตรไม่มีทัลก์ (จำนวน 4 แบรินด์) แต่ละแบรนด์ถูกวัดจำนวน 5 สเปกตรัม รวมทั้งหมด 45 สเปกตรัม และผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค 3 ชนิดซึ่งเป็นแป้งที่มีการใช้อย่างแพร่หลายมากที่สุด ได้แก่ แป้งสาลี (Wheat flour) แป้งข้าวเจ้า (Rice flour) และแป้งข้าวโพด (Corn flour) จำนวนชนิดละ 5 สเปกตรัม รวม 15 สเปกตรัมเพื่อใช้เป็นข้อมูลชุดทดสอบ (Testing Data) ดังนั้นชุดข้อมูลสำหรับการทดสอบโมเดลเพื่อตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์มีทั้งหมด 60 สเปกตรัม แสดงในตารางที่ 5

ตารางที่ 5 รายชื่อผลิตภัณฑ์เพื่อใช้เป็นข้อมูลการทดสอบโมเดลในการตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์

ชุดข้อมูลทดสอบ	ประเภทผลิตภัณฑ์	แบรนด์	จำนวนสเปกตรัมต่อชนิด	รวม
ผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก	Talc-Based	แคร์	อย่างละ 5 สเปกตรัม	25
		ศรีจันทร์		
		จอห์นสัน (คลาสสิก)		
		โคโคโมะ		
		เบบี้มายด์		
	Talc-Free	เพอร์รีน	อย่างละ 5 สเปกตรัม	20
		ไรซ์แคร์ (เอ็กซ์ตรา)		
		ไรซ์แคร์ (ฟลอรัล)		
		จอห์นสัน (ออร์แกนิก)		
ผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค	ไม่ระบุบนฉลาก	แป้งสาลี	อย่างละ 5 สเปกตรัม	15
		แป้งข้าวเจ้า		
		แป้งข้าวโพด		
รวม		60 สเปกตรัม		

3. การเตรียมตัวอย่างทัลก์มาตรฐานในระดับความเข้มข้นที่หลากหลาย เพื่อใช้วิเคราะห์ในเชิงปริมาณ: การเก็บตัวอย่างสำหรับแบบจำลองที่ 2 กระบวนการเตรียมตัวอย่างจากเดิมที่ใช้ทัลก์มาตรฐานกับโพลีเอทิลีน (PE) ในอัตราส่วน 4.5 : 25.5 มิลลิกรัม (15:85 w/w) โดยใช้ปริมาณทั้งหมด 30 มิลลิกรัม เมื่อทำการวิเคราะห์เชิงปริมาณเพื่อทำนายความเข้มข้นของทัลก์ ได้ทำการผสมทัลก์ในปริมาณที่แตกต่างกัน ตั้งแต่ 0–4.5 มิลลิกรัม (15% w/w) ทั้งหมดประกอบด้วย 19 ตัวอย่าง ที่มีปริมาณทัลก์ต่างกัน แสดงในตารางที่ 6 โดยในแต่ละตัวอย่างจะวัดสเปกตรัมทั้งหมด 10 สเปกตรัม รวมทั้งหมด 190 สเปกตรัม

ตารางที่ 6 สัดส่วนการเตรียมตัวอย่างของทัลก์มาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณ

ความเข้มข้น (%)	สัดส่วนทัลก์มาตรฐาน (mg)	สัดส่วนโพลีเอทิลีน (mg)
0	0	30
0.5	0.0225	29.9775
1	0.045	29.955
3	0.135	29.865
5	0.225	29.775
7	0.135	29.865
9	0.405	29.595
11	0.495	29.505
13	0.585	29.415

ตารางที่ 6(ต่อ) สัดส่วนการเตรียมตัวอย่างของหลักมาตรฐานสำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณ

ความเข้มข้น (%)	สัดส่วนหลักมาตรฐาน (mg)	สัดส่วนโพลีเอทิลีน (mg)
15	0.675	29.325
20	0.9	29.1
30	1.35	28.65
40	1.8	28.2
50	2.25	27.75
60	2.7	27.3
70	3.15	26.85
80	3.6	26.4
90	4.05	25.95
100	4.5	25.5

4. การเตรียมตัวอย่างทัลก์ที่ผ่านการเคลือบที่ต่างกันในอุตสาหกรรมเครื่องสำอาง: การเก็บตัวอย่างสำหรับแบบจำลองที่ 3 เพื่อจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ ดำเนินการเก็บตัวอย่างจากทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบผิวที่แตกต่างกัน 3 แบบ ได้แก่ แบบไม่เคลือบ (Original) หรือทัลก์มาตรฐาน แบบเคลือบด้วยไซเลน (Silane Coated) และแบบเคลือบเมทริกอน (Methicone Coated) ประเภทละ 50 สเปกตรัม รวมทั้งสิ้น 150 สเปกตรัม แสดงในตารางที่ 7

ตารางที่ 7 การเตรียมตัวอย่างทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบแตกต่างกัน 3 แบบ

กระบวนการเคลือบ	สารเคลือบ	คุณสมบัติ	การใช้งาน
แบบไม่เคลือบ	ไม่เคลือบ (Original)	คงสภาพทาง ธรรมชาติ	ใช้ในอุตสาหกรรมที่ ต้องการทัลก์บริสุทธิ์ เช่น การผลิตกระดาษ
กระบวนการเคลือบ 1	ไซเลน (Silane Coated)	ความคงทนต่อ ความชื้นและการ ยัดเกาะ	ใช้ในสารประกอบ พลาสติกและยาง
กระบวนการเคลือบ 2	เมทริกอน (Methicone Coated)	เพิ่มความทนทาน ต่อน้ำ ปรับปรุง ผิวสัมผัสและความ ลื่นไหล	ใช้ในเครื่องสำอางและ ผลิตภัณฑ์ดูแลผิว

3.2 การใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลาย

3.2.1 เครื่องมือที่ใช้ในการวิจัย

1) เครื่องมือวัดสัญญาณสเปกตรัมแบบ Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) VERTEX 80v, Bruker, MA, USA โดยทำการเก็บข้อมูล 2 ย่าน ได้แก่ คลื่นย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region; Mid-IR) และคลื่นย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; Far-IR)

2) เครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโกปี (THz-TDS) TOPTICA Photonics AG, Munich, Germany ซึ่งอยู่ในการดูแลของทีมนักวิจัยเทราเฮิร์ตซ์ ตั้งอยู่ที่ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (NECTEC)

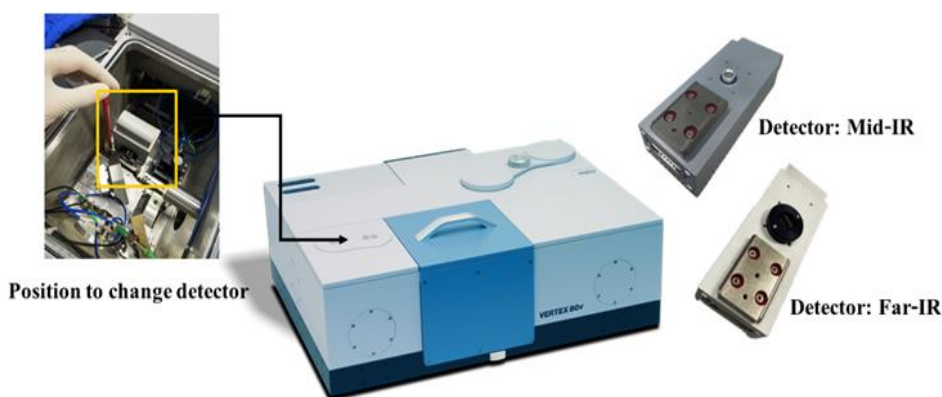
3.2.2 ขั้นตอนการตั้งค่าเครื่อง Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR)

ในการศึกษาครั้งนี้เราใช้ Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) (VERTEX 80v, Bruker, MA, USA) ซึ่งเป็นหนึ่งในเครื่องมือวัดที่ใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีโดยอาศัยการใช้รังสีแสงอินฟราเรด (infrared light) มีความสามารถในการจำแนกสูง และสามารถวิเคราะห์สารตัวอย่างที่ต้องการทดลองในปริมาณน้อยได้ การทดลองครั้งนี้ทำการเก็บข้อมูลในคลื่นย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region; Mid-IR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; Far-IR) ที่นำมาใช้เพื่อตรวจสอบแร่ทัลก์ที่มีอยู่ในแป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภค โดยทำการเปรียบเทียบสเปกตรัมของสารมาตรฐาน (ทัลก์ทั้ง 3 ชนิด) กับสารตัวอย่างที่ต้องการทดสอบ (แป้งเด็กและแป้งสำหรับบริโภคที่ขายตามท้องตลาด) ที่วัดในตัวกลางเดียวกัน แสดงให้เห็นได้ว่ามีจุดยอด (peaks) ที่แสดงถึงการดูดกลืนแสงในช่วงความถี่ต่างๆ ที่มีความสูงต่ำแตกต่างกันออกไป กล่าวคือสารตัวอย่างที่ใช้ทดสอบที่แตกต่างกันควรมีสเปกตรัมที่แตกต่างกัน (fingerprint) โดยในแต่ละย่านความถี่จะแสดงถึงกายภาพทางเคมีของสารที่แตกต่างกันออกไป ดังนั้นเพื่อประสิทธิภาพที่ดีที่สุดเราจึงมีความจำเป็นต้องทดลองหลายย่านความถี่ ดังนี้

1) ย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region; Mid-IR) : การตรวจสอบแร่ทัลก์ที่มีอยู่ในแป้งทาตัวดำเนินการด้วย Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) VERTEX 80v ย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) โดยใช้ช่วงสเปกตรัม $400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ แสงอินฟราเรดในช่วงนี้มีความถี่กลางตรงกันกับการสั่นของพันธะโควาเลนต์ในโมเลกุลของสารตัวอย่างที่ต้องการทดสอบ การใช้คลื่นอินฟราเรดกลางจึงให้สเปกตรัมที่มีความจำเพาะตามโครงสร้างเคมีของสารตัวอย่างที่ต้องการวัดตลอดจนการเคลื่อนไหวภายในโมเลกุลได้ (Inter molecular vibration) สำหรับย่านวัดนี้ วิธีการให้นำเอาเม็ดตัวอย่างที่ได้ทำการเตรียมไว้ใส่ในวงล้อโดยตั้งค่าแหล่งกำเนิดแสง (Source) เป็น Global, ตัวแยกลำแสง (Beam splitter) เป็น KBr (T301) และตัวตรวจวัด (Detector) KBr/DLaTGS ตั้งค่า

resolution 1 cm^{-1} , Aperture setting 4 mm, Sample scan time 1 scan: Minutes. จากนั้นทำการวัด ผลลัพธ์ที่ได้ออกมาในรูปแบบสเปกตรัม

2) ย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; Far-IR) : หากต้องการเปลี่ยนย่านการวัด ทำได้โดยการเปลี่ยนตัวตรวจจับ (detector) เป็นย่านอินฟราเรดไกลในเครื่อง FT-IR (Fourier Transform Infrared Spectrometer) เพื่อให้สามารถวัดรังสีในช่วงคลื่นยาวกว่าได้) แสดงในรูปแบบที่ 25 โดยใช้ช่วงสเปกตรัม $30 - 300\text{ cm}^{-1}$ (ช่วงคลื่นของอินฟราเรดกลางจะยาวกว่าอินฟราเรดไกล) ซึ่งสามารถให้ข้อมูลเกี่ยวกับการเคลื่อนไหวของโมเลกุลในระดับคลื่นยาวกว่าได้ โครงสร้างที่มีความซับซ้อนกว่า ตลอดจนการเคลื่อนไหวของโมเลกุลระหว่างโมเลกุล (Intra molecular vibration) สำหรับเครื่องฟูเรียร์ทรานฟอร์มอินฟราเรดสเปกโทรสโคปี ย่านความถี่ไกล วิธีการใช้เช่นเดียวกับย่านความถี่กลางเพียงแต่เปลี่ยนแหล่งกำเนิดแสง (Source) เป็น Hg-Arc ตัวแยกลำแสง (Beam splitter) เป็น Multilayer (T222) และตัวตรวจวัด (Detector) เป็น DLaTGS (D201) ตั้งค่า resolution 0.66713 cm^{-1} , Aperture setting 8 mm, Sample scan time 5 scan: Minutes จากนั้นทำการวัดผลลัพธ์ที่ได้ในรูปแบบสเปกตรัม

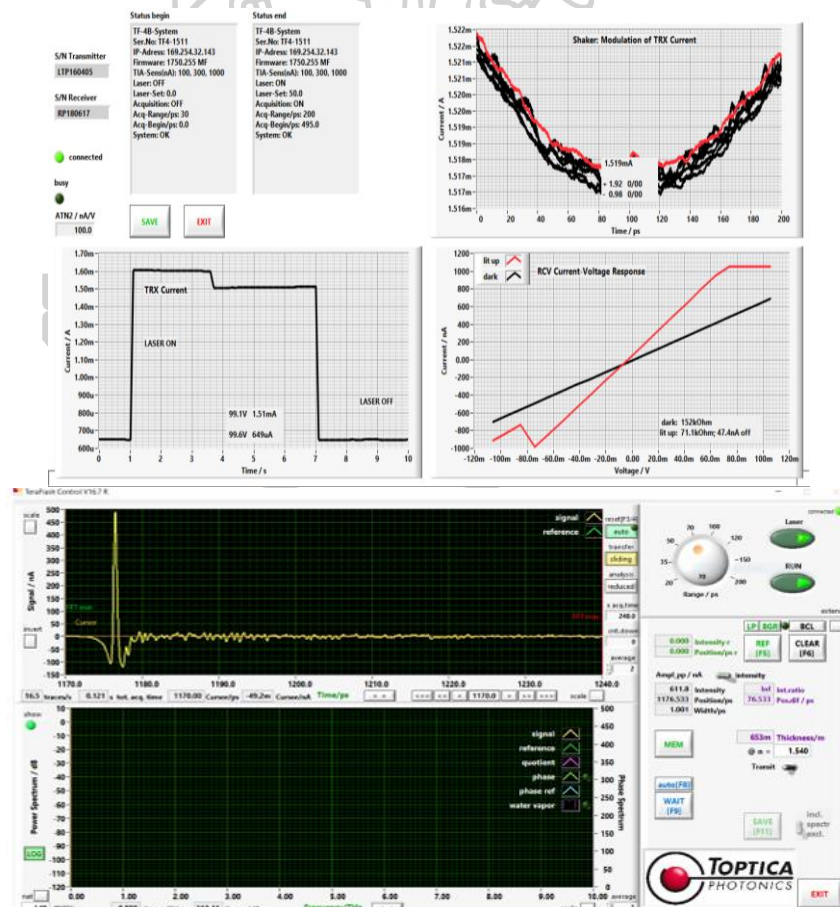


รูปที่ 25 การเปลี่ยนตัวตรวจวัด (Detector) สำหรับเครื่อง FT-IR

3.2.3 ขั้นตอนการตั้งค่าเครื่องเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี (THz-TDS)

การตรวจวิเคราะห์ด้วยเทคนิคเทราเฮิรตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี (THz-TDS) เป็นเทคนิคที่มีความสำคัญในการศึกษาคุณสมบัติของวัสดุต่าง ๆ ในย่านความถี่เทราเฮิรตซ์ ซึ่งอยู่ระหว่างย่านความถี่ของไมโครเวฟและอินฟราเรด วิธีการนี้มีความสามารถในการให้ข้อมูลเกี่ยวกับการสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Absorption) ของสารตัวอย่าง โดยนำสารตัวอย่างที่เตรียมไว้ในลักษณะเม็ดกลม ในหัวข้อที่ 3.1 เม็ดตัวอย่างที่จะถูกบรรจุใส่ในท่อใส่แผ่นอะคริลิกที่ถูกตัดเป็นทรงกลม เพื่อให้สามารถใส่เข้าไปในเครื่อง THz-TDS ได้พอดี โดยภายในเครื่องต้องควบคุมระดับความชื้นสัมพัทธ์ให้ต่ำกว่า 7% RH เนื่องจากความชื้นสามารถส่งผลกระทบต่อผลการวัดสัญญาณในย่านความถี่เทราเฮิรตซ์ (เพื่อลด

ความชื้นภายในเครื่อง สามารถใช้ก๊าซไนโตรเจนเพื่อไล่ความชื้นออกจากเครื่องได้ โดยการเปิดก๊าซไนโตรเจนให้ไหลผ่านภายในเครื่องก่อนการทดลอง) ก่อนทำการทดลองทุกครั้ง ต้องตรวจสอบว่าอุปกรณ์ทุกส่วนภายในเครื่องเชื่อมต่อกันอย่างถูกต้อง ก่อนทำการวัดมีการเช็คสัญญาณเพื่อลดข้อผิดพลาดในการวัด โดยสัญญาณที่ได้จากการวัดต้องมีความเข้มไม่ต่ำกว่า 250 nA หากสัญญาณต่ำกว่าค่านี้ต้องปรับปรุงการตั้งค่าเครื่องหรือรีเซ็ตเครื่องใหม่อีกครั้ง แสดงในรูปที่ 26 เมื่อเตรียมตัวอย่างและควบคุมสภาพแวดล้อมภายในเครื่องเรียบร้อยแล้ว จะเริ่มดำเนินการทดลองด้วยการวัดสัญญาณเทราเฮิรตซ์ที่ผ่านตัวอย่าง ซึ่งข้อมูลที่ได้จากการวัดจะถูกนำไปวิเคราะห์เพื่อศึกษาคุณสมบัติต่าง ๆ ของตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์ต่อไป สเปกตรัมที่ได้จะอยู่ในรูปแบบของสัญญาณเวลาที่เรียกว่า Time-Domain Signal เพื่อให้ได้สเปกตรัมการดูดกลืนแสง ต้องแปลงสัญญาณดังกล่าวเป็นสัญญาณในโดเมนความถี่ (Frequency-Domain) โดยใช้การแปลงฟูเรียร์ (Fourier Transform) การแปลงนี้จะเปลี่ยนสัญญาณเวลาให้เป็นข้อมูลสเปกตรัมที่แสดงความเข้มของสัญญาณเทราเฮิรตซ์ที่สามารถใช้ในการวิเคราะห์การดูดกลืนแสงของสารตัวอย่างได้ เพื่อใช้ในการระบุชนิดของสารและศึกษาคุณสมบัติทางเคมีของสารนั้น ๆ



รูปที่ 26 การตรวจสอบความพร้อมของสัญญาณจากเครื่อง THz-TDS ก่อนเริ่มการทดลอง

3.3 วิธีการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing)

ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่ได้จากการวัดผ่านเครื่อง FT-IR และ THz-TDS จะถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์ผล เพื่อการตีความผลลัพธ์อย่างมีประสิทธิภาพ ในที่นี้ ได้ทำการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมต้องผ่านการประมวลผลเบื้องต้นด้วยวิธีการ ดังนี้

1) การเลือกช่วงของสเปกตรัม (Wavenumber Selection): เพื่อตัดข้อมูลสเปกตรัมในช่วงเลขคลื่นที่ไม่สำคัญหรือไม่เกี่ยวข้องออกไป สามารถช่วยลดขนาดข้อมูลที่ไม่จำเป็นและเพิ่มความชัดเจนให้กับส่วนที่สนใจของสเปกตรัม

2) การปรับเส้นฐานสเปกตรัม (Baseline Removal): การปรับเส้นฐานเป็นขั้นตอนที่สำคัญในการลดความเข้มของสัญญาณสเปกตรัมที่เกิดจากการกระเจิงสัญญาณแสงบนตัวอย่างระหว่างการเก็บข้อมูล (Scattering Effects) ทำให้สัญญาณสเปกตรัมที่ได้แสดงรูปแบบการดูดกลืนที่ชัดเจนมากขึ้น

3) การทำให้สัญญาณเรียบ (Smooth Signal): โดยใช้ Savitzky-Golay Filter: การทำให้สัญญาณเรียบเป็นวิธีการลดสัญญาณรบกวนและรักษาลักษณะสำคัญของสัญญาณ การใช้ Savitzky-Golay Filter กำหนดระดับของพหุนาม (polynomial order) ที่ 2 และขนาดของหน้าต่าง (window size) ที่ 15 จุด เพื่อทำให้สัญญาณเรียบ เทคนิคนี้ช่วยรักษาคูณลักษณะที่สำคัญของสัญญาณและลดผลกระทบจากสัญญาณรบกวน

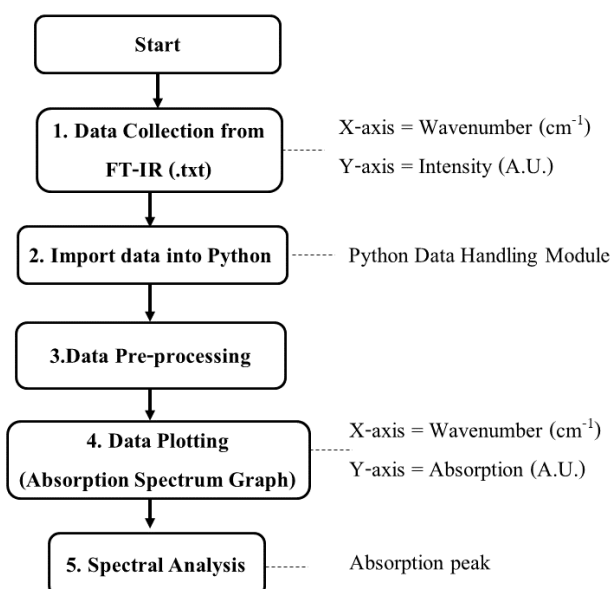
ขั้นตอนการประมวลผลสเปกตรัมทั้งหมดนี้จะถูกนำไปใช้กับชุดข้อมูลสำหรับการฝึกฝนโมเดล (Training dataset) ซึ่งเป็นชุดข้อมูลที่ใช้ในการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) หลังจาก that โมเดลได้รับการฝึกฝนเรียบร้อยแล้ว จะนำโมเดลที่ฝึกฝนไปทดสอบกับชุดข้อมูลทดสอบ (Test dataset) เพื่อทดสอบประสิทธิภาพของโมเดลในการจำแนกและการตรวจจับที่ผิดปกติในตัวอย่างที่ไม่เคยเห็นมาก่อน

3.4 การวิเคราะห์คุณลักษณะการดูดกลืนแสงของสเปกตรัม (Spectral Absorption Characteristics Analysis)

ผลที่ได้จากการใช้เครื่อง Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ในการวิเคราะห์ตัวอย่างในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) จะอยู่ในรูปของสเปกตรัมที่แสดงการดูดกลืนแสงของตัวอย่างในช่วงความถี่ที่กำหนด ผลข้อมูลที่ได้จาก FT-IR จะใช้เทคนิคการแปลงฟูเรียร์ (Fourier Transform) เพื่อแปลงข้อมูลจากโดเมนเวลาไปเป็นโดเมนความถี่ ซึ่งช่วยให้สามารถสร้างกราฟสเปกตรัมที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างการดูดกลืนแสง (Absorption) กับเลขคลื่น (Wavenumber) ในการวิเคราะห์ข้อมูลที่ได้จาก FT-IR ใช้โปรแกรม OPUS ซึ่งสามารถ

แสดงผลสเปกตรัมในรูปแบบของกราฟการส่องผ่าน (Transmission) และการดูดกลืนแสง (Absorption) ที่เลขคลื่นต่างๆ อย่างไรก็ตาม OPUS มีข้อจำกัดในด้านการวิเคราะห์เชิงลึก เช่น การตรวจสอบพีดที่สำคัญในสเปกตรัมที่เกี่ยวข้องกับองค์ประกอบทางเคมี เพื่อแก้ไขข้อจำกัดดังกล่าว ในงานวิจัยจึงใช้โปรแกรม Python ในการวิเคราะห์สเปกตรัมเพื่อตรวจสอบพีดต่างๆ ที่บ่งบอกถึงการสั่นของพันธะเคมีเฉพาะในตัวอย่าง ข้อมูลการดูดกลืนแสงจะถูกแปลงและพล็อตกราฟในหน่วย A.U. (Arbitrary Units) โดยแกน X เป็นเลขคลื่น (Wavenumber) หน่วย cm^{-1} และแกน Y คือความเข้มของสัญญาณการดูดกลืนแสง (Intensity) หน่วย a.u. (Arbitrary units) พีดที่ปรากฏในสเปกตรัมจะบ่งบอกถึงโครงสร้างทางเคมีของตัวอย่าง และสามารถใช้ในการระบุองค์ประกอบทางเคมีได้

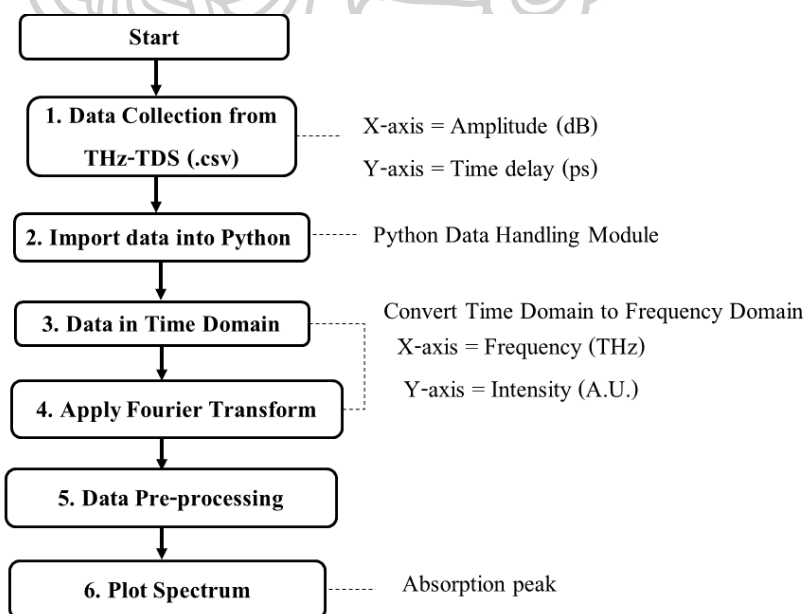
รูปที่ 27 แสดงกระบวนการวิเคราะห์สเปกตรัมจากเครื่อง FT-IR โดยใช้โปรแกรมไพธอน เริ่มจากการบันทึกข้อมูลดิบ (Raw data) จากเครื่อง FT-IR แล้วนำเข้าโมดูลที่ใช้ในการจัดการกับข้อมูลและวิเคราะห์สเปกตรัม ข้อมูลดูดกลืนแสงจะถูกพล็อตเป็นกราฟสเปกตรัม ซึ่งแสดงลักษณะเฉพาะของตัวอย่างในการดูดกลืนแสงที่ความถี่ต่างๆ หากต้องการแปลงเลขคลื่นเป็นความถี่ในหน่วยเทราเฮิรตซ์ ก็สามารถใช้สมการแปลงได้ เมื่อเราได้แกน X และ Y ที่กำหนดแล้ว ข้อมูลการดูดกลืนแสงจะถูกนำมาประมวลผล หลังจากนั้น ข้อมูลที่ได้จากการดูดกลืนแสงจะถูกนำมาพล็อตเป็นกราฟ เพื่อแสดงลักษณะของสัญญาณการดูดกลืนแสงตามช่วงจำนวนคลื่นหรือความถี่ที่สนใจ กราฟที่ได้จากการพล็อตนี้จะเรียกว่าสเปกตรัม ซึ่งเป็นภาพที่แสดงถึงลักษณะเฉพาะของตัวอย่างในรูปแบบของการดูดกลืนแสงที่ความถี่ต่างๆ



รูปที่ 27 แผนการทำงานการวิเคราะห์สเปกตรัมจากเครื่อง FT-IR โดยใช้เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลที่พัฒนาขึ้นจากการเขียนโปรแกรมด้วยภาษาไพธอน (Python)

สำหรับการวิเคราะห์ด้วยเครื่องเทราเฮิร์ตซ์ไทม์โดเมนสเปกโทรสโคปี (THz-TDS) ข้อมูลดิบที่ได้จากการวัดจะอยู่ในรูปของกราฟที่ แกน Y เป็นแอมพลิจูด (Amplitude) และแกน X เป็นเวลา (Time) ซึ่งแตกต่างจากการวิเคราะห์สเปกตรัมจาก FT-IR ที่ใช้การดูดกลืนแสง (Absorption) และเลขคลื่น (Wavenumber) ได้โดยตรง ดังนั้นกระบวนการวิเคราะห์ข้อมูลจากเครื่อง THz-TDS จึงมีความแตกต่างเล็กน้อย โดยต้องแปลงข้อมูลเหล่านี้ไปอยู่ในรูปของความถี่ (Frequency) เพื่อให้สามารถทำการวิเคราะห์ได้ เนื่องจากข้อมูลถูกบันทึกในไฟล์ Excel และไม่สามารถใช้โปรแกรม OPUS ในการวิเคราะห์ได้โดยตรงจึงจำเป็นต้องใช้การวิเคราะห์ข้อมูลที่พัฒนาขึ้นจากการเขียนโปรแกรมด้วยภาษาไพธอน

ขั้นตอนการวิเคราะห์จะเริ่มจากการนำเข้าข้อมูลจากไฟล์ Excel จากนั้นทำการแปลงข้อมูลจาก โดเมนเวลา (Time Domain) ไปยัง โดเมนความถี่ (Frequency Domain) โดยใช้ Fourier Transform ข้อมูลที่แปลงแล้วจะสามารถแสดงในรูปแบบกราฟที่ แกน X เป็นความถี่ (Frequency) และ แกน Y เป็นแอมพลิจูด (Amplitude) หรือความเข้มของสัญญาณ (Intensity) จากนั้นสามารถวิเคราะห์พีคของการดูดกลืนแสงในสเปกตรัมเพื่อระบุโครงสร้างทางเคมีและองค์ประกอบของสารตัวอย่าง รวมถึงการตรวจสอบความบริสุทธิ์หรือสารปนเปื้อนในตัวอย่าง โดยเปรียบเทียบกับสารอ้างอิงที่ต้องการตรวจสอบ แสดงในรูปที่ 28 การทำงานของโปรแกรม Python ในการวิเคราะห์สเปกตรัม THz-TDS แสดงให้เห็นกระบวนการแปลงข้อมูลจากไฟล์ Excel จนถึงการสร้างสเปกตรัมการดูดกลืนแสง



รูปที่ 28 แผนการทำงานการวิเคราะห์สเปกตรัมจากเครื่อง THz-TDS โดยใช้เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลที่พัฒนาขึ้นจากการเขียนโปรแกรมด้วยภาษาไพธอน (Python)

3.5 การวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

ในงานวิจัยนี้ เราใช้ทัลก์มาตรฐานเป็นสเปกตรัมอ้างอิงเพื่อระบุลักษณะเฉพาะของทัลก์ ซึ่งข้อมูลสเปกตรัมเหล่านี้จะถูกนำมาใช้เป็นฐานข้อมูลสำหรับการวิเคราะห์สเปกตรัมของตัวอย่างอื่น ๆ ต่อไป โดยในขั้นตอนการวิเคราะห์ เรานำเทคนิคการเรียนรู้ของเครื่องมาช่วยในการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมทั้งในเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ การวิเคราะห์ในเชิงคุณภาพจะมุ่งเน้นไปที่การตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งเด็กและแป้งสำหรับบริโภค เพื่อยืนยันการมีทัลก์ในผลิตภัณฑ์ดังกล่าว ขณะที่การวิเคราะห์ในเชิงปริมาณจะมุ่งเน้นไปที่การตรวจวัดปริมาณทัลก์ในตัวอย่างแป้งฝุ่นเด็ก เพื่อระบุความเข้มข้นของทัลก์ในผลิตภัณฑ์ได้ นอกจากนี้ ยังมีการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ที่นิยมใช้ในอุตสาหกรรมเครื่องสำอาง ซึ่งการจำแนกนี้จะช่วยให้สามารถเลือกใช้ประเภทของทัลก์ให้เหมาะสมกับการใช้งานในผลิตภัณฑ์ต่าง ๆ เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการใช้และลดข้อบกพร่องที่อาจเกิดขึ้นจากการใช้ทัลก์ผิดประเภท

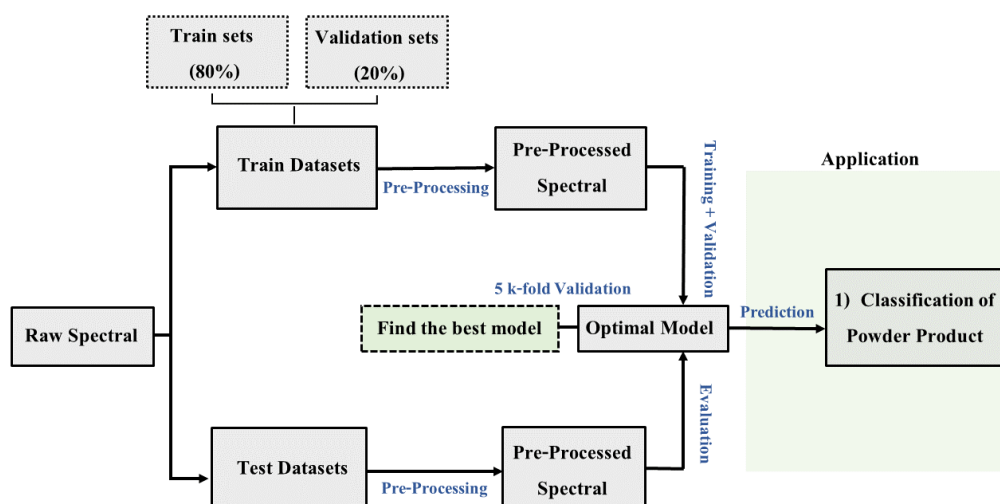
3.5.1 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (Qualitative Analysis): สร้างแบบจำลองเพื่อตรวจวัดและจำแนกการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กและผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค

ในขั้นตอนที่ 1 การเตรียมข้อมูลสเปกตรัม: ใช้เครื่อง FT-IR และ THz-TDS: เพื่อเก็บข้อมูลสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดกลาง ($400\text{--}4,000\text{ cm}^{-1}$) และอินฟราเรดไกล ($30\text{--}300\text{ cm}^{-1}$) เริ่มต้นด้วยการเก็บสเปกตรัมของทัลก์มาตรฐานเพื่อใช้เป็นข้อมูลอ้างอิงเปรียบเทียบ จากนั้นเก็บข้อมูลสเปกตรัมของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กและแป้งสำหรับบริโภค ซึ่งแบ่งข้อมูลออกเป็นสองชุดหลัก: ชุดข้อมูลที่มีทัลก์รวมทั้งหมด 150 สเปกตรัม ชุดข้อมูลที่ไม่มีทัลก์ (Talc-Free): ประกอบด้วยสเปกตรัมจากผลิตภัณฑ์อื่นที่ไม่มีทัลก์ เช่น สารเติมแต่งในเครื่องสำอางและแป้งฝุ่นสำหรับบริโภค รวม 140 สเปกตรัม สำหรับการทดสอบโมเดล มีการเก็บตัวอย่างผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นจากห้างสรรพสินค้า โดยแบ่งเป็นแป้งฝุ่นเด็กที่มีทัลก์ (5 แบรินด์) และไม่มีทัลก์ (4 แบรินด์) แบรินด์ละ 5 สเปกตรัม รวมเป็น 45 สเปกตรัม และแป้งสำหรับบริโภค 3 ชนิด ชนิดละ 5 สเปกตรัม รวมเป็น 15 สเปกตรัม รวมทั้งหมด 60 สเปกตรัม ใช้เป็นข้อมูลชุดทดสอบ รายละเอียดเพิ่มเติมสามารถดูได้ในหัวข้อ 3.1.2

ขั้นตอนที่ 2 การประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น: ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่ได้จากการวัดผ่านเครื่อง FT-IR จะถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์ผล เพื่อการตีความผลลัพธ์อย่างมีประสิทธิภาพ ในขั้นนี้ได้ทำการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมเบื้องต้นทั้งหมด 3 วิธี ได้แก่ 1. การเลือกช่วงของสเปกตรัม (Wavenumber Selection) 2. การปรับเส้นฐานสเปกตรัม (Baseline Removal) และ 3. การทำให้สัญญาณเรียบ (Smooth Signal) ซึ่งได้กล่าวไว้ในหัวข้อ 2.8

ขั้นตอนที่ 3 การแบ่งชุดข้อมูลทดสอบและฝึกสอน: ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่เก็บรวบรวมจะถูกแบ่งออกเป็นสองส่วน ได้แก่ 1. ชุดฝึกสอน (Training Set) ประกอบด้วยข้อมูล 290 สเปกตรัม ใช้ในการสร้างและฝึกอบรมแบบจำลอง 2. ชุดทดสอบ (Testing Set) ประกอบด้วยข้อมูล 60 สเปกตรัม ใช้ในการประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลองที่ได้จากการฝึกอบรม เมื่อแบ่งข้อมูลเสร็จแล้ว นำชุดฝึกสอนมาใช้ในการสร้างแบบจำลองต่อไป

ขั้นตอนที่ 4 การสร้างโมเดลการเรียนรู้ของเครื่อง: ในการศึกษาครั้งนี้ ใช้การเรียนรู้ของเครื่องเพื่อจำแนกประเภทผลิตภัณฑ์แบ่งฝุ่นที่มีทัลก์และไม่มีทัลก์ โดยใช้ข้อมูลสเปกตรัม FT-IR และ THz-TDS ที่ผ่านการวิเคราะห์ด้วย Principal Component Analysis (PCA) เพื่อลดมิติข้อมูลและรักษาความสำคัญของข้อมูล โดยกำหนดจำนวนองค์ประกอบหลัก (PCs) เท่ากับ 2 จากนั้นเราสร้างโมเดลการเรียนรู้ของเครื่องด้วยแบบจำลอง Extra Trees Classifier, Random Forest Classifier และ Logistic Regression ข้อมูลจะถูกแบ่งเป็น ชุดฝึกสอน (80%) และ ชุดทดสอบ (20%) ซึ่งชุดฝึกสอนจะถูกแบ่งย่อยเพิ่มเติมเป็น ชุดฝึก (Training set) และ ชุดตรวจสอบ (Validation set) เพื่อปรับปรุง Hyperparameters ของโมเดลโดยใช้เทคนิค k-fold Cross Validation ($k = 5$) เพื่อลดความเสี่ยงจากการเกิด Overfitting และเพิ่มความเสถียรของโมเดล ผลลัพธ์ของการจำแนกจะถูกประเมินผ่าน Confusion Matrix เพื่อแสดงผลการทำนายของแต่ละคลาส รวมถึงตัวชี้วัดต่างๆ 1. อัตราส่วนของการทำนายที่ถูกต้องทั้งหมด (Accuracy; ACC) 2. พื้นที่ใต้กราฟ ROC ซึ่งบ่งชี้ความสามารถในการแยกแยะระหว่างคลาส (Area Under the Curve; AUC) 3. ความแม่นยำในการทำนาย (Precision; Prec.) และ 4. ความสามารถในการค้นหาตัวอย่างที่เป็น Positive (Recall) หลังจากที่ได้โมเดลที่ดีที่สุดแล้ว จะนำมาวิเคราะห์เพื่อเลือกช่วงคลื่นความถี่ที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการวิเคราะห์ในขั้นตอนถัดไป รูปที่ 29 แสดงการเรียนรู้ของเครื่อง สำหรับตรวจวัดและจำแนกการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์จากแบบจำลองที่ได้รับการฝึกอบรมแล้ว



รูปที่ 29 กระบวนการเรียนรู้ของเครื่อง สำหรับใช้ตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์

3.5.2 การวิเคราะห์เชิงปริมาณ (Quantitative Analysis): สร้างแบบจำลองการทำนายปริมาณความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่าง

ขั้นตอนที่ 1 การเตรียมข้อมูลข้อมูลสเปกตรัม: ในกระบวนการเตรียมตัวอย่างจากเครื่อง FT-IR ในย่านอินฟราเรดไกลใช้สารผสมโพลีเอทิลีน (PE) ปริมาณ 25.5 มิลลิกรัมที่มีการผสมกับทัลก์บริสุทธิ์ในระดับความเข้มข้นที่แตกต่างกันตั้งแต่ 0 – 4.5 มิลลิกรัม ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่วัดได้จากระดับความเข้มข้นที่แตกต่างกันจำนวน 19 ตัวอย่าง ตัวอย่างละ 10 สเปกตรัม (รวม 190 สเปกตรัม) โดยในการวิเคราะห์นี้คลื่นรบกวนในช่วงต้น 60 ตัวแรกของสเปกตรัมที่วัดได้ทั้งหมดถูกตัดออกไปเหลือเพียงช่วง $90\text{--}300\text{ cm}^{-1}$ เพื่อลดสัญญาณรบกวนที่ไม่ต้องการออกไปจากการวิเคราะห์

ขั้นตอนที่ 2 การประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น: ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่ได้จากการวัดผ่านเครื่อง FT-IR ในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) จะถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์ผล เพื่อการตีความผลลัพธ์อย่างมีประสิทธิภาพ ในขั้นนี้ได้ทำการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมเบื้องต้นทั้งหมด 3 วิธี ได้แก่ 1. การเลือกช่วงของสเปกตรัม (Wavenumber Selection) 2. การปรับเส้นฐานสเปกตรัม (Baseline Removal) และ 3. การทำให้สัญญาณเรียบ (Smooth Signal) ซึ่งได้กล่าวไว้ ในหัวข้อ 2.8

ขั้นตอนที่ 3 การแบ่งชุดข้อมูลทดสอบและฝึกสอน: ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่วัดได้จากระดับความเข้มข้นที่แตกต่างกันจำนวน 19 ตัวอย่าง ตัวอย่างละ 10 สเปกตรัม (รวม 190 สเปกตรัม) แบ่งเป็นข้อมูลในแต่ละกลุ่มความเข้มข้นออกเป็นสองส่วน คือ ชุดฝึกสอน (Training Set) และชุดทดสอบ (Testing Set) สัดส่วน 50% (95 สเปกตรัม) สำหรับชุดฝึกสอน และ 50% (95 สเปกตรัม)

สำหรับชุดทดสอบ โดยทำให้แต่ละกลุ่มความเข้มข้นมีอัตราส่วนเท่ากัน เมื่อแบ่งข้อมูลเสร็จเรียบร้อยแล้ว คุณสามารถนำชุดฝึกสอน (Training Set) ไปใช้ในการสร้างและฝึกอบรมแบบจำลองเชิงเส้น และนำชุดทดสอบ (Testing Set) ไปใช้ในการประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลองที่สร้าง

ขั้นตอนที่ 4 การสร้างแบบจำลองเชิงเส้น: ในการศึกษาี้เลือกใช้แบบจำลองเชิงเส้น Partial Least Squares (PLS) Regression สำหรับการทำนายความเข้มข้นของทัลก์ในแป้งเด็กเนื่องจากความสามารถในการจัดการกับข้อมูลที่มีมิติสูงและความซับซ้อน รวมถึงการให้ผลลัพธ์ที่สามารถตีความได้และจัดการกับสัญญาณรบกวนได้อย่างมีประสิทธิภาพ ทั้งยังมีความยืดหยุ่นในด้านการปรับจำนวน Principal Components (PCs) ช่วยให้สามารถควบคุมความซับซ้อนของโมเดลและป้องกันการเกิด overfitting ในการสร้างแบบจำลองเชิงเส้น Partial Least Squares (PLS) ข้อมูลทั้งหมดที่ผ่านการประมวลผลเบื้องต้นแล้วจะถูกแบ่งออกเป็นชุดฝึกอบรม (training set) และชุดทดสอบ (test set) โดยชุดทดสอบจะมีสัดส่วน 20% ของข้อมูลทั้งหมด และชุดฝึกอบรมจะมีสัดส่วน 80% ของข้อมูลทั้งหมด เพื่อเลือกจำนวนคอมโพเนนต์ (components) ที่เหมาะสมสำหรับโมเดล PLS เราจะทำการทดสอบค่าจำนวนคอมโพเนนต์ตั้งแต่ 1 ถึง 10 ในแต่ละค่าจะคำนวณค่า Root Mean Square Error (RMSE) ในแต่ละ fold และหาค่าเฉลี่ย เพื่อเลือกค่าจำนวนคอมโพเนนต์ที่ให้ค่า RMSE เฉลี่ยต่ำที่สุด ซึ่งเป็นตัวชี้วัดความคลาดเคลื่อนระหว่างค่าที่ทำนายได้และค่าจริง ค่า RMSE ที่ต่ำหมายถึงโมเดลมีประสิทธิภาพในการทำนายค่าความเข้มข้นของทัลก์ได้ดี หลังจากการ เลือกค่าจำนวนคอมโพเนนต์ที่เหมาะสมที่สุด โมเดล PLS จะถูกสร้างขึ้นโดยใช้ชุดข้อมูลฝึกอบรมทั้งหมดและทดสอบด้วยชุดข้อมูลทดสอบ โดยการทำนายค่าความเข้มข้นของทัลก์จากข้อมูลสเปกตรัมในชุดทดสอบ จากนั้นจะประเมินผลลัพธ์ของโมเดลด้วยตัวชี้วัดสองประการ ได้แก่ ค่าความผิดพลาดในการทำนาย (Root Mean Square Error; RMSE) และค่าสัมประสิทธิ์ การตัดสินใจ (Coefficient of Determination; R^2) ซึ่งเป็นตัวชี้วัดความแม่นยำของแบบจำลองเพื่อใช้อธิบายความแปรปรวนของข้อมูล ค่าสูงของ R^2 หมายถึงโมเดลสามารถอธิบายความแปรปรวนของข้อมูลได้ดี

ขั้นตอนที่ 5 การนำโมเดลเชิงเส้นที่สร้างไปประยุกต์ใช้กับแป้งฝุ่นเด็กที่ขายตามท้องตลาด: ในการประเมินความเข้มข้นของทัลก์ในแป้งเด็กโดยใช้โมเดล PLS ที่เราสร้างขึ้น ขั้นตอนนี้จะนำข้อมูลใหม่นั้นคือสเปกตรัมของแป้งเด็กที่เก็บจากเครื่อง FT-IR ในย่านอินฟราเรดไกลมาการทำนายค่าความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่าง ซึ่งเป็นการใช้งานโมเดลที่ได้จากการฝึกฝนก่อนหน้านี้ ข้อมูลสเปกตรัมของแป้งเด็กจะถูกประมวลผลเบื้องต้นในลักษณะเดียวกับข้อมูลที่ใช้ในการฝึกฝนโมเดลและการทำสเปกตรัมให้อยู่ในช่วงความยาวคลื่นตั้งแต่ $90\text{--}300\text{ cm}^{-1}$ โมเดล PLS จะการทำนายค่า

ความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่างแป้งเด็กแต่ละตัวอย่าง และผลลัพธ์ที่ได้จะเป็นการประเมินค่าความเข้มข้นของทัลก์ในแป้งเด็กแต่ละตัวอย่างที่ผ่านการทดสอบ ซึ่งสามารถนำไปใช้ในการวิเคราะห์และเปรียบเทียบกับค่าจริงที่ได้จากการทดลองเพื่อประเมินความแม่นยำของโมเดล

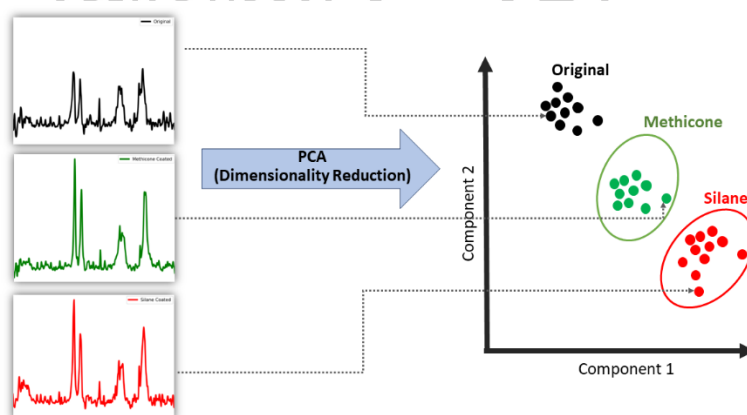
ทั้งนี้ ในการจำแนกประเภทของแป้งเด็กว่าเป็น "มีทัลก์ (Talc-Based)" หรือ "ไม่มีทัลก์ (Talc-Free)" แบบจำลอง PLS Regression ใช้ความเข้มข้นที่ใช้เป็นเกณฑ์ในการจำแนก (Concentration Cut-Off) ที่ 30% เพื่อเพิ่มความแม่นยำในการจำแนกประเภทของแป้งเด็ก โดยการกำหนดค่าความเข้มข้นที่ 30% ช่วยให้เราสามารถแยกแยะตัวอย่างได้อย่างมีประสิทธิภาพสูงสุด หากค่าความเข้มข้นที่ทำนายได้ต่ำกว่า 30% (ซึ่งเทียบเท่ากับ 1.35 มิลลิกรัม) ตัวอย่างจะถูกจัดเป็นกลุ่ม "Talc-Free" ซึ่งหมายความว่าแป้งเด็กตัวอย่งนั้นมีทัลก์ในระดับต่ำจนไม่สามารถจัดเป็นผลิตภัณฑ์ที่มีทัลก์ได้ ในทางกลับกัน หากค่าความเข้มข้นที่ทำนายได้สูงกว่า 70% (ซึ่งเทียบเท่ากับ 3.15 มิลลิกรัม) ตัวอย่างจะถูกจัดเป็นกลุ่ม "Talc-based" ซึ่งหมายความว่าแป้งเด็กตัวอย่งนั้นมีทัลก์ในระดับสูงพอที่จะจัดเป็นผลิตภัณฑ์ที่มีทัลก์ได้ การเลือกใช้ความเข้มข้นที่ใช้เป็นเกณฑ์ในการที่ 30% ได้รับการออกแบบเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของโมเดลในการจำแนกประเภทให้มีความแม่นยำสูงสุด โดยมีความแม่นยำในการจำแนกประเภทถึง 100% การตั้งค่าเกณฑ์นี้ทำให้โมเดลสามารถตอบสนองต่อความต้องการในการจำแนกประเภทได้อย่างเหมาะสม โดยการปรับเกณฑ์ให้ตรงกับระดับความเข้มข้นของทัลก์ที่จำเป็นต้องแยกประเภท ทั้งนี้ ค่า Concentration Cut-Off ที่ 30% ช่วยให้การตรวจจับทัลก์เป็นไปอย่างมีประสิทธิภาพ

3.5.3 การนำไปประยุกต์ใช้ในการจำแนกการเคลือบของทัลก์ในอุตสาหกรรม: สร้างแบบจำลองเพื่อจำแนกประเภทการเคลือบผิวทัลก์ (Classification of Talc Coatings)

ขั้นตอนที่ 1 การเตรียมข้อมูลข้อมูลสเปกตรัม: ใช้เครื่อง FT-IR และ THz-TDS ในการเก็บข้อมูลสเปกตรัมทั้งในย่านอินฟราเรดกลาง ($400-4,000\text{ cm}^{-1}$) และอินฟราเรดไกล ($30-300\text{ cm}^{-1}$) เก็บข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากตัวอย่างของทัลก์ที่มีการเคลือบผิวที่แตกต่างกัน 3 ประเภท ได้แก่ ทัลก์ที่ไม่เคลือบ (Original), ทัลก์ที่เคลือบด้วยเมทริกอน (Methicone Coated), และทัลก์ที่เคลือบด้วยซิลเลน (Silane Coated) โดยในแต่ละกลุ่มเราได้เก็บตัวอย่างจำนวน 5 ตัวอย่าง ทำการวัดข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด 10 ครั้ง ส่งผลให้ได้จำนวนสเปกตรัมทั้งหมด 50 สเปกตรัมต่อกลุ่มการเคลือบ รวมทั้งหมด 150 สเปกตรัมสำหรับทั้งสามกลุ่มการเคลือบ โดยข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดนี้จะถูกนำไปใช้ในการสร้างแบบจำลองสำหรับแยกประเภทการเคลือบผิวของทัลก์

ขั้นตอนที่ 2 วิธีการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น: ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่ได้จากการวัดผ่านเครื่อง FT-IR และ THz-TDS จะถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์ผล เพื่อการตีความผลลัพธ์อย่างมีประสิทธิภาพ ในที่นี้ได้ทำการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมเบื้องต้นทั้งหมด 3 วิธี ได้แก่ 1. การเลือกช่วงของสเปกตรัม (Wavenumber Selection) 2. การปรับเส้นฐานสเปกตรัม (Baseline Removal) และ 3. การทำให้สัญญาณเรียบ (Smooth Signal) ซึ่งได้กล่าวไว้ ในหัวข้อ 2.8

ขั้นตอนที่ 3 การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA): สเปกตรัมทั้งหมดที่ผ่านการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น จะถูกนำมาจัดกลุ่มประเภทการเคลือบ โดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA) ที่ทำการแปลงข้อมูลสเปกตรัมให้อยู่ในอีกระบบพิกัดหนึ่ง โดยข้อมูลที่ถูกลดแล้วจะมีจำนวนมิติเท่าเดิม แต่จะมีการเรียงลำดับความสำคัญในการอธิบายข้อมูลจากมากไปน้อย กล่าวคือ ตัวแปรที่อยู่ในมิติแรกๆ มักจะถูกเรียกว่า Principal Components (PCs) ที่สามารถใช้อธิบายรูปแบบข้อมูลในสเปกตรัมได้ส่วนใหญ่หรือเกือบทั้งหมด ในการเลือกจำนวนองค์ประกอบหลักที่จะใช้งาน ในกรณีนี้เราเลือกใช้องค์ประกอบหลัก 2 อันดับ (2 PCs) โดยผลลัพธ์จากการวิเคราะห์ PCA จะได้ชุดขององค์ประกอบหลัก ซึ่งสามารถนำมาใช้ในการสร้างกราฟการกระจาย (Scatter plot) เพื่อแสดงการกระจายตัวของข้อมูลในมิติที่ลดลง ทำให้สามารถมองเห็นความแตกต่างระหว่างกลุ่มตัวอย่างที่มีการเคลือบที่แตกต่างกันได้อย่างชัดเจน แสดงในรูปที่ 30 นอกจากนี้้องค์ประกอบหลักที่ได้จากการวิเคราะห์ PCA ถูกนำไปใช้เป็น features สำหรับการจำแนกประเภทโดยใช้แบบจำลอง machine learning



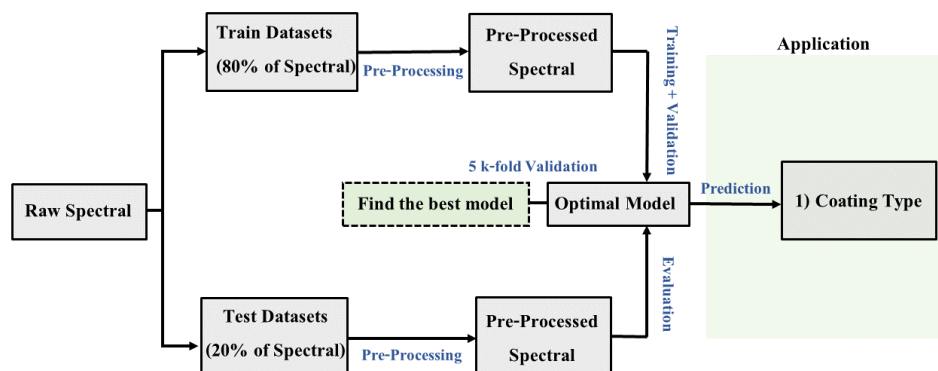
รูปที่ 30 ตัวอย่างกราฟ scatter plot ที่ได้จากการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก

ขั้นตอนที่ 4 การสร้างโมเดลการเรียนรู้ของเครื่อง: ข้อมูลที่ใช้ในการสร้างโมเดลประกอบไปด้วยสเปกตรัมจากตัวอย่างที่เคลือบผิวแตกต่างกันสามประเภท ข้อมูลเหล่านี้ถูกลดมิติด้วยการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (PCA) โดยใช้้องค์ประกอบหลัก 2 อันดับ (ในขั้นตอนที่ 3) ข้อมูลที่เตรียมแล้วจะถูกแบ่งออกเป็น features (X) และ labels (y) โดย features ประกอบด้วยข้อมูลสเปกตรัมที่ลดมิติแล้ว และ labels ประกอบด้วยข้อมูลประเภทการเคลือบผิวของตัวอย่าง จากนั้นใช้โมเดล Machine

Learning ชุดข้อมูลฝึกอบรมถูกใช้ในสัดส่วน 80% ของข้อมูลทั้งหมด เพื่อสร้างโมเดล และชุดข้อมูลทดสอบถูกใช้ในสัดส่วน 20% เพื่อตรวจสอบประสิทธิภาพของโมเดลที่สร้างขึ้น และเพื่อป้องกันการเกิด Overfitting ที่อาจเกิดขึ้นจากความซับซ้อนของโมเดล สำหรับกระบวนการเรียนรู้ด้วยเครื่องแบบอัตโนมัตินี้ เพื่อจำแนกหรือทำนายประเภทการเคลือบของทัลก์จากข้อมูลสเปกตรัม FT-IR จะต้องผ่านกระบวนการประมวลผลเบื้องต้นเพื่อให้ข้อมูลพร้อมใช้งานกับโมเดลได้อย่างเหมาะสมทุกครั้งที่ทำการฝึกอบรมและประเมินโมเดล เมื่อได้รับข้อมูลที่ถูกประมวลผลเบื้องต้นแล้ว ข้อมูลในชุดฝึกอบรมจะถูกแบ่งออกเป็นส่วนใหญ่สำหรับการฝึกโมเดล 80% และส่วนข้อมูลตรวจสอบ (Validation Dataset) สำหรับปรับปรุง Hyperparameters ของโมเดล เพื่อป้องกันการเกิด Overfitting และให้โมเดลมีประสิทธิภาพที่ดีที่สุด เพื่อปรับปรุง Hyperparameters ของโมเดลอย่างมีประสิทธิภาพและลดความเสี่ยงในการเกิด Overfitting เราใช้เทคนิค k-fold Cross Validation โดยทำการแบ่งชุดฝึกอบรมออกเป็น k ส่วนเท่าๆ กัน (ในที่นี้ $k = 5$) กล่าวคือชุดฝึกอบรมทั้งหมดจะถูกแบ่งออกเป็น 5 ส่วนเท่าๆ กัน ในแต่ละรอบของการ cross-validation (fold) 4 folds จะถูกใช้เป็น training set และ 1 fold จะถูกใช้เป็น validation set กระบวนการนี้จะถูกทำซ้ำทั้งหมด 5 รอบ โดยในแต่ละรอบ validation set จะเป็นกลุ่มที่แตกต่างกัน จากนั้นจะประเมินโมเดลในแต่ละ fold โดยเก็บประสิทธิภาพของโมเดลที่ได้ในแต่ละรอบ (fold) เพื่อหาค่าเฉลี่ยของประสิทธิภาพของโมเดลที่ถูกต้องที่สุด ดังนั้น k-fold Cross Validation ช่วยให้เรามั่นใจได้ว่าโมเดลของเรามีประสิทธิภาพในการจำแนกและทำนายประเภทการเคลือบของทัลก์และลดความเสี่ยงในการการเกิด Overfitting จากการฝึกโมเดลด้วยชุดข้อมูลฝึกอบรมทั้งหมดที่ใช้ในการสร้างโมเดลครั้งนี้

ในการศึกษาี้ เราได้เลือกใช้แบบจำลองการเรียนรู้ของเครื่อง 3 ประเภท ได้แก่ 1. Extra Trees Classifier 2. Random Forest Classifier และ 3. Logistic Regression โดยที่เลือกใช้โมเดลเหล่านี้มาใช้นี้เนื่องจากโมเดลทั้งสามนี้ทำให้เราได้เปรียบเทียบโมเดลที่ใช้เทคนิคแตกต่างกัน ได้แก่ เปรียบเทียบประสิทธิภาพระหว่างโมเดลที่ง่ายต่อการตีความและโมเดลที่ซับซ้อนและเห็นถึงความแตกต่างในการจัดการกับปัญหา overfitting ซึ่งจะช่วยให้เราเห็นภาพรวมของประสิทธิภาพโมเดลในสถานการณ์ต่างๆ โดยแต่ละโมเดลจะถูกปรับปรุง Hyperparameters ผ่านกระบวนการตรวจสอบข้อมูล (Validation) เพื่อให้ได้โมเดลที่มีประสิทธิภาพสูงสุด ทั้งนี้ ประสิทธิภาพของแบบจำลองจะถูกประเมินผ่านตัวชี้วัดดังนี้ 1. อัตราส่วนของการทำนายที่ถูกต้องทั้งหมด (Accuracy; ACC) 2. พื้นที่ใต้กราฟ ROC ซึ่งบ่งชี้ความสามารถในการแยกแยะระหว่างคลาส (Area Under the Curve; AUC) 3. ความแม่นยำในการทำนาย (Precision; Prec.) และ 4. ความสามารถในการค้นหาวัวอย่างที่เป็น Positive (Recall) เมื่อได้โมเดลที่มีประสิทธิภาพมากที่สุดแล้ว จึงนำค่าที่คำนวณได้ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกลมาเปรียบเทียบกัน เพื่อหาว่าสเปกตรัมในช่วงคลื่นความถี่ใดให้ผลลัพธ์การจำแนกที่ดีที่สุด ซึ่งขั้นตอนนี้จะช่วยให้สามารถเลือกใช้ช่วงคลื่นความถี่ที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการ

วิเคราะห์ต่อไป รูปที่ 31 แสดงการเรียนรู้ด้วยเครื่อง และการทำนายประเภทการเคลือบของทัลก์จากโมเดลที่ได้รับการฝึกอบรมแล้ว



รูปที่ 31 กระบวนการเรียนรู้ของเครื่อง สำหรับใช้จำแนกประเภทการเคลือบทัลก์



บทที่ 4

ผลการทดลองของงานวิจัย

ในบทนี้ จะกล่าวถึงผลการทดลองและการวิเคราะห์ที่ได้จากการพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดแบบไม่ทำลาย โดยการวิเคราะห์ถูกแบ่งออกเป็น 4 ส่วนหลัก ได้แก่ 1. การวิเคราะห์ทัลก์มาตรฐาน (Talc Standard) เพื่อศึกษาลักษณะเฉพาะของทัลก์ที่ใช้เป็นมาตรฐานเปรียบเทียบ 2. การวิเคราะห์เชิงคุณภาพเพื่อตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่น 3. การวิเคราะห์เชิงปริมาณ ซึ่งใช้ข้อมูลจากทัลก์มาตรฐานในการพัฒนาโมเดลสำหรับทำนายปริมาณทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็ก และ 4. การนำไปประยุกต์ใช้ในการจำแนกการเคลือบของทัลก์ในอุตสาหกรรม

4.1 การวิเคราะห์ทัลก์มาตรฐาน (Talc Standard)

ในการศึกษาเริ่มต้นด้วยการวิเคราะห์ทัลก์มาตรฐาน เพื่อทำความเข้าใจลักษณะเฉพาะและคุณสมบัติของทัลก์ที่ไม่มีการเคลือบหรือปรับแต่งเพิ่มเติม โดยเน้นที่การศึกษาสเปกตรัมและการตอบสนองของทัลก์ต่อแสงที่ครอบคลุมตั้งแต่ย่านอินฟราเรดกลางจนถึงเทราเฮิร์ตซ์ ข้อมูลจากทัลก์มาตรฐานนี้จะช่วยให้ผู้วิจัยสามารถระบุตำแหน่งพีคหลักที่สำคัญที่เกี่ยวข้องของทัลก์ได้ ซึ่งจะเป็นพื้นฐานในการตรวจสอบและเปรียบเทียบกับสเปกตรัมของตัวอย่างอื่น ได้

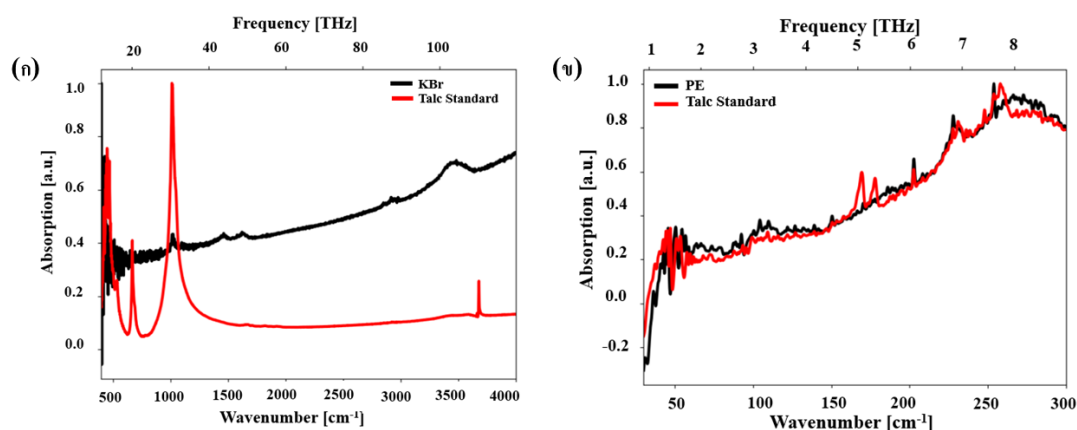
4.1.1 การวิเคราะห์สเปกตรัมของทัลก์มาตรฐาน: การเปรียบเทียบผลลัพธ์ก่อนและหลังการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing)

ในการศึกษานี้ การวิเคราะห์สเปกตรัมของทัลก์มาตรฐาน (Talc Standard) ถูกดำเนินการโดยใช้เทคนิคสเปกโทรสโกปีที่ครอบคลุมสองประเภทหลัก ได้แก่ Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) และ Terahertz Time Domain Spectroscopy (THz-TDS)

1) การวิเคราะห์ด้วยเทคนิค FT-IR ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far-IR)

ตัวอย่างสเปกตรัมของทัลก์มาตรฐานที่วัดได้จากเครื่อง FT-IR จะแสดงให้เห็นในรูปที่ 32 ซึ่งมีสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Absorption Spectra) ที่ได้จากข้อมูลดิบจากการวัดโดยตรง ก่อนการประมวลผลเบื้องต้น สเปกตรัมนี้แสดงผลของสัญญาณที่ตรวจวัดได้ตามจริง โดยกราฟจะบ่งบอกถึงการเปลี่ยนแปลงของค่าการดูดกลืนแสงตามความยาวคลื่น ในกราฟ แกนแนวนอน (X-axis) แสดงความยาวคลื่นในหน่วยของเลขคลื่น wavenumber (cm^{-1}) ขณะที่แกนแนวตั้ง (Y-axis) แสดงค่าความเข้มของสัญญาณที่ถูกดูดกลืน (Absorbance)

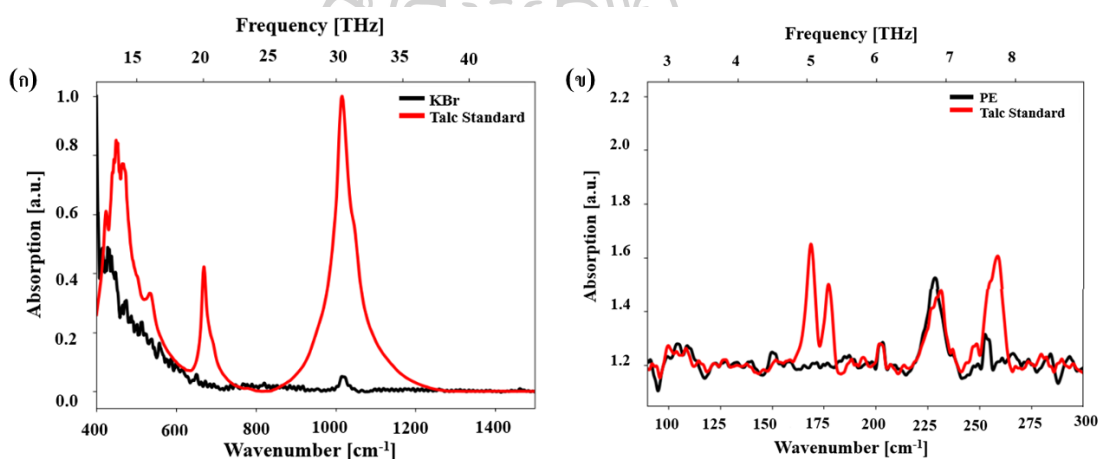
รูปที่ 32 (ก) แสดงการเปรียบเทียบระหว่างสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดกลาง (MIR) ซึ่งวัดจากตัวอย่างทัลก์บริสุทธิ์ที่ผสมกับโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr) ในอัตราส่วน 1:99 มิลลิกรัม (1.99% w/w) กับสเปกตรัมของโพแทสเซียมโบรไมด์ ปริมาณ 30 มิลลิกรัม ที่ยังไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น ส่วนรูปที่ 32 (ข) แสดงการเปรียบเทียบระหว่างสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดไกล (FIR) ที่วัดจากตัวอย่างทัลก์บริสุทธิ์ที่ผสมกับโพลีเอทิลีน (PE) ในอัตราส่วน 4.5:25.5 มิลลิกรัม (15.85% w/w) กับสเปกตรัมของโพลีเอทิลีนบริสุทธิ์ ปริมาณ 30 มิลลิกรัม ที่ยังไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น จากรูปจะเห็นได้ว่า สเปกตรัมการดูดกลืนแสงที่ได้นั้นมีสัญญาณในบางช่วงของเลขคลื่นที่เป็นสิ่งรบกวน และมีระดับเส้นฐานที่แตกต่างกัน ซึ่งอาจทำให้ความเข้มสัญญาณสเปกตรัมผิดเพี้ยนไป ทำให้การวิเคราะห์และการตีความข้อมูลไม่ถูกต้อง



รูปที่ 32 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของทัลก์มาตรฐานก่อนทำการประมวลผลจากเครื่อง FT-IR ในย่าน

(ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล

เพื่อลดข้อบกพร่องและเพิ่มประสิทธิภาพให้สเปกตรัมที่วัดได้ จึงได้มีการประมวลผลเบื้องต้นกับข้อมูลสเปกตรัมของทัลก์มาตรฐานที่วัดได้จากเครื่อง FT-IR เพื่อให้สเปกตรัมมีความเหมาะสมสำหรับการวิเคราะห์ โดยจะทำการเลือกช่วงเลขคลื่นที่สำคัญและปรับเส้นฐานของสเปกตรัมให้อยู่ในระดับเดียวกัน แสดงในรูปที่ 33 ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) สเปกตรัมที่ผ่านกระบวนการประมวลผลเบื้องต้นแล้วและถูกใช้ช่วงเลขคลื่นบริเวณ $400\text{--}1,500\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งเป็นช่วงที่มีการดูดกลืนที่สำคัญของทัลก์มาตรฐาน ข้อมูลสเปกตรัมจะได้รับการปรับเส้นฐานเพื่อให้สามารถเปรียบเทียบกันได้อย่างแม่นยำ แสดงผลในรูปที่ 34 (ก) ในขณะเดียวกัน ในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) สเปกตรัมที่ทำการประมวลผลเบื้องต้นแล้วและเลือกช่วงเลขคลื่นบริเวณ $90\text{--}300\text{ cm}^{-1}$ สำหรับการวิเคราะห์ซึ่งมีลักษณะเฉพาะที่สามารถใช้ในการวิเคราะห์โครงสร้างและคุณสมบัติของทัลก์ได้ โดยการปรับเส้นฐานในรูปที่ 34 (ข) จะช่วยให้การวิเคราะห์ข้อมูลเป็นไปอย่างถูกต้องและลดความผิดพลาดที่อาจเกิดจากสัญญาณรบกวน

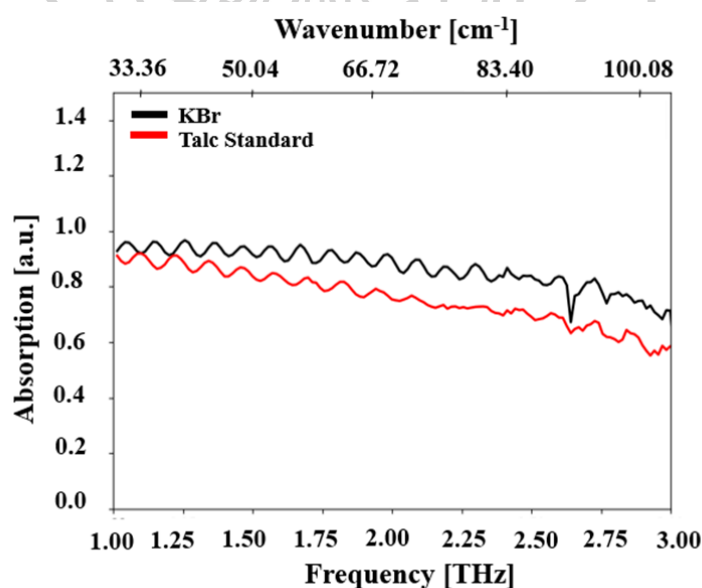


รูปที่ 33 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของทัลก์มาตรฐานหลังทำการประมวลผลจากเครื่อง FT-IR ในย่าน
(ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล

2) การวิเคราะห์ด้วยเทคนิค THz-TDS ในย่านเทราเฮิร์ตซ์ (THz)

ตัวอย่างสเปกตรัมของพัลส์มาตรฐานที่วัดได้จากเครื่อง THz-TDS จะแสดงในรูปแบบสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Absorption Spectra) ซึ่งเป็นข้อมูลดิบที่แสดงผลลัพธ์จากการวัดโดยตรงจากเครื่องมือวิเคราะห์ ข้อมูลในย่านเทราเฮิร์ตซ์ (Terahertz) จะแสดงลักษณะพีค (Peak) ที่บ่งบอกถึงการดูดกลืนแสงในช่วงความถี่ตั้งแต่ 1-3 THz ในการวิเคราะห์ สัญญาณจะถูกแปลงจากโดเมนเวลา (Time Domain Spectrum) เป็นโดเมนความถี่ (Frequency Domain) ผ่านกระบวนการแปลงฟูเรียร์ (Fourier Transform) กระบวนการนี้ทำให้สามารถแสดงผลเป็นสเปกตรัมการดูดกลืนแสงในย่านเทราเฮิร์ตซ์ได้ โดยกราฟสเปกตรัมที่ได้จะแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความถี่ (Frequency) และค่าการดูดกลืนแสง (Absorbance) ซึ่งแกนแนวนอน (X-axis) แทนค่าความถี่ ขณะที่แกนแนวตั้ง (Y-axis) แสดงค่าความเข้มของสัญญาณที่ถูกดูดกลืน

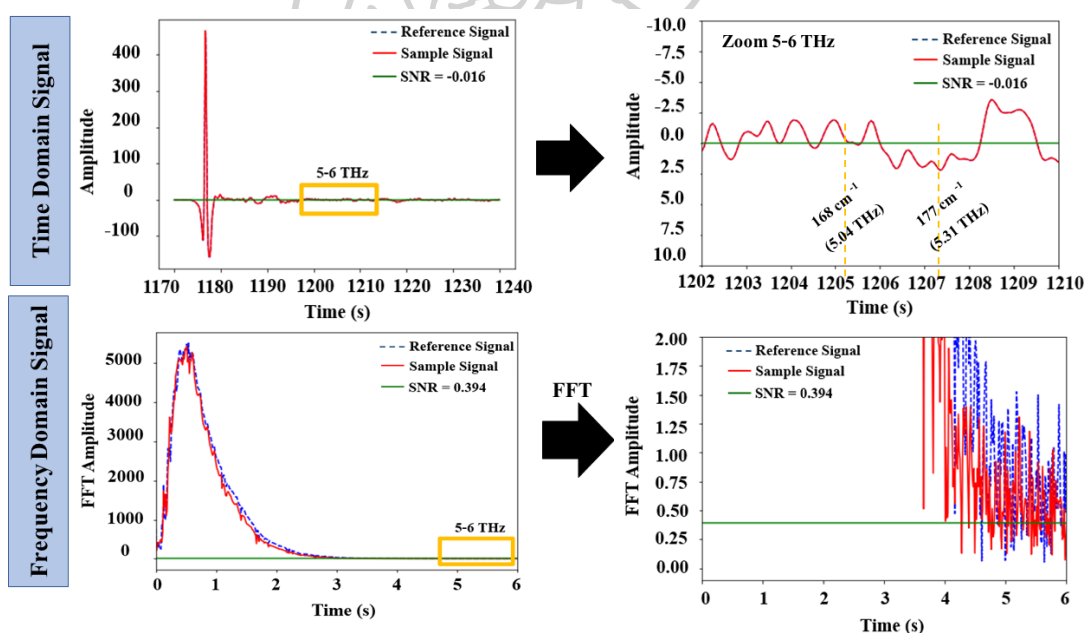
ในรูปที่ 34 แสดงการเปรียบเทียบระหว่างสเปกตรัมในย่านเทราเฮิร์ตซ์ ที่วัดจากตัวอย่างพัลส์บริสุทธิ์ที่ผสมกับโพลีเอทิลีน (PE) ในอัตราส่วน 4.5:25.5 มิลลิกรัม (15:85% w/w) กับสเปกตรัมของโพลีเอทิลีนบริสุทธิ์ ปริมาณ 100 มิลลิกรัม ที่ยังไม่ผ่านกระบวนการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้นจากการวิเคราะห์ในรูปนี้ พบว่าสเปกตรัมมีสัญญาณรบกวนที่สูง ซึ่งส่งผลกระทบต่อความสามารถในการแยกแยะพีคสำคัญได้ ข้อจำกัดนี้อาจเกิดจากเทคนิคการวัดที่ใช้หรือการรบกวนจากปัจจัยภายนอกเพื่อให้สามารถใช้ข้อมูลสเปกตรัมที่วัดได้ จึงจำเป็นต้องทำการวิเคราะห์ค่าอัตราส่วนสัญญาณต่อเสียงรบกวน (Signal-to-Noise Ratio; SNR) ซึ่งจะช่วยพิจารณาว่าค่าสัญญาณการดูดกลืนของตัวอย่างมีความชัดเจนเพียงใดเมื่อเทียบกับค่า noise ที่เกิดขึ้น



รูปที่ 34 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของพัลส์มาตรฐานก่อนทำการประมวลผลจากเครื่อง THz-TDS ในย่านเทราเฮิร์ตซ์

การวิเคราะห์อัตราส่วนสัญญาณต่อเสียงรบกวน (SNR) ของสเปกตรัมที่วัดจาก THz-TDS ในช่วงความถี่ 1-3 THz แสดงให้เห็นว่าในช่วงนี้มีค่า noise สูงและสัญญาณที่ได้มีแอมพลิจูดต่ำ ส่งผลให้ค่า SNR ในช่วงนี้ต่ำ ซึ่งบ่งชี้ถึงความสามารถที่จำกัดในการแยกแยะสัญญาณจาก noise ได้อย่างชัดเจน พบว่า พิกของสัญญาณตัวอย่างและสัญญาณอ้างอิงมีการทับซ้อนกัน ทำให้ไม่สามารถแยกความแตกต่างระหว่างพิกของสัญญาณได้อย่างชัดเจน

การทดลองก่อนหน้านี้ในช่วงย่านความถี่อินฟราเรดไกล (Far-IR) พบว่า บริเวณที่คาดว่าจะเกิดพิกชัดเจน ได้แก่ 168 cm^{-1} (ประมาณ 5.04 THz) และ 177 cm^{-1} (ประมาณ 5.31 THz) อย่างไรก็ตาม เมื่อวัดด้วยเทคนิค THz-TDS ในช่วงความถี่ 1-6 THz ไม่พบพิกที่ชัดเจน เนื่องจากพิกของตัวอย่างและสัญญาณอ้างอิงทับซ้อนกัน แสดงในรูปที่ 35 ส่งผลให้ค่า SNR ในบริเวณนี้ต่ำมาก ทำให้ไม่สามารถแยกแยะความแตกต่างระหว่างสัญญาณตัวอย่างและสัญญาณอ้างอิงได้อย่างมีประสิทธิภาพ ค่า SNR ต่ำที่พบทั้งในช่วงความถี่ 1-6 THz สะท้อนให้เห็นถึงข้อจำกัดของ THz-TDS ในการตรวจวัดพัลส์ การวิเคราะห์ในช่วงความถี่เหล่านี้จึงไม่เหมาะสมสำหรับตัวอย่างที่มีโครงสร้างหรือองค์ประกอบทางเคมีซับซ้อน เนื่องจากไม่สามารถแยกแยะพิกออกจาก noise ได้อย่างชัดเจน

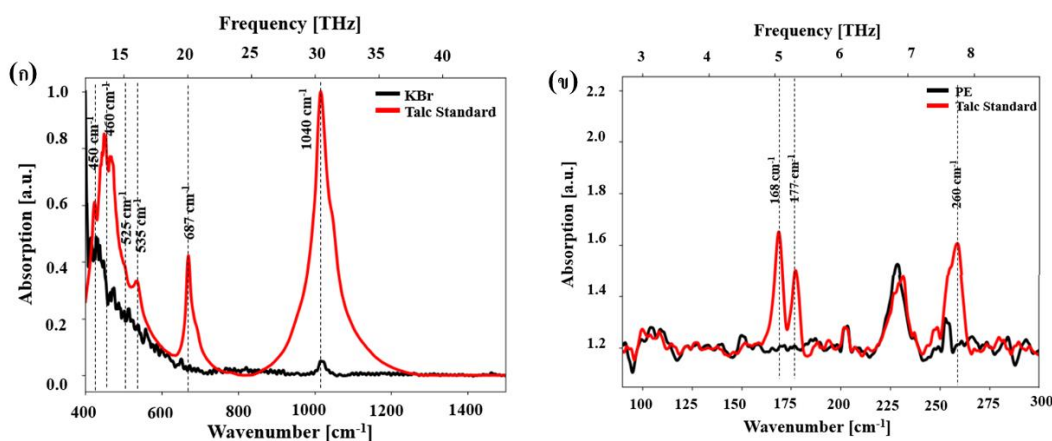


รูปที่ 35 การเปรียบเทียบสัญญาณตัวอย่างพัลส์มาตรฐานและสัญญาณอ้างอิงในโดเมนเวลาและความถี่ของการวัดด้วย THz-TDS

4.1.2 การวิเคราะห์คุณลักษณะสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis)

การทดลองในหัวข้อที่ 4.1.1 พบว่า การใช้ THz-TDS ไม่สามารถให้สเปกตรัมสำหรับใช้ในการวิเคราะห์ที่ล็กมาตรฐานได้ เนื่องจากเส้นสเปกตรัมการดูดกลืนแสงไม่สามารถให้ข้อมูลที่ชัดเจนเพียงพอในการแยกแยะความแตกต่างของทัลก์จากสารที่ใช้ผสม ด้วยข้อจำกัดนี้ จึงเลือกใช้เทคนิค Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ซึ่งสามารถให้ข้อมูลสเปกตรัมที่มีคุณภาพสูงและรายละเอียดที่ชัดเจนมากกว่า FT-IR สามารถวิเคราะห์ได้ทั้งย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far-IR) ซึ่งช่วยให้การวิเคราะห์ลักษณะเฉพาะของทัลก์ครอบคลุมและมีประสิทธิภาพมากยิ่งขึ้น

รูปที่ 36 แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนแสงเฉลี่ยของทัลก์มาตรฐานที่ผ่านการผสมกับสารผสมโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr) ในย่านอินฟราเรดกลาง (รูปที่ 36 (ก)) และโพลีเอทิลีน (PE) ในย่านอินฟราเรดไกล (รูปที่ 36 (ข)) จากรูปจะเห็นว่า ทัลก์มาตรฐานให้ผลสเปกตรัมที่แสดงยอดฟีก (Peaks) ในบริเวณเฉพาะ ซึ่งสอดคล้องกับการสั่นสะเทือนของพันธะในโครงสร้างของทัลก์



รูปที่ 36 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของทัลก์มาตรฐานกับสารผสมในย่าน (ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล

ในการวิเคราะห์องค์ประกอบที่เกี่ยวข้องกับทัลก์ การศึกษาลักษณะทางเคมีและโครงสร้างจึงเป็นสิ่งสำคัญ เนื่องจากทัลก์มีสูตรเคมีทางเคมี คือ $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ เป็นแร่ที่ประกอบด้วยธาตุแมกนีเซียม (Magnesium; Mg), ซิลิกอน (Silicon; Si), ออกซิเจน (Oxygen; O), และไฮโดรเจน (Hydrogen; H) โครงสร้างโมเลกุลของทัลก์นี้ทำให้สามารถตรวจจับและอธิบายการสั่นสะเทือนของพันธะในโมเลกุลได้ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโคปี รูปที่ 36(ก) แสดงสเปกตรัมเฉลี่ยของทัลก์มาตรฐานในย่านอินฟราเรดกลาง พบว่า พิกัดการดูดกลืนแสงที่บ่งบอกถึงการสั่นสะเทือนของพันธะในโมเลกุลที่เกี่ยวข้องกับทัลก์ โดยเฉพาะกลุ่มซิลิกอน (Si) และออกซิเจน (O) ซึ่งปรากฏที่ตำแหน่ง 450 cm^{-1} และ 460 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับพันธะ O-Si-O), 525 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับพันธะ Si-O) [70] และ $1,040\text{ cm}^{-1}$ (เกี่ยวข้องกับพันธะ Si-O-Si) นอกจากนี้ยังพบการสั่นสะเทือนที่เชื่อมโยงซิลิกอน (Si), ออกซิเจน (O), และแมกนีเซียม (Mg) ที่ตำแหน่ง 535 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับพันธะ Mg-O) และ 687 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับการสั่นสะเทือนของพันธะ Si-O-Mg) ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองที่ทำในย่านนี้จากงานวิจัยก่อนหน้า [72] [73] รูปที่ 36 (ข) แสดงสเปกตรัมเฉลี่ยในย่านอินฟราเรดไกล พิกัดที่เกิดขึ้นในตำแหน่งที่ต่างกันของสเปกตรัมนั้น สามารถอธิบายการยืดและการสั่นสะเทือนของอะตอมได้ โดยอาศัยการคำนวณทางทฤษฎีด้วยวิธีการ Density Functional Theory (DFT) สเปกตรัมของสารตัวอย่างที่มีส่วนผสมของทัลก์มาตรฐานจะปรากฏพิกัดดูดกลืนแสงอยู่ที่ประมาณบริเวณพิกัด 168 cm^{-1} , 177 cm^{-1} และ 260 cm^{-1} ที่แสดงถึงการสั่นสะเทือนของกลุ่มแมกนีเซียม (Mg) และออกไซด์ไฮดรอกไซด์ (OH) [67] รายละเอียดเกี่ยวกับตำแหน่งพิกัดของสเปกตรัมและความสัมพันธ์กับกลุ่มฟังก์ชันแสดงในตารางที่ 8

ตารางที่ 8 ตำแหน่งพิกัดของสเปกตรัมและความสัมพันธ์กับกลุ่มฟังก์ชัน

Region	Wavenumber (cm^{-1})	Assignment
อินฟราเรดกลาง (Mid-IR)	450, 460	O-Si-O bending
	525	Si-O bending
	535	Mg-O
	687	Si-O-Mg bond
	1040	Si-O-Si stretching
อินฟราเรดไกล (Far-IR)	168	Mg vibration
	177	O-H libration + lattice breathing
	260	Mg-(OH)

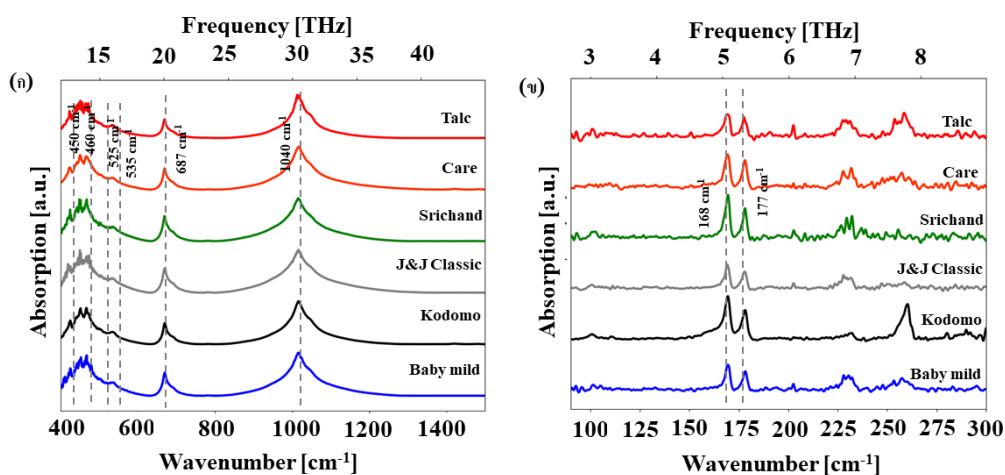
4.2 การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ (Qualitative Analysis): การพัฒนาแบบจำลองตรวจวัดและจำแนกการมีอยู่ของทัลก์ในผลิตภัณฑ์

จากการทดลองก่อนหน้านี้ในหัวข้อที่ 4.1 ซึ่งได้ทำการทดลองกับทัลก์มาตรฐานและพบผลลัพธ์ที่ดี มีแนวโน้มที่จะสามารถใช้ในการตรวจวัดการมีอยู่ของทัลก์ได้ จึงนำแนวทางดังกล่าวมาทดลองกับผลิตภัณฑ์ที่ขายตามท้องตลาดจริง โดยใช้เครื่อง FT-IR ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far-IR) เพื่อใช้ในการตรวจวัดการมีทัลก์และจำแนกระหว่างผลิตภัณฑ์แบ่งที่มีทัลก์และไม่มีทัลก์ได้

4.2.1 การวิเคราะห์คุณลักษณะสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis) ของผลิตภัณฑ์แบ่งเด็กและแบ่งสำหรับบริโภค

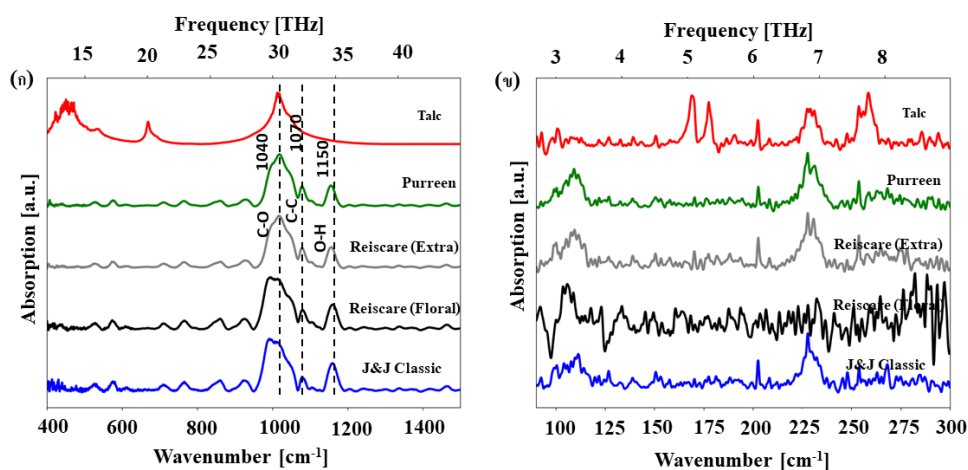
1) ผลิตภัณฑ์แบ่งสำหรับเด็ก

สเปกตรัมการดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แบ่งสำหรับเด็ก โดยมีทั้งสูตรที่มีส่วนผสมของทัลก์ (จำนวน 5 แบรินด์) และสูตรไม่มีทัลก์ (จำนวน 4 แบรินด์) รูปที่ 37 สเปกตรัมที่วัดได้ทั้งในย่านอินฟราเรดกลาง (รูปที่ 37 (ก)) และย่านอินฟราเรดไกล (รูปที่ 37 (ข)) ของผลิตภัณฑ์แบ่งสำหรับเด็กสูตรมีส่วนผสมของทัลก์ สเปกตรัมที่ได้จะเกิดพีคการดูดกลืนที่ตรงกับสเปกตรัมของทัลก์ [67, 70-72] ซึ่งสามารถสังเกตได้อย่างชัดเจน ทำให้สามารถแยกแยะได้ว่าผลิตภัณฑ์เหล่านี้มีการใช้ทัลก์เป็นส่วนประกอบหลัก



รูปที่ 37 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แบ่งสำหรับเด็กสูตรทัลก์ในย่านการวัด (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล

รูปที่ 38 (ก) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่ไม่มีทัลก์ ในย่านอินฟราเรดกลาง ยอดพีการดูดกลืนที่แตกต่างจากทัลก์บริสุทธิ์สามารถสังเกตด้วยตาเปล่าได้ชัดเจน อย่างไรก็ตาม รูปดังกล่าวสังเกตพีการดูดกลืนในช่วงบริเวณ $900\text{--}1,200\text{ cm}^{-1}$ โดยพีคที่เกิดขึ้นในตำแหน่งเลขคลื่นประมาณ $1,040\text{ cm}^{-1}$, $1,070\text{ cm}^{-1}$ และ $1,150\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งไม่ตรงกับพีคที่เกิดขึ้นในสเปกตรัมของทัลก์บริสุทธิ์ ซึ่งผู้วิจัยสันนิษฐานว่าอาจเกิดจากแป้งฝุ่นเหล่านี้ถูกผลิตมาจากแป้งที่มาจากพืช ซึ่งมีองค์ประกอบหลักเป็นคาร์โบไฮเดรตที่เป็นลักษณะเฉพาะของแป้งที่มาจากพืช [74] แม้ในบริเวณ $1,040\text{ cm}^{-1}$ พีคที่เกิดขึ้นจะทับซ้อนกับพีคที่เกิดจากทัลก์บริสุทธิ์ แต่ก็ไม่ได้มีความเกี่ยวข้องกับการมีอยู่ของทัลก์ รูปที่ 38 (ข) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่ไม่มีทัลก์ ในย่านอินฟราเรดไกลนั้นสเปกตรัมกลับไม่แสดงยอดพีการดูดกลืนใดในบริเวณเดียวกับทัลก์มาตรฐาน พีคที่โดดเด่น ได้แก่ ในบริเวณ 168 cm^{-1} และ 177 cm^{-1} ไม่แสดงพีการดูดกลืนที่ตรงกับเลขคลื่นเฉพาะของทัลก์ในช่วงนี้ ทำให้สามารถแยกแยะระหว่างแป้งฝุ่นที่มีทัลก์และแป้งฝุ่นที่ไม่มีทัลก์ได้

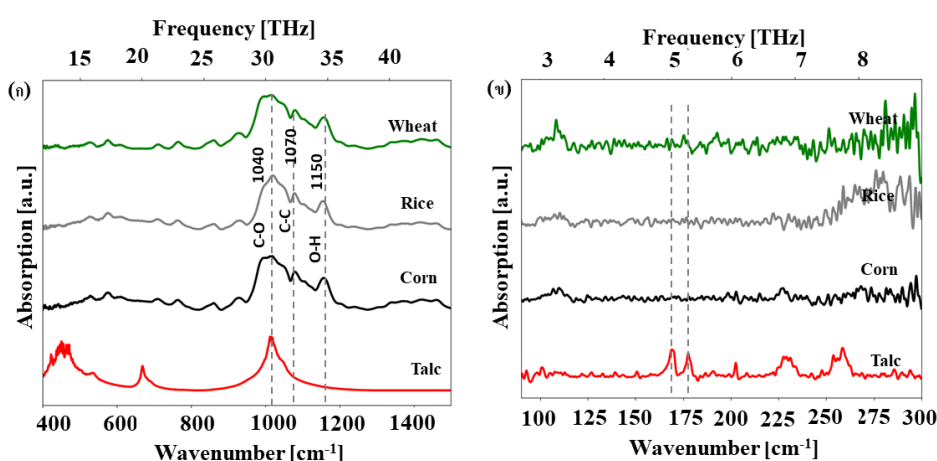


รูปที่ 38 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กสูตรไม่มีทัลก์ในย่าน (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล

2) ผลิตรัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภคน

รูปที่ 39 (ก) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนเฉลี่ยของผลิตรัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภคน 3 ชนิดที่มีการใช้อย่างแพร่หลายมากที่สุด ได้แก่ แป้งสาลี, แป้งข้าวเจ้า, และแป้งข้าวโพด จากรูปพบว่า ในย่านอินฟราเรดกลางจะพบการดูดกลืนในช่วงบริเวณ $900\text{--}1,200\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งอาจเกิดจากแป้งจากพืชที่มีส่วนประกอบหลักเป็นอะไมโลส (Amylose) และอะไมโลเพคติน (Amylopectin) ซึ่งทั้งสองเป็นโพลีแซ็กคาไรด์ (Polysaccharide) ที่ประกอบด้วยหน่วยย่อยของกลูโคส (Glucose) ที่มีสูตรทางเคมีคือ $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5$ โดยทั่วไปแป้งที่มาจากพืชที่จะมีการสั่นสะเทือนแบบโค้งงอของกลุ่ม คาร์บอน-ออกซิเจน (Carbon-Oxygen; C-O) คาร์บอน-คาร์บอน (Carbon-Carbon; C-C) และ ออกซิเจน-ไฮโดรเจน (Oxygen-Hydrogen; OH) ของคาร์โบไฮเดรตในบริเวณอะโนเมอร์ที่เลขคลื่นประมาณ $1,040\text{ cm}^{-1}$, $1,070\text{ cm}^{-1}$ และ $1,150\text{ cm}^{-1}$ ตามลำดับ [74] ไม่ใช่การมีอยู่ของทาลค์แต่สเปกตรัมเหล่านี้เป็นลักษณะเฉพาะของส่วนประกอบทางเคมีในแป้งที่มาจากพืชเท่านั้น

รูปที่ 39 (ข) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนของผลิตรัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภคนในย่านอินฟราเรดไกล โดยสเปกตรัมไม่แสดงยอดพิกการดูดกลืนในบริเวณเดียวกับทาลค์บริสุทธิ์ (บริเวณ 168 cm^{-1} และ 177 cm^{-1}) ซึ่งเป็นพื้นที่ที่ทาลค์มีการดูดกลืนของแสง อย่างไรก็ตาม สเปกตรัมในบริเวณอื่นๆ ยังแสดงความแตกต่างระหว่างผลิตรัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีและไม่มีทาลค์

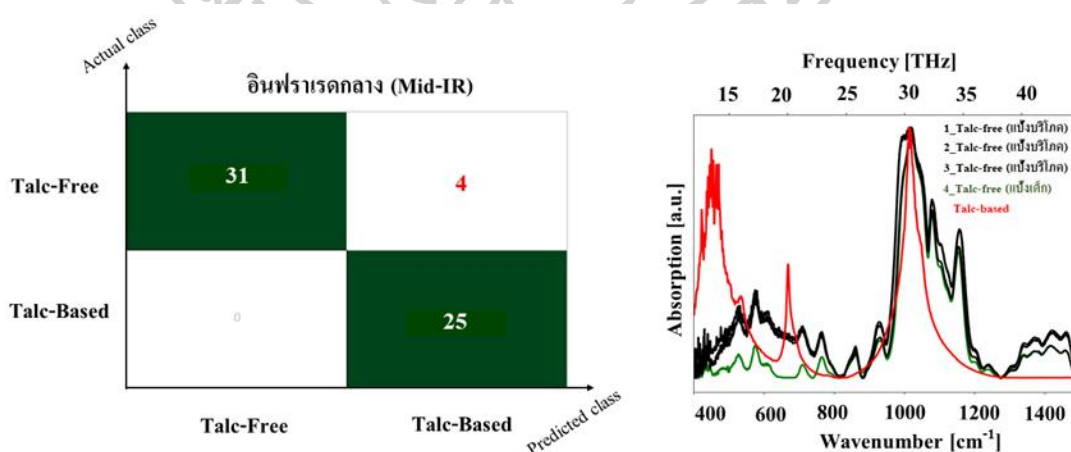


รูปที่ 39 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตรัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภคนในย่านการวัด (ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล

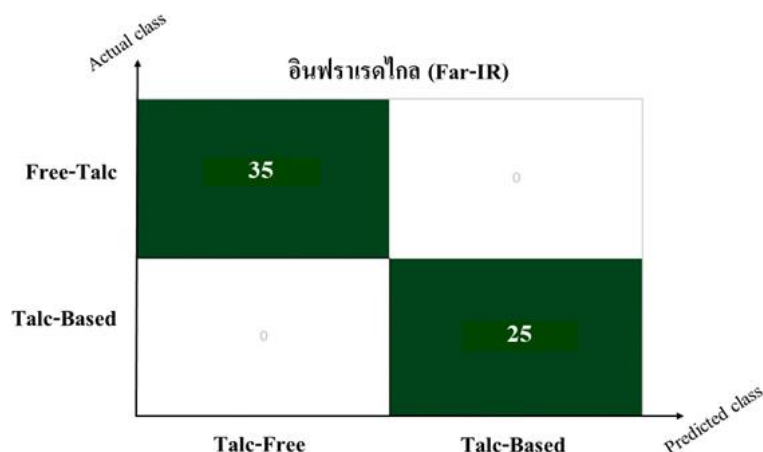
4.2.2 การนำแบบจำลองมาใช้ในการตรวจวัดทัลก์ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโศค

แบบจำลอง Extra Trees Classifier ที่ได้สร้างขึ้นสำหรับจำแนกระหว่างผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีและไม่มีทัลก์ เราใช้ตัวอย่างสเปกตรัมทั้งหมด 60 สเปกตรัม (มีทัลก์ 25 สเปกตรัมและไม่มีทัลก์ 35 สเปกตรัม) ที่ได้มาจากผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและสำหรับบริโศคมาเป็นข้อมูลชุดทดสอบ โดยตัวอย่างแบ่งออกเป็น ผลิตภัณฑ์แป้งเด็ก 45 สเปกตรัม (สูตรที่มีทัลก์ 25 สเปกตรัมและไม่มีทัลก์ 20 สเปกตรัม) และผลิตภัณฑ์แป้งบริโศคที่ไม่มีทัลก์ 15 สเปกตรัม

ผลการวิเคราะห์ พบว่า ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) นั้นมีข้อบกพร่องในการจำแนก เนื่องจากการทำนายแป้งสำหรับบริโศคที่ไม่มีทัลก์ว่ามีทัลก์จำนวน 4 สเปกตรัม (แป้งฝุ่นเด็ก 1 สเปกตรัมและแป้งฝุ่นสำหรับบริโศค 3 สเปกตรัม) ส่งผลให้ความแม่นยำลดลงอยู่ที่ 93.33% แสดงดังรูปที่ 40 ทางด้านอินฟราเรดไกล (Far-IR) แบบจำลองมีแนวโน้มที่จะใช้ในการแยกแยะผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีทัลก์และไม่มีทัลก์ได้ โดยสามารถจำแนกได้อย่างแม่นยำถึง 100% แสดงดังรูปที่ 41 เนื่องจากการดูดกลืนในย่านนี้มีค่าความชัดเจนและพีคที่เกิดขึ้นนั้นไม่ซับซ้อน ส่งผลให้การแยกแยะเป็นไปได้ง่ายผลลัพธ์เหล่านี้แสดงให้เห็นว่าแบบจำลอง Extra Trees Classifier ที่ได้สร้างขึ้นนี้มีความสามารถในการจำแนกผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโศคที่มีทัลก์และไม่มีทัลก์ในทั้งสองย่านการวัด ความสามารถในการตรวจจับพิศการดูดกลืนที่เฉพาะเจาะจงของทัลก์ในสเปกตรัมของผลิตภัณฑ์ ชี้ให้เห็นว่าโมเดลสามารถแยกแยะทัลก์ได้แม้มีส่วนผสมอื่นๆ ที่ซับซ้อนในผลิตภัณฑ์



รูปที่ 40 ผลการจำแนกการมีอยู่ของทัลก์ในแป้งสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโศคผ่านการสร้าง confusion matrix โดยใช้แบบจำลอง Extra Trees Classifier ในย่านการวัดอินฟราเรดกลาง



รูปที่ 41 ผลการจำแนกการมีอยู่ของทัลกในแป้งสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภคผ่านการสร้าง confusion matrix โดยใช้โมเดล Extra Trees Classifier ในย่านการวัดอินฟราเรดไกล

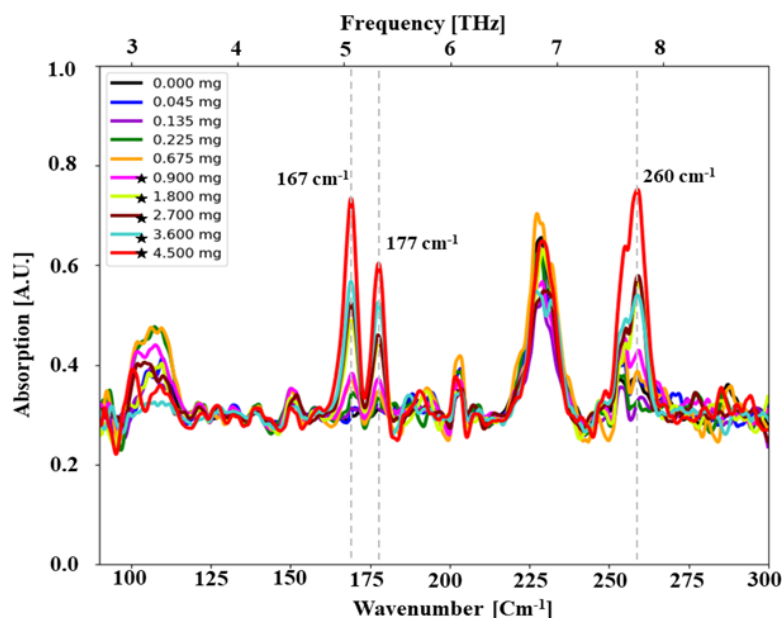
4.3 การวิเคราะห์เชิงปริมาณ (Quantitative Analysis): การพัฒนาแบบจำลองสำหรับทำนายปริมาณทัลกในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นเด็กโดยใช้ข้อมูลจากทัลกมาตรฐาน

ผลการทดลองในหัวข้อ 4.1 และ 4.2 แสดงให้เห็นว่าสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) ให้ผลการดูดกลืนที่เด่นชัด ซึ่งทำให้การวิเคราะห์การเคลื่อนไหวของโครงสร้างที่เกี่ยวข้องกับทัลกเป็นไปได้ง่าย พร้อมทั้งมีประสิทธิภาพสูงในการจำแนกการมีทัลกในผลิตภัณฑ์ อย่างไรก็ตาม ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) พบว่าพื้นที่ที่เกี่ยวข้องกับทัลกตอบสนองต่อคลื่นในบริเวณนี้ได้ดีเช่นกัน และยังสามารถอธิบายโครงสร้างภายในของทัลกได้ แต่ความซับซ้อนของการตีความสเปกตรัมเพิ่มขึ้นเนื่องจากย่านนี้ครอบคลุมการสั่นสะเทือนของพันธะหลายประเภทในช่วงเลขคลื่นที่ทำการวัด ส่งผลให้เกิดพิชซ้อนกัน ซึ่งทำให้การวิเคราะห์ข้อมูลมีความยากลำบากมากขึ้น รวมถึงการใช้ THz-TDS ที่มีข้อจำกัดจากสัญญาณรบกวนที่สูง จึงทำให้ยากต่อการทดลองและวิเคราะห์ผล

จากผลการทดลองพบว่าสามารถตรวจวัดการมีทัลกในผลิตภัณฑ์จากสเปกตรัมได้ ซึ่งสร้างความสนใจในการใช้เครื่อง FT-IR โดยเน้นที่ย่าน Far-IR เพื่อศึกษาความเข้มข้นของทัลกในผลิตภัณฑ์ การใช้ข้อมูลสเปกตรัมที่เก็บได้ช่วยในการประเมินและตรวจสอบความเข้มข้นของทัลกในผลิตภัณฑ์ต่างๆ ได้ สำหรับการวิเคราะห์เชิงปริมาณจะเน้นการวัดและเปรียบเทียบความเข้มข้นของปริมาณทัลกในตัวอย่าง โดยใช้ทัลกมาตรฐานที่มีความบริสุทธิ์ > 95% เป็นตัวปรับเทียบ (Calibration) เพื่อใช้เป็นอ้างอิงในการเปรียบเทียบและตรวจสอบความเข้มข้นของทัลกในผลิตภัณฑ์ที่ศึกษา

4.3.1 การวิเคราะห์สเปกตรัมของตัวอย่างทัลก์มาตรฐานในความเข้มข้นที่หลากหลาย

จากการทดลองเชิงคุณภาพในหัวข้อ 4.1 จะเห็นได้ว่าตัวอย่างสารถูกเตรียมโดยการผสมทัลก์บริสุทธิ์กับโพลีเอทิลีน (PE) อัตราส่วน 4.5 : 25.5 มิลลิกรัม (15:85 w/w) และทำการวัดสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดไกล โดยเปรียบเทียบกับสเปกตรัมของโพลีเอทิลีนบริสุทธิ์ ปริมาณ 30 มิลลิกรัม ผลการทดลองพบว่าตำแหน่งพีคที่ปรากฏในตัวอย่างผสมทัลก์สามารถบ่งบอกถึงการยืดและการสั่นสะเทือนของอะตอมได้อย่างชัดเจน โดยเฉพาะพีคที่ 167 cm^{-1} , 177 cm^{-1} และ 260 cm^{-1} ซึ่งแสดงถึงการเคลื่อนไหวของโครงสร้างที่เกี่ยวข้องกับทัลก์ [71] เมื่อสังเกตเห็นความแตกต่างของพีคที่เกี่ยวข้องกับทัลก์ในตัวอย่างที่มีการผสมในปริมาณเริ่มต้น ผู้วิจัยจึงได้ทดสอบการผสมทัลก์ในปริมาณที่แตกต่างกัน ตั้งแต่ 0 – 4.5 มิลลิกรัม (15% w/w) เพื่อให้สามารถทำนายปริมาณของทัลก์จากสเปกตรัมได้ ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่วัดจากตัวอย่างทั้งสิ้น 19 ตัวอย่าง ที่มีปริมาณทัลก์ต่างกัน ตัวอย่างมี 10 สเปกตรัม (รวมทั้งหมด 190 สเปกตรัม) เพื่อศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณทัลก์และความสูงของพีคในสเปกตรัม แสดงในรูปที่ 42 แสดงให้เห็นว่า พีคที่เกี่ยวข้องกับทัลก์จะเริ่มปรากฏชัดขึ้นเมื่อมีปริมาณทัลก์มากกว่า 0.9 มิลลิกรัม (3%) และความสูงของพีคจะเพิ่มขึ้นตามปริมาณของทัลก์ที่เพิ่มขึ้น ซึ่งแสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของทัลก์และความสูงของพีคในสเปกตรัม



รูปที่ 42 ตัวอย่างสเปกตรัมการดูดกลืนแสงในย่านอินฟราเรดไกลของตัวอย่างทัลก์มาตรฐานที่ผสมใน
ความเข้มข้นต่างๆ

4.3.2 กระบวนการประมวลผลเบื้องต้นของข้อมูลสเปกตรัม (Spectral Pre-processing Data)

ก่อนเข้าสู่กระบวนการทำ Machine Learning ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดได้รับการประมวลผลล่วงหน้า (Pre-processing) เพื่อให้ได้ข้อมูลที่สะอาดและมีคุณภาพสูงที่สุด ขั้นตอนการประมวลผลล่วงหน้านี้ประกอบด้วย การปรับให้เรียบ (Smoothing Signal) การปรับเส้นฐาน (Baseline Removal) การปรับสเกลข้อมูลในช่วงระหว่างค่าสูงสุด-ค่าต่ำสุด (Max-min Scaling) และการตัดสเปกตรัม (Spectral Cropping) ซึ่งรายละเอียดอยู่ในหัวข้อที่ 2.8 หลังจากขั้นตอนการประมวลผลล่วงหน้า ข้อมูลสเปกตรัมจำนวน 95 สเปกตรัม (คิดเป็น 50% ของข้อมูลทั้งหมด) ถูกนำมาใช้ในการฝึกอบรมและทดสอบโมเดล Machine Learning การประมวลผลล่วงหน้าเหล่านี้ไม่เพียงแต่ลดสัญญาณรบกวนและปรับปรุงคุณภาพของข้อมูล แต่ยังช่วยเพิ่มประสิทธิภาพของโมเดลในการทำนายความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่าง ทำให้โมเดลสามารถสร้างความสัมพันธ์ระหว่างสเปกตรัมกับความเข้มข้นของทัลก์ได้อย่างแม่นยำมากยิ่งขึ้น

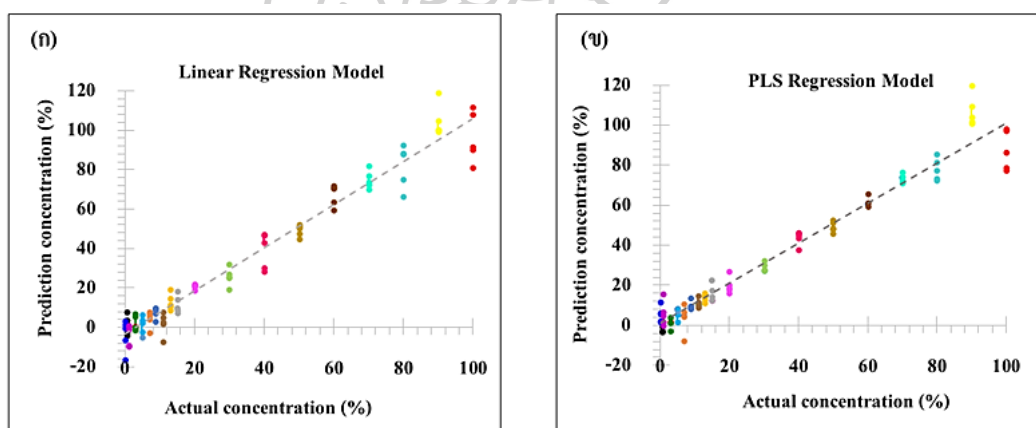
4.3.3 การสร้างแบบจำลองทำนายความเข้มข้นของทัลก์มาตรฐาน (Modeling for Concentration Prediction)

ในการสร้างแบบจำลองทำนายความเข้มข้นของทัลก์ โดยใช้สเปกตรัมทั้งหมด 95 สเปกตรัม (50% ของข้อมูลทั้งหมด) ในการฝึกฝน เราได้พัฒนาแบบจำลองสองประเภท คือ Linear Regression และ Partial Least Squares (PLS) Regression ซึ่งแบบจำลองทั้งสองได้ถูกประเมินประสิทธิภาพผ่านตัวชี้วัดต่างๆ ที่แสดงถึงค่าความถูกต้องในการทำนาย ตารางที่ 9 จากผลการทดสอบการทำนายปริมาณทัลก์โดยใช้สเปกตรัมในชุดข้อมูลฝึกสอน (Training dataset) พบว่าแบบจำลอง Linear Regression ให้ค่า R-squared (R^2) , Root Mean Squared Error (RMSE), และ Mean Absolute Error (MAE) อยู่ที่ 1.00 , 0.28 และ 0.23 ตามลำดับ และสำหรับสเปกตรัมในชุดข้อมูลทดสอบ (Test dataset) ค่าเหล่านั้นจะอยู่ที่ 0.94, 0.34 และ 0.26 ตามลำดับ สำหรับแบบจำลอง PLS กลับให้ผลลัพธ์ที่ดีกว่าโมเดล Linear Regression ในการทำนาย โดยผลการทดสอบการทำนายปริมาณทัลก์โดยใช้สเปกตรัมในชุดข้อมูลฝึกสอน (Training dataset) พบว่า แบบจำลอง Linear Regression ให้ค่า R-squared (R^2), Root Mean Squared Error (RMSE) และ Mean Absolute Error (MAE) อยู่ที่ 0.98 , 0.20 และ 0.16 ตามลำดับ และสำหรับสเปกตรัมในชุดข้อมูลทดสอบ (Test dataset) ค่าเหล่านั้นจะอยู่ที่ 0.96, 0.30 และ 0.19 ตามลำดับ

ตารางที่ 9 ผลการทดสอบความแม่นยำของแบบจำลอง Linear Regression และ PLS Regression

Model	Train Dataset			Test Dataset		
	R^2	RMSE	MAE	R^2	RMSE	MAE
Linear Regression	1.00	0.28	0.23	0.94	0.34	0.26
PLS Regression	0.98	0.20	0.16	0.96	0.30	0.19

การที่แบบจำลอง PLS มีความแม่นยำในการทำนายมากกว่าแบบจำลอง Linear Regression เนื่องจาก PLS Regression ทำให้ข้อมูลการทำนาย (Predict value) มีค่าใกล้เคียงกับค่าจริง (Actual value) มากขึ้น สามารถในการลดจำนวนมิติของข้อมูล (Dimensionality Reduction) ทำให้ข้อมูลที่ไม่มีความสำคัญถูกตัดออกไป และทำให้ช่วยลดการเกิด Overfitting โดยเฉพาะในกรณีที่มีข้อมูลจำนวนไม่มาก ดังนั้น แบบจำลอง PLS Regression จึงมีความเหมาะสมกับข้อมูลในลักษณะนี้มากกว่าแสดงในรูปที่ 43

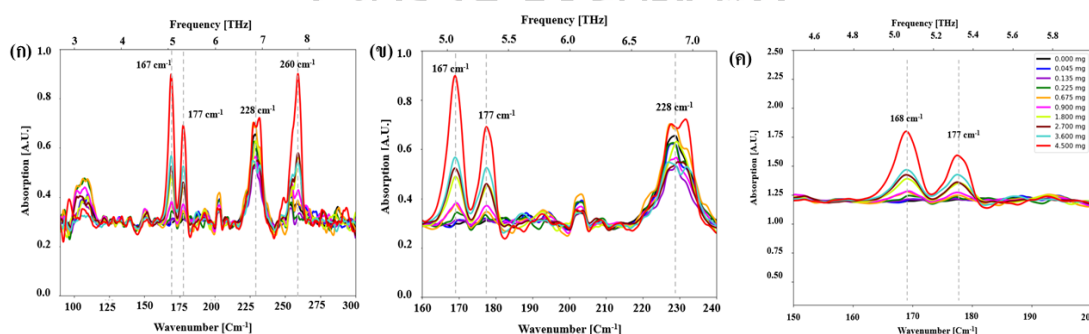


รูปที่ 43 การเปรียบเทียบแบบจำลอง (ก) Linear Regression กับ (ข) โมเดล PLS Regression ในการทำนายความเข้มข้นของตัลค์มาตรฐาน

4.3.4 การปรับปรุงแบบจำลอง PLS Regression สำหรับการทำนายความเข้มข้นของทัลก์โดยใช้การเลือกช่วงเลขคลื่น (Feature Selection) และคุณลักษณะที่สำคัญ (Feature Importance)

1) การเลือกช่วงเลขคลื่น (Feature Selection)

ในการปรับปรุงแบบจำลอง เราได้ทำการสร้างแบบจำลอง PLS ขึ้นใหม่อีกครั้งโดยใช้ชุดข้อมูลเดิมโดยเริ่มต้นจากการเลือกช่วงเลขคลื่นที่สำคัญ (Feature Selection) การเลือกช่วงเลขคลื่นที่นี้ทำให้เราสามารถลดความซับซ้อนของโมเดลและเพิ่มความแม่นยำในการทำนายได้ เราจึงสร้างแบบจำลอง PLS โดยใช้ช่วงเลขคลื่นที่ครอบคลุมตั้งแต่ช่วง $90\text{-}300\text{ cm}^{-1}$ รูปที่ 44(ก-ค) แสดงการแบ่งเลขคลื่นออกเป็น 3 ช่วงเพื่อใช้สร้างแบบจำลอง ได้แก่ 1. ช่วงเลขคลื่น $90\text{-}300\text{ cm}^{-1}$ 2. ช่วงเลขคลื่น $160\text{-}240\text{ cm}^{-1}$ และ 3. ช่วงเลขคลื่น $160\text{-}180\text{ cm}^{-1}$ การสร้างแบบจำลองในแต่ละช่วงให้จำนวนพีคที่แตกต่างกันสำหรับการวิเคราะห์



รูปที่ 44 การเลือกช่วงคลื่นที่แตกต่างกันเพื่อปรับปรุงประสิทธิภาพในการสร้างโมเดลทำนายปริมาณทัลก์มาตรฐาน (ก) ช่วงเลขคลื่น $90\text{-}300\text{ cm}^{-1}$ (ข) ช่วงเลขคลื่น $160\text{-}240\text{ cm}^{-1}$ และ (ค) ช่วงเลขคลื่น $160\text{-}180\text{ cm}^{-1}$

ตารางที่ 10 แสดงผลการเปรียบเทียบค่าความถูกต้องในการทำนายบนชุดข้อมูลการฝึกและทดสอบของแบบจำลอง PLS ที่สร้างขึ้นจากช่วงเลขคลื่นที่แตกต่างกัน พบว่าบริเวณเลขคลื่น $160\text{-}180\text{ cm}^{-1}$ ปรับจำนวนของ component ให้เท่ากับ 6 เป็นช่วงที่ให้ผลลัพธ์ที่ดีที่สุด โมเดลสามารถอธิบายความแปรปรวนของข้อมูลได้ดี โดยประเมินประสิทธิภาพของโมเดลผ่านตัวชี้วัดหลัก เช่น ค่า R-squared (R^2), Root Mean Squared Error (RMSE), และ Mean Absolute Error (MAE) เพื่อเปรียบเทียบค่าที่ได้จากข้อมูลฝึกสอน (Train Dataset) และข้อมูลทดสอบ (Test Dataset) จากผลลัพธ์การทดสอบ พบว่าแบบจำลอง PLS Regression (component = 6) ให้ค่า R-squared (R^2), Root Mean Squared Error (RMSE) และ Mean Absolute Error (MAE) ผ่านชุดข้อมูลการฝึกสอน

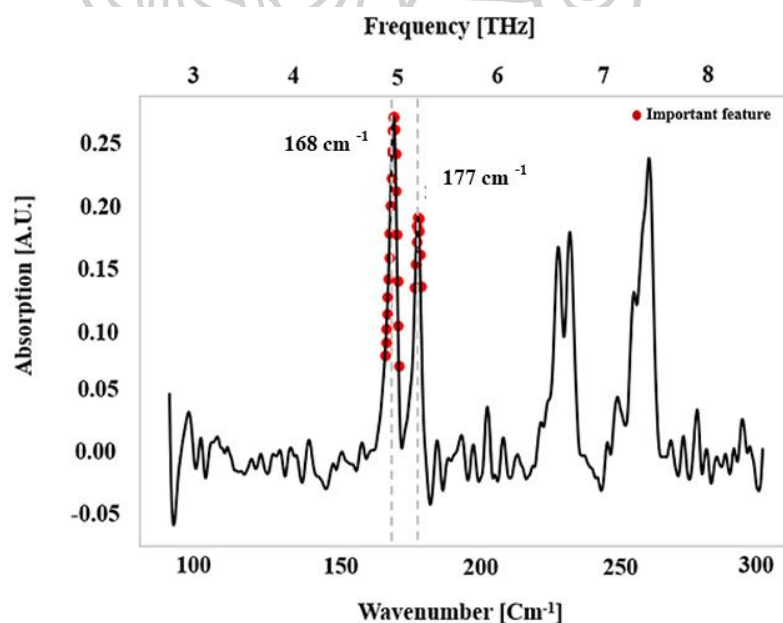
สูงถึง 0.99, 0.16 และ 0.12 ตามลำดับ สิ่งนี้สะท้อนให้เห็นว่าแบบจำลองมีความแม่นยำในการทำนาย และไม่เกิดปัญหา overfitting อย่างมีนัยสำคัญ สำหรับข้อมูลทดสอบ ค่ายังคงอยู่ในระดับที่สูงอยู่ที่ 0.97, 0.23 และ 0.18 ตามลำดับ แม้ว่าค่า RMSE และ MAE อาจเพิ่มขึ้นเล็กน้อยเมื่อเทียบกับข้อมูลฝึกสอน ซึ่งเป็นเรื่องปกติที่โมเดลอาจมีประสิทธิภาพที่ลดลงเมื่อทดสอบกับข้อมูลใหม่ แต่ค่าความคลาดเคลื่อนที่เพิ่มขึ้นยังอยู่ในระดับที่ยอมรับได้ ซึ่งแสดงถึงความแม่นยำในการทำนายของโมเดลค่อนข้างดี ดังนั้น ประสิทธิภาพการสร้างแบบจำลอง PLS Regression ได้รับการปรับปรุงโดยใช้ช่วงเลขคลื่นบริเวณ $160\text{-}180\text{ cm}^{-1}$ การเลือกเลขคลื่นพร้อมทั้งปรับจำนวน component ที่เหมาะสมและลบคุณลักษณะที่ไม่เกี่ยวข้องออก จะช่วยเพิ่มประสิทธิภาพของแบบจำลองเพื่อนำไปใช้ตรวจวัดทัลก์ที่มีอยู่ในผลิตภัณฑ์ได้รวดเร็วและแม่นยำขึ้น

ตารางที่ 10 การประเมินประสิทธิภาพของโมเดล PLS Regression ในการทำนายความเข้มข้นของทัลก์มาตรฐานที่สร้างจากช่วงเลขคลื่นต่างๆ

Model	Wavenumber (cm^{-1})	Train Dataset			Test Dataset		
		R^2	RMSE	MAE	R^2	RMSE	MAE
PLS (n=2)	90-300	0.98	0.20	0.16	0.96	0.30	0.19
PLS (n=2)	160-240	0.98	0.22	0.16	0.97	0.25	0.19
PLS (n=6)	160-180	0.99	0.16	0.12	0.97	0.23	0.18

2) การเลือกคุณลักษณะที่สำคัญ (Feature Importance)

เพื่อเป็นการยืนยันความสัมพันธ์ระหว่างลักษณะของพีคการดูดกลืนในสเปกตรัมและความเข้มข้นของทัลก์เราได้ทำการวิเคราะห์คุณลักษณะที่สำคัญ โดยใช้แบบจำลอง PLS Regression ผลการวิเคราะห์แสดงว่า ช่วงเลขคลื่น $160\text{--}180\text{ cm}^{-1}$ มีความสำคัญสูงสุดสำหรับการทำนายความเข้มข้น แสดงในรูปที่ 45 แสดงการดึงข้อมูลจากพีเจอร์ที่มีความสำคัญสูงสุด 30 จุดแรก พบว่าช่วงเลขคลื่นระหว่าง $160\text{--}180\text{ cm}^{-1}$ เป็นช่วงที่มีผลต่อการทำนายของโมเดลอย่างมีนัยสำคัญ การเลือกใช้ช่วงเลขคลื่นนี้ช่วยลดความซับซ้อนของโมเดลและเพิ่มความแม่นยำในการทำนาย นอกจากนี้ พีคที่ตำแหน่งเลขคลื่น 260 cm^{-1} กลับไม่มีค่าความสำคัญสูงเนื่องจากการแยกความแตกต่างระหว่างพีคของทัลก์กับโพลีเอทิลีน (PE) ทำได้ยากในบริเวณนี้ พีคในบริเวณนี้แสดงความแตกต่างชัดเจนก็ต่อเมื่อความเข้มข้นของทัลก์มากกว่า 2.7 มิลลิกรัม (60%) หากความเข้มข้นต่ำกว่านี้ สเปกตรัมอาจซ้อนทับกับพีคของ PE ทำให้การวิเคราะห์ผิดพลาดได้ ดังนั้น การเลือกใช้ช่วงเลขคลื่นที่เหมาะสมและการลบคุณลักษณะที่ไม่เกี่ยวข้องออก ช่วยปรับปรุงประสิทธิภาพของแบบจำลอง PLS ให้สามารถตรวจจับทัลก์ในผลิตภัณฑ์แบ่งฝุ่นได้อย่างรวดเร็วและแม่นยำมากยิ่งขึ้น การเปรียบเทียบประสิทธิภาพหลังการเลือกช่วงเลขคลื่นได้ยืนยันว่า ช่วง $160\text{--}180\text{ cm}^{-1}$ เป็นช่วงที่มีประสิทธิภาพสูงสุดในการทำนายความเข้มข้นของทัลก์



รูปที่ 45 ข้อมูลจากพีเจอร์ที่มีความสำคัญสูงสุด 30 จุดแรกในช่วงเลขคลื่นที่มีผลต่อแบบจำลอง PLS Regression สำหรับทำนายปริมาณทัลก์มาตรฐาน

4.3.5 การประเมินความแม่นยำในการทำนายความเข้มข้นของทัลก์มาตรฐานด้วย

แบบจำลอง PLS Regression

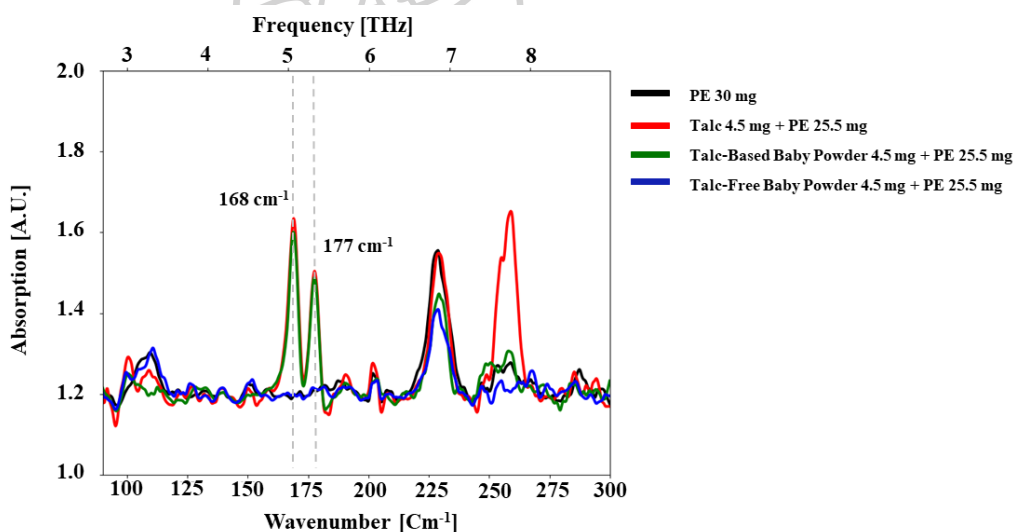
ในการทดสอบการทำนายความเข้มข้นของทัลก์ เราใช้ข้อมูลทดสอบจำนวน 95 สเปกตรัม (50% ของข้อมูลทั้งหมด) ซึ่งครอบคลุมความเข้มข้นทัลก์ในระดับต่างๆ โดยใช้แบบจำลอง PLS Regression ที่ปรับปรุงด้วยจำนวนองค์ประกอบหลัก (components) จำนวน 6 องค์ประกอบ ผลลัพธ์ที่ได้แสดงในตารางที่ 11 ซึ่งเปรียบเทียบค่าความเข้มข้นจริง (Real Concentration) กับค่าความเข้มข้นที่โมเดลทำนายได้ (Predicted Concentration) รวมถึงค่าความผิดพลาดเชิงสัมบูรณ์ (Absolute Error) จากผลลัพธ์ พบว่าในช่วงความเข้มข้นต่ำ (0.5% ถึง 3%) โมเดลมีความผิดพลาดเชิงสัมบูรณ์ค่อนข้างสูง เช่น ที่ความเข้มข้น 0.5% โมเดลทำนายได้ -0.8030% ทำให้เกิดความผิดพลาดเชิงสัมบูรณ์ถึง 1.30% และมีค่าความผิดพลาดเชิงสัมพัทธ์สูงถึง 260.60% อย่างไรก็ตาม เมื่อความเข้มข้นเพิ่มขึ้น (5% ถึง 30%) ความแม่นยำของโมเดลดีขึ้นอย่างชัดเจน เช่น ที่ความเข้มข้น 9% โมเดลทำนายได้ 9.9871% ค่าความผิดพลาดเชิงสัมบูรณ์เพียง 0.99% และค่าความผิดพลาดเชิงสัมพัทธ์ 10.97% โดยเฉพาะในช่วงความเข้มข้นสูง เช่น ที่ความเข้มข้น 30% โมเดลทำนายได้ 27.1427% ความผิดพลาดเชิงสัมบูรณ์ลดลงเหลือ 2.86% และค่าความผิดพลาดเชิงสัมพัทธ์ลดลงไปที่ 9.52% ซึ่งแสดงว่าโมเดลมีความสามารถในการทำนายความเข้มข้นได้แม่นยำมากขึ้นในช่วงความเข้มข้นสูง จากข้อมูลที่ได้ โมเดล PLS Regression ที่ใช้สามารถทำนายความเข้มข้นของทัลก์ได้อย่างแม่นยำมากขึ้นเมื่อความเข้มข้นสูงขึ้น อย่างไรก็ตาม ในช่วงความเข้มข้นต่ำ แบบจำลองยังคงมีความผิดพลาดสูง ซึ่งจำเป็นต้องมีการปรับปรุงเพิ่มเติมเพื่อให้สามารถทำนายความเข้มข้นในช่วงต่ำให้แม่นยำขึ้น

ตารางที่ 11 ผลการทำนายความเข้มข้นของทัลก์จากโมเดล PLS Regression (component = 6)

Real Concentration (%)	Predict Concentration (%)	Absolute error (%)
0.5	-0.8030	1.30
1	0.8349	0.17
3	0.2585	2.74
5	3.4830	1.52
7	5.4316	1.57
9	9.9871	0.99
11	8.2143	2.79
13	13.5440	0.54
15	12.4248	2.58
20	23.6847	3.68
30	27.1427	2.86
40	39.7138	0.29
50	51.3972	1.40
60	64.0188	4.02
70	75.7049	5.70
80	81.9555	1.96
90	91.5652	1.57
100	100.3542	0.35

4.3.6 การนำแบบจำลอง PLS Regression ไปประยุกต์ใช้ทำนายความเข้มข้นของทัลก์ที่มีอยู่ในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก

หลังจากที่แบบจำลอง PLS Regression ที่สร้างขึ้นสามารถนำใช้ทำนายความเข้มข้นของทัลก์ได้ดี จึงได้มีการนำแบบจำลองดังกล่าวมาใช้ในการตรวจจับทัลก์ในเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ โดยดำเนินการทดสอบกับตัวอย่างแป้งฝุ่นสำหรับเด็กเชิงพาณิชย์ ซึ่งประกอบด้วยสูตรที่มีส่วนผสมของทัลก์ 6 แบรินด์ และไม่มีทัลก์อีก 4 แบรินด์ จำนวนแบรินด์ละ 5 สเปกตรัม รวมทั้งสิ้น 50 สเปกตรัม (ดูจากฉลากผลิตภัณฑ์) การทดสอบนี้ถูกออกแบบมาเพื่อประเมินประสิทธิภาพการทำนายของแบบจำลอง โดยตัวอย่างแป้งฝุ่นทั้งหมดถูกนำไปกับโพลีเอทิลีน (PE) ในอัตราส่วน 4.5 : 25.5 มิลลิกรัม ตามลำดับ รูปที่ 46 แสดงการเปรียบเทียบสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดไกล ที่วัดได้จากตัวอย่างแป้งฝุ่นสำหรับเด็กที่มีและไม่มีทัลก์กับสเปกตรัมของโพลีเอทิลีนบริสุทธิ์ ปริมาณ 30 มิลลิกรัม สเปกตรัมที่วัดได้นี้มีการดูดกลืนที่ชัดเจนบริเวณยอดการดูดกลืนที่ 167 cm^{-1} และ 177 cm^{-1} ซึ่งบ่งชี้ถึงการมีอยู่ของทัลก์โดยฟิสิกของการดูดกลืนในบริเวณดังกล่าวไม่ปรากฏในสเปกตรัมของแป้งที่ไม่มีจากทัลก์



รูปที่ 46 สเปกตรัมที่วัดได้จากตัวอย่างแป้งฝุ่นสำหรับเด็กที่มีและไม่มีทัลก์กับสเปกตรัมของโพลีเอทิลีน (PE) บริสุทธิ์ในย่านอินฟราเรดไกล (FIR)

การทดลองในเบื้องต้นนี้แสดงให้เห็นว่า แบบจำลอง PLS สามารถแยกกลุ่มแบ่งฝุ่นที่มีทัลก์ และไม่มีทัลก์ได้อย่างชัดเจน ซึ่งแสดงในรูปที่ 47 แสดงการทำนายปริมาณทัลก์ในผลิตภัณฑ์ได้ในระดับเบื้องต้น อย่างไรก็ตาม การวัดปริมาณทัลก์ในผลิตภัณฑ์ยังคงจำเป็นต้องได้รับการยืนยันความแม่นยำโดยการเปรียบเทียบกับค่าจริงจากวิธีมาตรฐาน เช่น HPLC หรือวิธีการที่เชื่อถือได้อื่น ๆ เนื่องจากมีส่วนประกอบอื่น ๆ ในผลิตภัณฑ์ที่อาจมีผลต่อการทำนาย ซึ่งอาจทำให้ผลลัพธ์ที่ได้จากการทำนายไม่แม่นยำเท่าที่ควร จึงถือเป็นการทดลองเบื้องต้นที่มีแนวโน้มว่าจะสามารถตรวจวัดได้ แต่ยังคงจำเป็นต้องอาศัยการเทียบเคียงผลลัพธ์ด้วยวิธีที่เชื่อถือได้เพื่อเพิ่มความแม่นยำในการคาดการณ์



รูปที่ 47 การวิเคราะห์และทำนายความเข้มข้นของทัลก์ในผลิตภัณฑ์แบ่งฝุ่นสำหรับเด็กเชิงพาณิชย์ โดยใช้แบบจำลอง PLS Regression

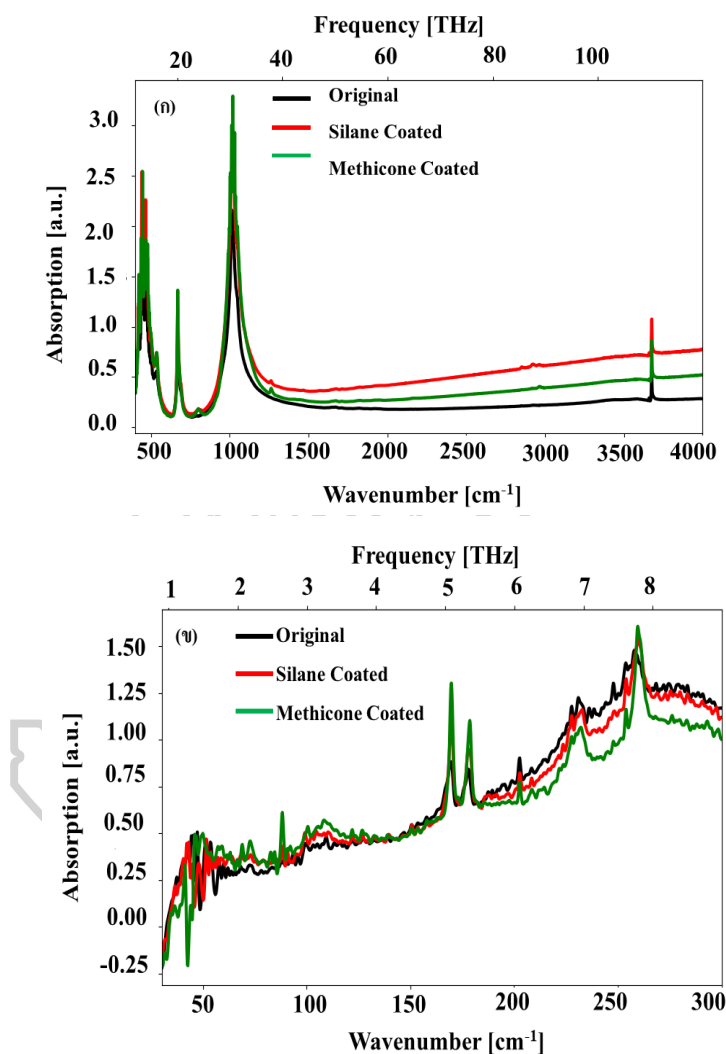
4.4 การประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมเครื่องสำอางที่มีการใช้ทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบต่างๆ: การสร้างแบบจำลองเพื่อจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์

ในอุตสาหกรรมเครื่องสำอาง ทัลก์ถือเป็นส่วนประกอบหลักในผลิตภัณฑ์ต่างๆ เช่น แป้งฝุ่น ทาตัวและเครื่องสำอางอื่นๆ โดยมีการเคลือบผิวทัลก์เพื่อปรับปรุงคุณสมบัติทางเคมีและฟิสิกส์ เช่น การป้องกันการระคายเคือง การควบคุมการปล่อยสาร หรือการเพิ่มคุณสมบัติในการดูดซับน้ำมัน การเคลือบเหล่านี้มีผลต่อคุณภาพของผลิตภัณฑ์และการตอบสนองต่อผู้ใช้ ดังนั้น การจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์จึงมีความสำคัญในการพัฒนาและควบคุมคุณภาพผลิตภัณฑ์ ในการศึกษา ผู้วิจัยได้ขยายการทดลองไปยังทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบที่ต่างกัน ได้แก่ 1. ทัลก์ที่ไม่ผ่านการเคลือบ (Original หรือทัลก์มาตรฐาน) 2. ทัลก์ที่ผ่านการเคลือบด้วยเมธิโคน (Methicone Coated) และ 3. ทัลก์ที่ผ่านการเคลือบด้วยไซเลน (Silane Coated) โดยใช้เทคนิค FT-IR ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR)

4.4.1 การวิเคราะห์รูปแบบของสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Absorption Spectra) และกระบวนการประมวลผลเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing) ของทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบที่แตกต่าง

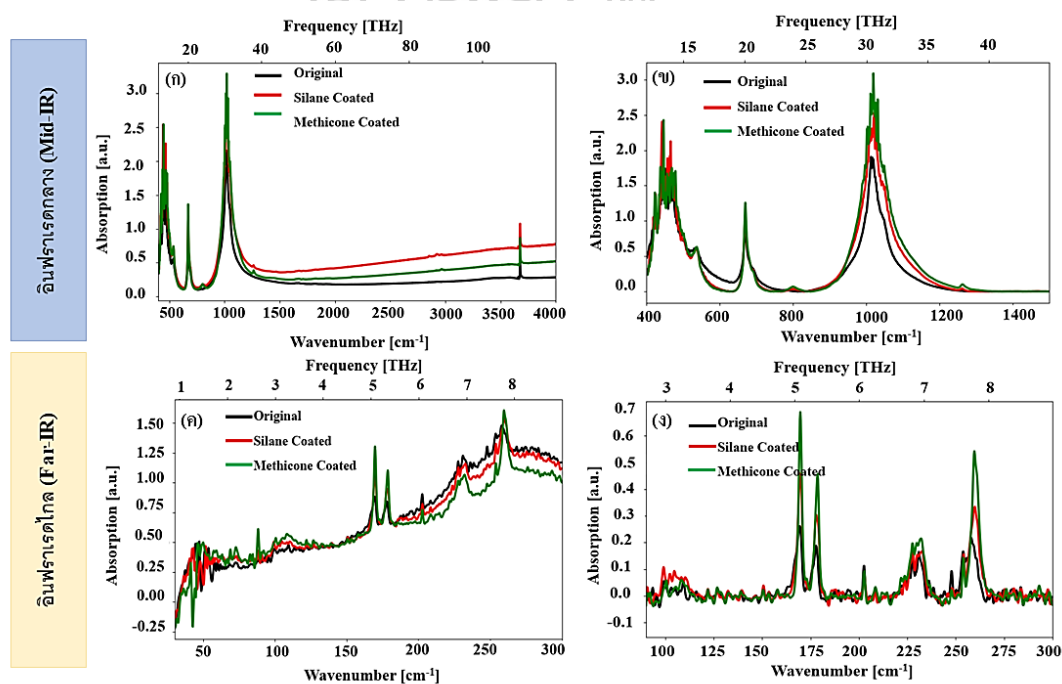
ในการศึกษาการจำแนกการเคลือบผิวของทัลก์ เนื่องจากผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่นำมาใช้ในปัจจุบันที่ทัลก์มักจะผ่านกระบวนการเคลือบผิวด้วยสารเคมีต่างๆ เพื่อปรับปรุงคุณสมบัติของทัลก์ ในการทดลองครั้งนี้จึงเลือกประเภทการเคลือบผิวที่แตกต่างกัน 3 แบบ ได้แก่ ทัลก์ที่ไม่ผ่านกระบวนการเคลือบ (Original) ทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบด้วยเมธิโคน (Methicone Coated) และทัลก์ที่ผ่านกระบวนการเคลือบด้วยไซเลน (Silane Coated) กระบวนการเหล่านี้อาจทำให้คุณสมบัติและสเปกตรัมของทัลก์ที่ได้แตกต่างกัน การจำแนกการเคลือบผิวจะช่วยให้เรารับรู้ถึงความแตกต่างเหล่านี้ และสามารถตรวจสอบทัลก์ได้แม้ผ่านกระบวนการเคลือบที่แตกต่างกัน

ตัวอย่างสเปกตรัมของฟิล์มที่มีการเคลือบแตกต่างกัน 3 ชนิด ซึ่งวัดได้จากเครื่อง FT-IR ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) ช่วงเลขคลื่น $400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ และอินฟราเรดไกล (Far-IR) ช่วงเลขคลื่น $30\text{--}300\text{ cm}^{-1}$ ก่อนการประมวลผลเบื้องต้น โดยสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Absorption Spectra) ที่ได้จากการวัดโดยตรงจากเครื่องมือวิเคราะห์แสดงผลของสัญญาณที่ตรวจวัดได้ตามจริง แสดงในรูปที่ 48



รูปที่ 48 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงของฟิล์มที่ผ่านกระบวนการเคลือบต่างกันสามแบบก่อนทำการประมวลผลจากเครื่อง FT-IR ในย่าน (ก) อินฟราเรดกลางและ (ข) อินฟราเรดไกล

ตัวอย่างสเปกตรัมของฟิล์มที่มีการเคลือบที่แตกต่างกัน 3 ชนิด ที่วัดได้จากเครื่อง FT-IR ก่อนการประมวลผลเบื้องต้น ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล แสดงในรูปที่ 49 (ก) และ (ค) ตามลำดับ จากรูปจะเห็นได้ว่า สเปกตรัมการดูดกลืนแสงที่ได้นั้นมีสัญญาณในบางช่วงของเลขคลื่นที่เป็นสิ่งรบกวน และมีระดับเส้นฐานที่แตกต่างกัน ซึ่งอาจทำให้ความเข้มสัญญาณสเปกตรัมผิดเพี้ยนไป ทำให้การวิเคราะห์และการตีความข้อมูลไม่ถูกต้อง เพื่อให้ข้อมูลสเปกตรัมมีข้อมูลที่เหมาะสมต่อการวิเคราะห์ จึงต้องทำการประมวลผลเบื้องต้นกับข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด โดยในย่านอินฟราเรดกลาง ได้ทำการเลือกใช้สเปกตรัมในช่วงเลขคลื่นที่บริเวณ $400\text{--}1,500\text{ cm}^{-1}$ เท่านั้น พร้อมกับทำการปรับเส้นฐานของสเปกตรัมทั้งหมดให้อยู่ในระดับเดียวกัน แสดงในรูปที่ 49 (ข) ส่วนในย่านอินฟราเรดไกล ทำการเลือกใช้สเปกตรัมในช่วงเลขคลื่นที่บริเวณ $90\text{--}300\text{ cm}^{-1}$ พร้อมกับทำการปรับเส้นฐานของสเปกตรัมทั้งหมดให้อยู่ในระดับเดียวกัน แสดงในรูปที่ 49 (ง)

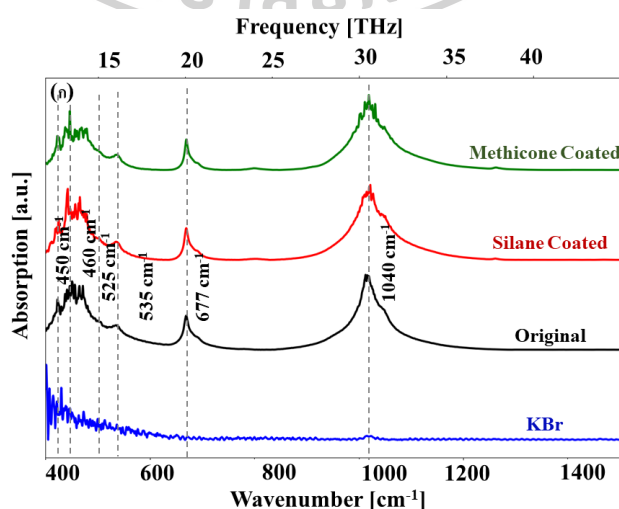


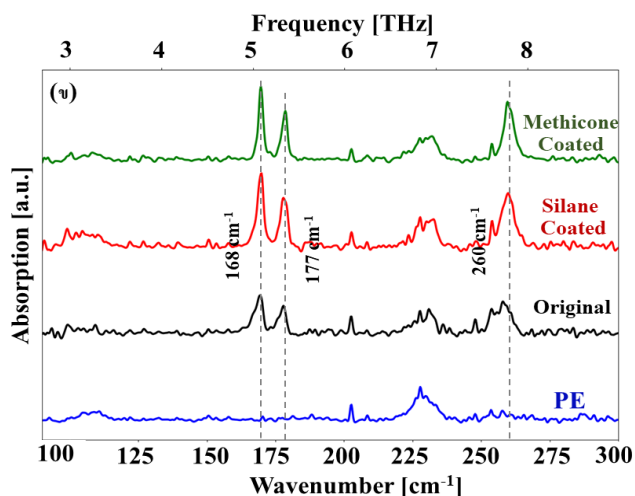
รูปที่ 49 สเปกตรัมการดูดกลืนแสง (ก) ก่อนและ (ข) หลังประมวลผลในอินฟราเรดกลาง (ค) ก่อนและ (ง) หลังประมวลผลในอินฟราเรดไกล

4.4.2 การวิเคราะห์เปรียบเทียบคุณสมบัติสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis) ของฟิล์มที่ผ่านกระบวนการประมวลผลเบื้องต้นแล้ว

รูปที่ 50 แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนแสงเฉลี่ยของสารฟิล์มบริสุทธิ์ที่ผ่านการเคลือบ 3 ชนิด ได้แก่ ไม่ผ่านการเคลือบ (Original) หรือฟิล์มมาตรฐาน ผ่านการเคลือบด้วยเมธิโคน (Methicone Coated) และผ่านการเคลือบด้วยซิลเลน (Silane Coated) โดยตัวอย่างทั้งหมดถูกผสมกับตัวยัดเกาะอย่างโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr) ในกรณีของย่านอินฟราเรดกลาง (รูปที่ 50 (ก)) และโพลีเอทิลีน (PE) ในกรณีของย่านอินฟราเรดไกล (รูปที่ 50 (ข)) จากรูปจะเห็นได้ว่า แม้ฟิล์มจะมีการเคลือบที่ต่างกัน แต่ยังคงให้ผลสเปกตรัมที่แสดงยอดพิก (Peaks) ในบริเวณเดียวกัน

การวิเคราะห์เปรียบเทียบคุณสมบัติสเปกตรัมการดูดกลืนแสงของฟิล์มที่ผ่านการเคลือบด้วยสารต่างๆ ได้แก่ ฟิล์มที่ไม่ผ่านการเคลือบหรือฟิล์มมาตรฐาน (Original) ฟิล์มที่เคลือบด้วยเมธิโคน (Methicone Coated) และฟิล์มที่เคลือบด้วยซิลเลน (Silane Coated) หลังจากสเปกตรัมทั้งหมดผ่านกระบวนการประมวลผลเบื้องต้นแล้ว พบว่า แม้ฟิล์มจะได้รับการเคลือบด้วยสารที่แตกต่างกัน แต่ตำแหน่งพิกในสเปกตรัมการดูดกลืนแสงยังคงอยู่ในตำแหน่งเดิม ซึ่งเหมือนกับตำแหน่งพิกของฟิล์มมาตรฐานที่ได้ทำการทดลองไปก่อนหน้านี้ การคงที่ของตำแหน่งพิกเหล่านี้แสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์กับพันธะต่างๆ ในโครงสร้างโมเลกุลของฟิล์ม ในการวิเคราะห์สเปกตรัมในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) พบพิกที่ตำแหน่ง 450 cm^{-1} และ 460 cm^{-1} (O-Si-O), 525 cm^{-1} (Si-O), และ $1,040\text{ cm}^{-1}$ (Si-O-Si) ซึ่งเกี่ยวข้องกับพันธะระหว่างซิลิกอน (Si) และออกซิเจน (O) นอกจากนี้ยังพบพิกที่ 535 cm^{-1} (Mg-O) และ 687 cm^{-1} (Si-O-Mg) ซึ่งเกี่ยวข้องกับการเชื่อมต่อระหว่างซิลิกอน (Si), ออกซิเจน (O), และแมกนีเซียม (Mg) ส่วนย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) ตำแหน่ง 168 cm^{-1} , 177 cm^{-1} และ 260 cm^{-1} ยังคงเกี่ยวข้องกับการสั่นสะเทือนของแมกนีเซียม (Mg) และออกไซด์ไฮดรอกไซด์ (OH) ซึ่งสอดคล้องกับพันธะต่างๆ ที่กล่าวไปข้างต้น





รูปที่ 50 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉื่อย ($n = 50$) ของฟิล์มที่ผ่านการเคลือบต่างกันในช่วง (ก)

อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล

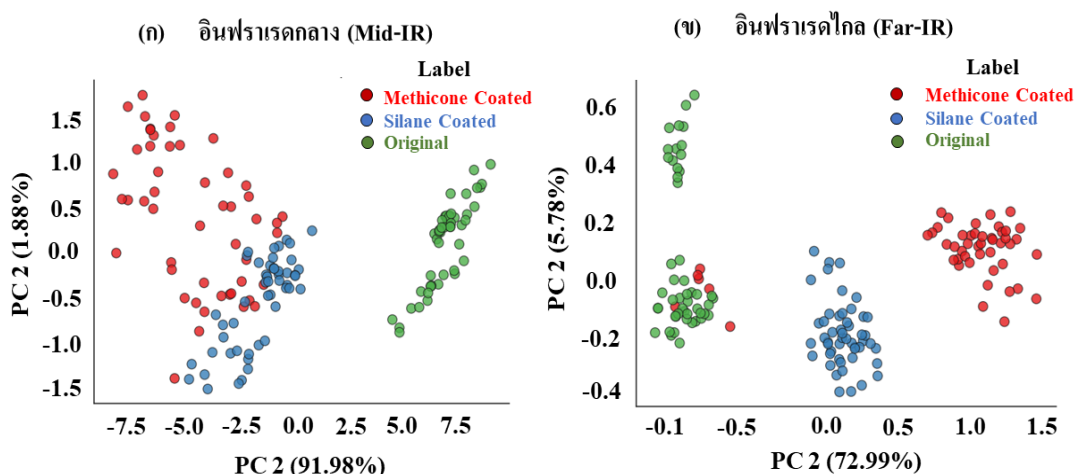
4.4.3 การจำแนกประเภทการเคลือบของฟิล์มโดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก

(Principal Component Analysis Results; PCA)

ตัวอย่างสเปกตรัมจำนวน 150 สเปกตรัมในแต่ละย่าน ซึ่งเก็บจากการวัดตัวอย่างฟิล์มที่ผ่านกระบวนการเคลือบที่แตกต่างกัน (ไม่เคลือบ, เคลือบด้วย Methicone, เคลือบด้วย Silane) ผ่านเครื่องมือ Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far-IR) ถูกนำมาใช้ในกระบวนการวิเคราะห์ข้อมูลด้วยการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA) ซึ่งเป็นเครื่องมือทางสถิติที่ช่วยลดมิติของข้อมูล โดยวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ระหว่างข้อมูลที่ซับซ้อนและจัดกลุ่มข้อมูลเบื้องต้นโดยไม่จำเป็นต้องใช้ข้อมูลที่ระบุคำตอบ (Label) ในการจำแนกกลุ่ม โดยเลือก Principal Components 2 ตัวแปรที่มีความสำคัญมากที่สุด จะช่วยให้เราได้กราฟสองมิติแบบ scatter plot แสดงในรูปที่ 51

รูปที่ 51 (ก) แสดงการวิเคราะห์ข้อมูลในย่านอินฟราเรดกลาง แสดงให้เห็นว่า Principal Component 1 (PC1) มีความแปรปรวนอธิบายได้สูงถึง 91.98% และ Principal Component 2 (PC2) อธิบายได้ 1.88% โดยรวมแล้วทั้งสองคอมโพเนนต์นี้สามารถอธิบายความแปรปรวนรวมได้ 93.86% ของข้อมูลทั้งหมด ซึ่งบ่งชี้ว่าข้อมูลในย่านนี้สามารถอธิบายได้อย่างครอบคลุมด้วยการใช้เพียงสองคอมโพเนนต์หลัก จากกราฟการกระจายตัวของข้อมูลแสดงให้เห็นถึงความสามารถในการแยกกลุ่มตัวอย่างฟิล์มตามประเภทการเคลือบได้ในระดับที่ดี ในทางตรงกันข้าม รูปที่ 51 (ข) แสดงการวิเคราะห์ข้อมูลในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) แสดงว่า Principal Component 1 (PC1) สามารถอธิบายความแปรปรวนได้ 72.99% และ Principal Component 2 (PC2) อธิบายได้ 5.78% รวมแล้วทั้งสองคอมโพเนนต์อธิบายความแปรปรวนรวมได้ 78.77% ของข้อมูลทั้งหมด โดยที่ข้อมูล

แต่ละจุดในกราฟจะแทนด้วยสเปกตรัม 1 เส้น ซึ่งจากรูปดังกล่าว จะแสดงให้เห็นการจัดกลุ่มของตัวอย่างสเปกตรัมตามประเภทของการเคลือบทัลก์ อย่างไรก็ตาม การทับซ้อนของจุดข้อมูลยังคงมีอยู่ ทำให้การแยกประเภทของการเคลือบยังไม่ชัดเจนเพียงพอ ดังนั้น จึงจำเป็นต้องใช้การวิเคราะห์ด้วยการเรียนรู้ของเครื่องเพื่อช่วยลดความไม่ชัดเจนในกระบวนการแยกประเภทนี้



รูปที่ 51 ผลการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์โดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลักใน (ก) ย่านอินฟราเรดกลางและ (ข) ย่านอินฟราเรดไกล

4.4.4 การจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์โดยใช้เทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง

(Classification Performance using Machine Learning)

หลังจากที่เราได้ทำการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมโดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA) เพื่อทำความเข้าใจการกระจายของข้อมูลในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far-IR) และได้เห็นว่าข้อมูลมีการทับซ้อนกันอย่างมาก ทำให้การจำแนกประเภทมีความไม่ชัดเจน ซึ่งอาจส่งผลต่อความแม่นยำในการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ เราจึงได้ทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของแบบจำลองโมเดลด้วยเทคนิคการเรียนรู้ของเครื่องเพื่อเพิ่มความแม่นยำในการจำแนกประเภท ดังนี้

1. การเตรียมข้อมูลและการสร้างแบบจำลอง: ข้อมูลสเปกตรัมที่ผ่านการประมวลผลล่วงหน้าแล้วจำนวน 150 สเปกตรัมถูกนำมาใช้ในการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) เพื่อตรวจสอบความสามารถในการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์จากสเปกตรัมที่วัดได้ โดยในการวิเคราะห์นี้ ได้ใช้ k-fold cross-validation (k-fold = 5) เพื่อประเมินประสิทธิภาพของโมเดลสามประเภท ได้แก่ Extra Trees Classifier, Random Forest Classifier และ Logistic Regression

2. ประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลอง: จากการประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลองโดยใช้ k-fold cross-validation (k-fold = 5) ตารางที่ 12 แสดงผลการประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลอง

ที่ใช้ในการจำแนกประเภทการเคลื่อนของหลักในทั้งสองย่าน ได้แก่ อินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และ อินฟราเรดไกล (Far-IR) โดยเราได้ทำการเปรียบเทียบแบบจำลองการเรียนรู้ของเครื่องหลัก ได้แก่ Extra Trees Classifier, Random Forest Classifier และ Logistic Regression ซึ่งแต่ละโมเดลมีการวัดค่า Performance Metrics ต่าง ๆ ได้แก่ Accuracy (ACC), Area Under Curve (AUC), Precision (Prec.), และ Recall โดยผลลัพธ์แต่ละแบบจำลอง ได้แก่

- **Extra Trees Classifier** ได้แสดงถึงประสิทธิภาพที่ดีที่สุดทั้งสองย่าน โดยมีค่า Accuracy (ACC) ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) สูงถึง 97.14% ซึ่งแสดงถึงความสามารถของโมเดลในการจำแนกประเภทได้อย่างแม่นยำ ค่า AUC ของโมเดลนี้มีค่าสูงถึง 99.97% ซึ่งบ่งชี้ถึงความสามารถในการแยกประเภทที่ดี โดยไม่พลาดการจำแนกประเภทที่สำคัญ ค่า Precision และ Recall อยู่ที่ 97.50% และ 97.14% ตามลำดับ ซึ่งแสดงให้เห็นถึงความแม่นยำในการทำนายประเภทและการเรียกคืนข้อมูลที่ดี ในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) แบบจำลอง Extra Trees Classifier ยังคงรักษาความแม่นยำสูง โดยมีค่า ACC ที่ 97.14%, AUC ที่ 98.81%, Precision ที่ 97.50%, และ Recall ที่ 97.14% ซึ่งแสดงถึงประสิทธิภาพที่ดีกว่าแบบจำลองอื่น ๆ

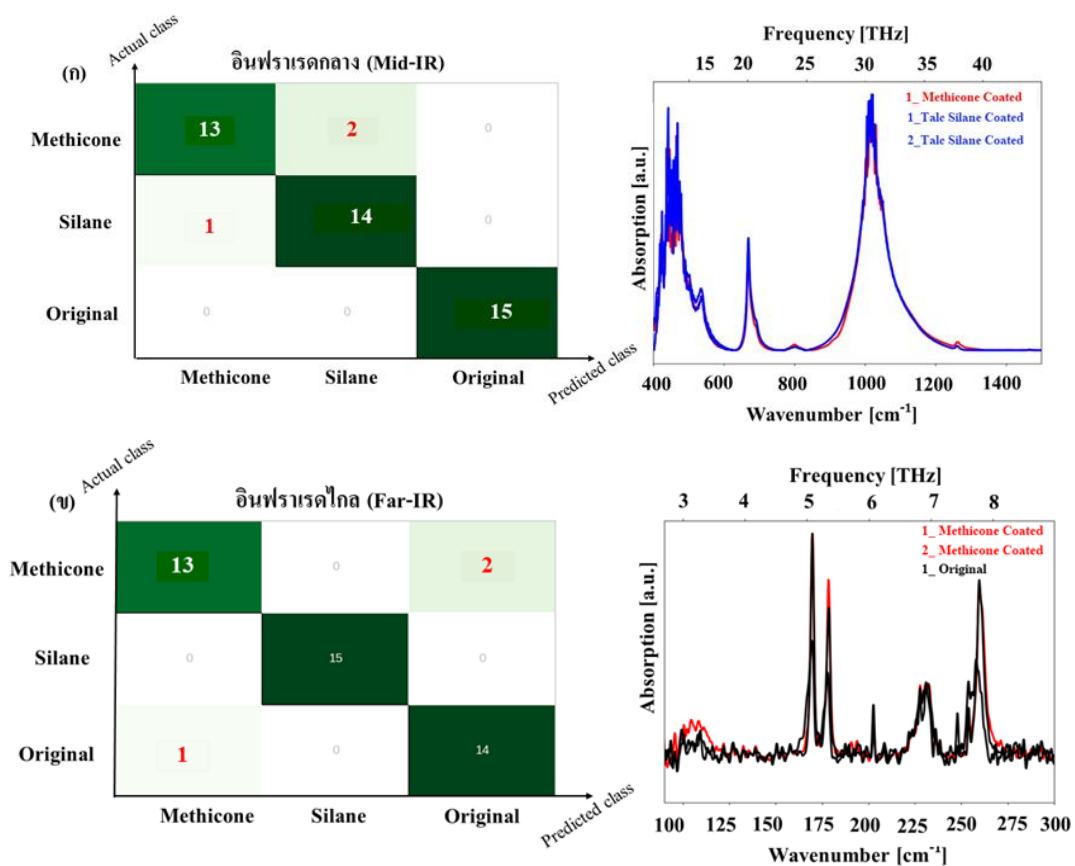
- **Random Forest Classifier** เป็นแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพรองลงมา โดยในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) มีค่า ACC ที่ 93.33%, AUC ที่ 99.73%, Precision ที่ 94.72%, และ Recall ที่ 93.33% ซึ่งบ่งบอกถึงความสามารถในการจำแนกประเภทที่ดี แต่ยังไม่เทียบเท่ากับแบบจำลอง Extra Trees Classifier ในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) โมเดลนี้มีค่า ACC ที่ 95.24%, AUC ที่ 99.12%, Precision ที่ 96.02%, และ Recall ที่ 95.24%

- **Logistic Regression** เป็นแบบจำลองที่ใช้การคำนวณความเป็นไปได้ในการทำนายประเภท มีประสิทธิภาพต่ำที่สุดในกลุ่มโมเดลที่ศึกษา โดยในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) ค่า ACC อยู่ที่ 86.67%, AUC ที่ 00.00%, Precision ที่ 87.25%, และ Recall ที่ 86.67% ซึ่งแสดงถึงความแม่นยำน้อยกว่าทั้งสองแบบจำลองที่กล่าวถึงข้างต้น ค่า AUC ที่ 00.00% ชี้ให้เห็นถึงความสามารถในการแยกประเภทที่ต่ำ ในย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) โมเดลนี้มีค่า ACC ที่ 93.33%, AUC ที่ 00.00%, Precision ที่ 94.72%, และ Recall ที่ 93.33%

ตารางที่ 12 แสดงผลการประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลองที่ใช้ในการจำแนกประเภทการเคลื่อน
ของทัลกในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล

ย่าน	โมเดล	ACC.	AUC	Prec.	Recall
อินฟราเรดกลาง (Mid-IR)	Extra Trees Classifier	97.14	99.97	97.50	97.14
	Random Forest Classifier	93.33	99.73	94.72	93.33
	Logistic Regression	86.67	00.00	87.25	86.67
อินฟราเรดไกล (Far-IR)	Extra Trees Classifier	97.14	98.81	97.50	97.14
	Random Forest Classifier	95.24	99.12	96.02	95.24
	Logistic Regression	93.33	00.00	94.72	93.33

3. การวิเคราะห์การจำแนกประเภทการเคลื่อนในรูปแบบของ Confusion Matrix: เพื่อให้การจำแนกประเภทมีความชัดเจน เราได้ทำการวิเคราะห์ผลลัพธ์ของแบบจำลองโดยใช้ Confusion Matrix ซึ่งเป็นเครื่องมือที่ช่วยให้เราสามารถประเมินของแบบจำลองที่ใช้ในการจำแนกประเภทการเคลื่อนของทัลกในทั้งสองย่าน แม้ว่า Extra Trees Classifier จะเป็นโมเดลที่มีประสิทธิภาพดีที่สุด แต่ก็ยังมีข้อบกพร่องในการจำแนกประเภทบางประการจากข้อมูลสเปกตรัมชุดทดสอบจำนวน 45 สเปกตรัม พบว่า ในรูปที่ 52 แสดงถึงข้อบกพร่องบางประการ พบว่า จากลักษณะและการซ้อนทับกันของสเปกตรัมที่วัดได้มีความใกล้เคียงกันอย่างมาก ส่งผลให้ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกลมีการจำแนกประเภทการเคลื่อนผิดพลาดย่านละ 3 สเปกตรัม ในย่านอินฟราเรดกลางแบบจำลองมีการจำแนกประเภทผิดพลาด โดยจำแนกการเคลื่อน Methicone เป็น Silane จำนวน 2 สเปกตรัม และการเคลื่อน Silane เป็น Methicone อีก 1 สเปกตรัม แสดงในรูปที่ 52 (ก) ส่วนทางด้านของอินฟราเรดไกล โมเดลมีการจำแนกประเภทผิดพลาด โดยจำแนกการเคลื่อน Methicone เป็น Original จำนวน 2 สเปกตรัม และ Original เป็น Methicone อีก 1 สเปกตรัม ในการวิเคราะห์เหตุผลที่แบบจำลองทำนายผิดพลาดใน 3 สเปกตรัม ที่เคลื่อน Silane เป็น Methicone เราได้แสดง 3 สเปกตรัม ของ Silane ที่ทำนายผิดและเปรียบเทียบกับสเปกตรัมของ Methicone พบว่าลักษณะของสเปกตรัมที่เคลื่อน Silane และ Methicone มีความใกล้เคียงกันอย่างมากในช่วงเลขคลื่นที่สำคัญ โดยเฉพาะช่วงที่มีการซ้อนทับกันของพีคทำให้แบบจำลองเกิดความสับสนในการจำแนกประเภทของสเปกตรัม แสดงในรูปที่ 52 (ข)



รูปที่ 52 การจำแนกประเภทการเคลือบของฟิล์มผ่าน confusion matrix โดยใช้แบบจำลอง Extra Trees Classifier ใน (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล



บทที่ 5

สรุปและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

วิทยานิพนธ์นี้เสนอวิธีการตรวจวัดการมีอยู่ของทัลกในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นโดยใช้เทคนิค Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far-IR) รวมถึง Terahertz Time Domain Spectroscopy (THz-TDS) ในย่านเทราเฮิร์ตซ์ การศึกษาเน้นการวิเคราะห์ในย่าน Mid-IR และ Far-IR เนื่องจาก THz-TDS มีสัญญาณรบกวนสูง ในการศึกษาครั้งนี้ เริ่มจากการวิเคราะห์ทัลกมาตรฐานเพื่อเป็นตัวอ้างอิงในการพัฒนากระบวนการวิเคราะห์ทั้งในเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณ ในส่วนการวิเคราะห์เชิงคุณภาพ มุ่งเน้นที่การตรวจวัดการมีอยู่ของทัลกในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่น พร้อมทั้งการจำแนกประเภทการเคลือบผิวของทัลก โดยใช้ทัลกมาตรฐานเป็นตัวเปรียบเทียบเพื่อระบุคุณลักษณะเฉพาะ ส่วนการวิเคราะห์เชิงปริมาณ ใช้ข้อมูลจากทัลกมาตรฐานในการพัฒนาแบบจำลองทำนายปริมาณทัลก ซึ่งช่วยทำนายความเข้มข้นของทัลกมาตรฐานและในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีการจำหน่ายเชิงพาณิชย์

ส่วนแรก การใช้เทคนิค Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) จากย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล โดยสเปกตรัมทัลกมาตรฐานแสดงการสั่นสะเทือนของกลุ่มฟังก์ชันในโครงสร้างทัลก โดยเฉพาะกลุ่มของซิลิกอน (Si) และออกซิเจน (O) ที่พบในช่วง 450 cm^{-1} และ 460 cm^{-1} (O-Si-O), 525 cm^{-1} (Si-O), และ $1,040\text{ cm}^{-1}$ (Si-O-Si) รวมถึงการเชื่อมต่อระหว่างซิลิกอน (Silicon; Si) ออกซิเจน (Oxygen; O) และแมกนีเซียม (Magnesium; Mg) ที่ 535 cm^{-1} (Mg-O) และ 687 cm^{-1} (การสั่น Si-O-Mg) ในขณะที่ย่านอินฟราเรดกลางพบพีคที่ 168 cm^{-1} , 177 cm^{-1} , และ 260 cm^{-1} ซึ่งสะท้อนการสั่นสะเทือนของกลุ่มแมกนีเซียมและออกไซด์ไฮดรอกไซด์ (Mg และ OH) ข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จากการทดลองสามารถนำไปใช้ในการจำแนกผลิตภัณฑ์ที่มีและไม่มีทัลกได้ โดยการประมวลผลร่วมกับเทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง โดยใช้โมเดล Extra Trees Classifier ซึ่งช่วยเพิ่มความแม่นยำในการจำแนก ในย่านอินฟราเรดไกล แบบจำลองสามารถจำแนกได้แม่นยำถึง 100% และในย่านอินฟราเรดกลางมีความแม่นยำ 93.33% แม้จะมีความคลาดเคลื่อนในผลิตภัณฑ์ที่ไม่มีทัลก ผลการทดลองแสดงถึงศักยภาพของโมเดล Extra Trees Classifier ในการจำแนกและตรวจวัดทัลกได้แม้มีส่วนผสมอื่นๆ ในผลิตภัณฑ์

ส่วนที่สอง การใช้เทคนิค FT-IR จากย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล สเปกตรัมสามารถแสดงการสั่นสะเทือนของ functional groups ในโครงสร้างของทัลกได้ชัดเจน โดยเฉพาะกลุ่มของซิลิกอน (Si) และออกซิเจน (O) และแมกนีเซียม (Mg) โดยข้อมูลสเปกตรัมจากทัลกมาตรฐาน

ในย่านอินฟราเรดไกลถูกนำมาใช้ในการสร้างแบบจำลองเชิงปริมาณ ซึ่งช่วยให้สามารถทำนายความเข้มข้นของทัลก์ในตัวอย่างได้ การเลือกช่วงเลขคลื่นที่เหมาะสมร่วมกับการประยุกต์ใช้แบบจำลอง Partial Least Squares (PLS) ช่วยเพิ่มความแม่นยำในการทำนายความเข้มข้น โดยเฉพาะในช่วงเลขคลื่น $160\text{--}180\text{ cm}^{-1}$ ซึ่งมีความสำคัญสูงสุดในกระบวนการทำนาย ผลลัพธ์จากแบบจำลอง PLS Regression แสดงถึงความแม่นยำที่สูงและมีศักยภาพในการนำไปใช้ในงานวิเคราะห์เชิงปริมาณของทัลก์ในผลิตภัณฑ์อื่น ๆ ในอนาคต นอกจากนี้ แบบจำลองยังสามารถตรวจวัดปริมาณทัลก์ได้ต่ำสุดถึง 1.35 mg ในการผสมทัลก์ 4.5 mg (15%) โดยการวิเคราะห์คุณลักษณะของสเปกตรัมในช่วงเลขคลื่นดังกล่าวมีความสำคัญในการเพิ่มความแม่นยำในการตรวจวัด ลดความเสี่ยงจากข้อผิดพลาดในการวิเคราะห์

ท้ายสุดนี้ การศึกษานี้ยังสามารถนำไปประยุกต์ใช้ในการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ โดยใช้เทคนิค FT-IR ร่วมกับการประมวลผลสัญญาณและการวิเคราะห์ด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง ผลลัพธ์แสดงให้เห็นว่าวิธีการนี้มีประสิทธิภาพ รวดเร็ว และแม่นยำ โดยไม่ทำลายตัวอย่าง ช่วยลดการใช้บุคลากรในการวิเคราะห์ และสามารถจำแนกประเภทการเคลือบของทัลก์ได้แม้ในผลิตภัณฑ์ที่มีส่วนผสมซับซ้อน ซึ่งสามารถนำไปใช้ในการควบคุมคุณภาพและการพัฒนาผลิตภัณฑ์ในอุตสาหกรรมเครื่องสำอางได้

5.2 ข้อเสนอแนะ

5.2.1 จำนวนตัวอย่างที่ใช้ในการวิเคราะห์ควรมีจำนวนที่มากขึ้นและมีความหลากหลายมากขึ้น

5.2.2 สามารถพัฒนาและทดสอบโมเดลการเรียนรู้แบบกึ่งมีผู้ควบคุม (Semi-Supervised Learning) ที่รวมข้อมูลที่มีการระบุฉลาก (Label) บางส่วนเข้ากับข้อมูลที่ไม่มีการระบุฉลากได้

5.2.3 นำโมเดลที่พัฒนาไปทดสอบกับชุดข้อมูลใหม่ที่ไม่เคยถูกใช้ในการฝึกโมเดล เพื่อประเมินประสิทธิภาพและความสามารถในการทำนายผลของโมเดลกับชุดข้อมูลใหม่ที่ไม่เคยเห็น

5.2.4 นำโมเดล PLS ที่ใช้ในการทำนายความเข้มข้นของทัลก์มาคำนวณจากทั้ง พื้นที่ใต้พีค (Peak Area) และ ความสูงของพีค (Peak Height) โดยสามารถทดลองทำนายด้วยวิธีการทั้งสองและเปรียบเทียบความแม่นยำในการทำนาย เพื่อระบุวิธีที่เหมาะสมที่สุดสำหรับชุดข้อมูล

5.3 แนวทางการพัฒนาต่อยอด

5.3.1 พัฒนาโมเดล Deep Learning เช่น Convolutional Neural Networks (CNNs) เพื่อใช้ในการวิเคราะห์สเปกตรัม เพื่อใช้ในกรณีที่มีข้อมูลขนาดใหญ่ อาจช่วยเพิ่มความแม่นยำในการตรวจจับและจำแนกประเภททัลก์ได้อย่างมีประสิทธิภาพมากยิ่งขึ้น

5.3.2 ศึกษาผลกระทบของสารเติมแต่งที่พบในแป้งฝุ่นเชิงพาณิชย์ซึ่งอาจรบกวนการตรวจจับและจำแนกทัลก์ เช่น ไมก้า (Mica) ซิลิกา (Silica) และแคลเซียมคาร์บอเนต (Calcium Carbonate) สารเหล่านี้อาจทำให้เกิดการซ้อนทับของพีคในสเปกตรัม โดยเฉพาะในช่วงเลขคลื่นที่มีพันธะใกล้เคียงกับโครงสร้างของทัลก์ ส่งผลให้การวิเคราะห์ซับซ้อนขึ้น เพื่อเพิ่มความแม่นยำในการจำแนกทัลก์ จึงจำเป็นต้องระบุพีคที่เฉพาะเจาะจงและพัฒนาโมเดลการเรียนรู้ของเครื่องที่สามารถแยกแยะทัลก์จากสารเติมแต่งได้อย่างมีประสิทธิภาพ



รายการอ้างอิง

1. Al Awam, K.A., et al., *The effect of cosmetic talc powder on health*. Indian J Respir Care, 2019. **8**(1): p. 18-21.
2. Cramer, D.W., et al., *The association between talc use and ovarian cancer: A retrospective case-control study in two US states*. Epidemiology, 2016. **27**(3): p. 334-346.
3. Cramer, D.W., et al., *Ovarian cancer and talc. A case-control study*. Cancer, 1982. **50**(2): p. 372-376.
4. Penninkilampi, R. and G.D. Eslick, *Perineal talc use and ovarian cancer: a systematic review and meta-analysis*. Epidemiology, 2018. **29**(1): p. 41-49.
5. Crosspolymers, D., *Safety Assessment of Dimethicone Crosspolymers as Used in Cosmetics*. 2014.
6. Schlossman, M.L., *Kobo Products, Inc., South Plainfield, New Jersey. Cosmeceuticals: Drugs vs. Cosmetics*, 2000. **23**: p. 277.
7. Sokan-Adeaga, A.A., et al., *Environmental toxicants and health adversities: A review on interventions of phytochemicals*. Journal of Public Health Research, 2023. **12**(2): p. 22799036231181226.
8. Sanchez, M.S., M. McGrath-Koerner, and B.D. McNamee, *Characterization of elongate mineral particles including talc, amphiboles, and biopyriboles observed in mineral derived powders: Comparisons of analysis of the same talcum powder samples by two laboratories*. Environmental Research, 2023. **230**: p. 114791.
9. Stoiber, T., S. Fitzgerald, and N.S. Leiba, *Asbestos contamination in talc-based cosmetics: an invisible cancer risk*. Environmental Health Insights, 2020. **14**: p. 1178630220976558.
10. Kalićanin, B. and D. Velimirović, *A study of the possible harmful effects of cosmetic beauty products on human health*. Biological trace element research, 2016. **170**: p. 476-484.

11. Jamali, S., et al., *Elemental analysis of talcum powder using spectroscopic techniques*. Optik, 2022. **261**: p. 169246.
12. Bhatt, C.R., et al., *LIBS application to powder samples*, in *Laser-Induced Breakdown Spectroscopy*. 2020, Elsevier. p. 247-262.
13. Ahmed, A., et al., *Blushers component analysis for unbranded cosmetic brands: elements' concentration levels and its effect on human body*. J. Adv. Res. Dyn. Control Syst, 2019. **11**(5): p. 412-419.
14. Ali, A., N. Zhang, and R.M. Santos, *Mineral characterization using scanning electron microscopy (SEM): a review of the fundamentals, advancements, and research directions*. Applied Sciences, 2023. **13**(23): p. 12600.
15. Liu, Y., et al., *Prediction of talc content in wheat flour based on a near-infrared spectroscopy technique*. Journal of food protection, 2019. **82**(10): p. 1655-1662.
16. Bao, C., et al., *Rapid detection of talc content in flour based on near-infrared spectroscopy combined with feature wavelength selection*. Applied Optics, 2022. **61**(19): p. 5790-5798.
17. Fadlelmoula, A., et al., *Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy to analyse human blood over the last 20 years: a review towards lab-on-a-chip devices*. Micromachines, 2022. **13**(2): p. 187.
18. Downey, G., et al., *Near-and mid-infrared spectroscopies in food authentication: coffee varietal identification*. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 1997. **45**(11): p. 4357-4361.
19. Van Soest, J.J., et al., *Short-range structure in (partially) crystalline potato starch determined with attenuated total reflectance Fourier-transform IR spectroscopy*. Carbohydrate research, 1995. **279**: p. 201-214.
20. Li, X., Y. Zhang, and Y. He, *Rapid detection of talcum powder in tea using FT-IR spectroscopy coupled with chemometrics*. Scientific Reports, 2016. **6**(1): p. 30313.
21. Woolen, S.A., A.A. Lazar, and R. Smith-Bindman, *Association between the frequent use of perineal talcum powder products and ovarian cancer: a systematic review and meta-analysis*. Journal of general internal medicine, 2022. **37**(10): p. 2526-2532.

22. Marzbani, P., et al., *Surface modification of talc particles with phthalimide: study of composite structure and consequences on physical, mechanical, and optical properties of deinked pulp*. BioResources, 2016. **11**(4): p. 8720-8738.
23. Du, C., et al., *Quantitative detection of talcum powder in wheat flour based on near-infrared spectroscopy and hybrid feature selection*. Infrared Physics & Technology, 2022. **123**: p. 104185.
24. Minerals, M. *Talc Products*. 2024 [cited November 8, 2024; Available from: https://masterminerals.pk/Products_Talc.html].
25. Sargeant, J., *Determination of amylose: amylopectin ratios of starches*. Starch-Stärke, 1982. **34**(3): p. 89-92.
26. Apriyanto, A., J. Compart, and J. Fettke, *A review of starch, a unique biopolymer-Structure, metabolism and in planta modifications*. Plant Science, 2022. **318**: p. 111223.
27. Bertoft, E., *Understanding starch structure: Recent progress*. Agronomy, 2017. **7**(3): p. 56.
28. Wongnai. รีวิว แป้งตราหมีคู่ดาว เพื่อนแท้เมนูคาวหวาน สร้างสรรค์เมนูอาหารโดนใจ. 2024; Available from: <https://www.wongnai.com/news/flours-by-double-bear-brand-review>.
29. Ann Bazar, J., et al., *Talc flotation—an overview*. Minerals, 2021. **11**(7): p. 662.
30. Pi-Puig, T., D.Y. Animas-Torices, and J. Solé, *Mineralogical and geochemical characterization of talc from two mexican ore deposits (oaxaca and puebla) and nine talcs marketed in mexico: Evaluation of its cosmetic uses*. Minerals, 2020. **10**(5): p. 388.
31. Mir, W.A.Y., et al., *Asbestos-related diseases and its impact on health: an updated review article*. Current Pulmonology Reports, 2023. **12**(4): p. 244-255.
32. Tran, T.H., et al., *Talc, asbestos, and epidemiology: corporate influence and scientific incognizance*. Epidemiology, 2019. **30**(6): p. 783-788.
33. Gordon, R.E., S. Fitzgerald, and J. Millette, *Asbestos in commercial cosmetic talcum powder as a cause of mesothelioma in women*. International journal of occupational and environmental health, 2014. **20**(4): p. 318-332.

34. Burns, A.M., et al., *Potential airborne asbestos exposure and risk associated with the historical use of cosmetic talcum powder products*. Risk Analysis, 2019. **39**(10): p. 2272-2294.
35. Coalition, M.E. Asbestos. 2024 [cited 2024 November 8]; Available from: <https://mineralseducationcoalition.org/minerals-database/asbestos/>.
36. Cramer, D.W., et al., *Genital talc exposure and risk of ovarian cancer*. International journal of cancer, 1999. **81**(3): p. 351-356.
37. Chang, C.-J., et al., *Occupational exposure to talc increases the risk of lung cancer: A meta-analysis of occupational cohort studies*. Canadian respiratory journal, 2017. **2017**(1): p. 1270608.
38. Lynch, H.N., et al., *Systematic review of the association between talc and female reproductive tract cancers*. Frontiers in Toxicology, 2023. **5**: p. 1157761.
39. O'Brien, K.M., et al., *The association between douching, genital talc use, and the risk of prevalent and incident cervical cancer*. Scientific Reports, 2021. **11**(1): p. 14836.
40. Wentzensen, N. and K.M. O'Brien, *Talc, body powder, and ovarian cancer: a summary of the epidemiologic evidence*. Gynecologic Oncology, 2021. **163**(1): p. 199-208.
41. Boon, D., et al., *A systematic review of the epidemiology evidence on talc and cancer*. Critical Reviews in Toxicology, 2024: p. 1-24.
42. Almugren, K., et al., *The presence of NORMs and toxic heavy metals in talcum baby powder*. Journal of Radiation Research and Applied Sciences, 2023. **16**(4): p. 100660.
43. Keener, L., *Food safety and regulatory survey of food additives and other substances in human food*, in *Ensuring global food safety*. 2022, Elsevier. p. 259-273.
44. Delgado, R., et al., *The quality of Spanish cosmetic-pharmaceutical talcum powders*. Applied Clay Science, 2020. **193**: p. 105691.
45. Jadhav, N., et al., *Talc: A versatile pharmaceutical excipient*. World Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, 2013. **2**(2013): p. 4639-4660.

46. Loprieno, N., *International Agency for Research on Cancer (IARC) monographs on the evaluation of carcinogenic risk of chemicals to man:" relevance of data on mutagenicity"*. Mutation research, 1975. **31**(3): p. 210.
47. Humans, I.W.G.o.t.E.o.C.R.t., *Carbon black, titanium dioxide, and talc*. IARC monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans, 2010. **93**: p. 1.
48. (สมาคมฟิสิกส์ไทย), T.P.S. *Article 20*. 2024 [cited 2024 November 8]; Available from: <http://www.thaiphysoc.org/article/20/>.
49. Lambert, J.B., E.P. Mazzola, and C.D. Ridge, *Nuclear magnetic resonance spectroscopy: an introduction to principles, applications, and experimental methods*. 2019: John Wiley & Sons.
50. Pate, B.H., et al., *Quantitative chiral analysis by molecular rotational spectroscopy*, in *Chiral Analysis*. 2018, Elsevier. p. 679-729.
51. Dexheimer, S.L., *Terahertz spectroscopy: principles and applications*. 2017: CRC press.
52. Kong, J. and S. Yu, *Fourier transform infrared spectroscopic analysis of protein secondary structures*. Acta biochimica et biophysica Sinica, 2007. **39**(8): p. 549-559.
53. Rocha, F.S., et al., *Experimental methods in chemical engineering: Ultraviolet visible spectroscopy—UV-Vis*. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2018. **96**(12): p. 2512-2517.
54. Ceroni, M., F.S. Gobber, and M.A. Grande, *Ultraviolet–Visible–Near InfraRed spectroscopy for assessing metal powder cross-contamination: A multivariate approach for a quantitative analysis*. Materials & Design, 2024. **242**: p. 113023.
55. Alexander, L. and H.P. Klug, *Basic aspects of X-ray absorption in quantitative diffraction analysis of powder mixtures*. Analytical Chemistry, 1948. **20**(10): p. 886-889.
56. Hangyo, M., M. Tani, and T. Nagashima, *Terahertz time-domain spectroscopy of solids: a review*. International journal of infrared and millimeter waves, 2005. **26**: p. 1661-1690.

57. Zhao, G.-Z., *Terahertz time-domain spectroscopy and its applications*. Journal of Electronic Science and Technology, 2014. **12**(2): p. 146-149.
58. Sciences, I.o.P.o.t.C.A.o. *THz science and technology*. 2024; Available from: <https://www.fzu.cz/en/research/divisions-and-departments/division-2/departement-12/group-1206>.
59. Zhang, W.-B., *Review on analysis of biodiesel with infrared spectroscopy*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2012. **16**(8): p. 6048-6058.
60. Balan, V., et al., *Vibrational spectroscopy fingerprinting in medicine: from molecular to clinical practice*. Materials, 2019. **12**(18): p. 2884.
61. Rybarczyk-Pirek, A.J., et al., *Intramolecular hydrogen bonds in crystals of thiophosphorylbenzopyrane derivatives—X-ray and FT-IR studies*. Chemical physics, 2006. **320**(2-3): p. 247-258.
62. Bruker, B.V., *80/80v FT-IR Spectrometers*. URL <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>, 2021.
63. Krishnakumar, V., V. Balachandran, and T. Chithambarathanu, *Density functional theory study of the FT-IR spectra of phthalimide and N-bromophthalimide*. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2005. **62**(4-5): p. 918-925.
64. Qu, F., et al., *Spectral characterization and molecular dynamics simulation of pesticides based on terahertz time-domain spectra analyses and density functional theory (DFT) calculations*. Molecules, 2018. **23**(7): p. 1607.
65. Zhang, J., et al., *Experimental study of a terahertz time-domain spectrometer based on photoconductive antenna*. arXiv preprint arXiv:1402.1997, 2014.
66. Ashenhurst, J., *Infrared spectroscopy: a quick primer on interpreting spectra*. Master Organic Chemistry, 2016. **23**.
67. Martin, F., et al., *The structural formula of talc from the Trimouns deposit, Pyrénées, France*. The Canadian Mineralogist, 1999. **37**(4): p. 997-1006.

68. Xu, X., et al., *Measurement of talc in flour by the prompt-gamma ray neutron activation analysis method*. Applied Radiation and Isotopes, 2021. **178**: p. 109932.
69. Blanco, M. and I. Villarroya, *NIR spectroscopy: a rapid-response analytical tool*. TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2002. **21**(4): p. 240-250.
70. Wu, H., et al., *Near-Infrared Spectroscopy Study of OH Stretching Modes in Pyrophyllite and Talc*. Crystals, 2022. **12**(12): p. 1759.
71. Larentzos, J.P., J.A. Greathouse, and R.T. Cygan, *An ab initio and classical molecular dynamics investigation of the structural and vibrational properties of talc and pyrophyllite*. The Journal of Physical Chemistry C, 2007. **111**(34): p. 12752-12759.
72. Ulian, G., S. Tosoni, and G. Valdrè, *Comparison between Gaussian-type orbitals and plane wave ab initio density functional theory modeling of layer silicates: Talc [Mg₃Si₄O₁₀ (OH)₂] as model system*. The Journal of chemical physics, 2013. **139**(20).
73. FERRET, J., *THE STRUCTURAL FORMULA OF TALC FROM THE TRIMOUNS DEPOSIT, PYRENEES. FRANCE*.
74. Caballero-Agosto, E.R., et al., *Detection and quantification of corn starch and wheat flour as adulterants in milk powder by near-and mid-infrared spectroscopy coupled with chemometric routines*. Food Chemistry Advances, 2024. **4**: p. 100582.



ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-สกุล

ณิชกานต์ เต็มสายทอง

วุฒิการศึกษา

สำเร็จการศึกษาระดับมัธยมศึกษาตอนต้นและตอนปลาย โรงเรียนสมุทรสาคร
บูรณะ สมุทรสาคร ปีการศึกษา 2560 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรี
วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต (วศ.บ.) สาขาอิเล็กทรอนิกส์และระบบคอมพิวเตอร์
คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรมมหาวิทยาลัยศิลปากร ปี
การศึกษา 2564

ผลงานตีพิมพ์

ณิชกานต์ เต็มสายทอง, รุ่งโรจน์ จินตเมธาสวัสดิ์, เกียรติวุฒิ ประเสริฐสุข,
มติ ห่อประทุม, และ ระพีพันธ์ แก้วอ่อน. "การพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดเชิง
แสงแบบไม่ทำลายสำหรับการตรวจสอบการมีอยู่และประเภทการเคลือบผิว
ของทัลคัมในแป้งเด็ก" [Development of a Non-Destructive Optical
Measurement Technique for Identifying Talcum and Their
Coating Types in Baby Powder and Edible Starch]. วารสารงานวิจัย
และพัฒนาเชิงประยุกต์ โดยสมาคม ETCI, ฉบับที่ 2, หน้า 41-54, 2023.
<https://doi.org/10.12928/ectiard.v21i4.254278>

