

การพัฒนาเทคนิคการตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายสำหรับการตรวจสอบการมีอยู่และประเภทการเคลือบผิวของทัลคัมในแป้งเด็กและแป้งบริโภคน

Development of a Non-Destructive Optical Measurement Technique for Identifying Talcum and Their Coating Types in Baby Powder and Edible Starch

นิชกานต์ เต็มสายทอง¹, รุ่งโรจน์ จินตเมธาสวัสดิ์², เกียรติวุฒิ ประเสริฐสุข³, มติ ห่อประทุม², และระพีพันธ์ แก้วอ่อน^{1*}

¹ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัยศิลปากร
²ศูนย์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ, อุทยานวิทยาศาสตร์แห่งประเทศไทย
³สำนักนวัตกรรมดิจิทัลและเทคโนโลยีสำนักงานคณะกรรมการนโยบายเขตพัฒนาพิเศษภาคตะวันออก
* ผู้รับผิดชอบบทความ
kaewon_r@su.ac.th

Received: 30 May 2024
Revised: 6 Jul 2024
Accepted: 16 Jul 2024

บทคัดย่อ

บทความนี้เสนอวิธีการตรวจวัดการใช้แร่ทัลคัม และการจำแนกประเภทการเคลือบผิวของแร่ทัลคัม ซึ่งแร่ดังกล่าวถูกนำมาใช้เป็นส่วนประกอบหลักในอุตสาหกรรมและผลิตภัณฑ์ดูแลส่วนบุคคล โดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ทำลายด้วยเทคนิคสเปกโตรสโกปี (Spectroscopy) ในย่านอินฟราเรดกลาง (Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far-IR) ซึ่งในงานนี้จะใช้เครื่อง Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ทำการเก็บข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด และข้อมูลสเปกตรัมที่ได้จะถูกนำมาวิเคราะห์โดยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) จากผลการทดลองพบว่า หากใช้โมเดล Extra Trees Classifier ในการทำนายแร่ทัลคัมบริสุทธิ์จำนวน 150 สเปกตรัมที่ผ่านการเคลือบที่แตกต่างกัน พบว่า เทคนิคนี้จะสามารถจำแนกประเภทการเคลือบผิวของทัลคัมได้อย่างถูกต้องสูงถึง 97.14% ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล ทั้งนี้ โมเดลยังถูกนำมาฝึกฝนเพิ่มเติมและนำไปประยุกต์ใช้กับสเปกตรัมที่วัดได้จากผลิตภัณฑ์แป้งสำหรับเด็กและสำหรับบริโภคจำนวน 60 สเปกตรัม เพื่อนำมาใช้ในการจำแนกประเภทระหว่างผลิตภัณฑ์แป้งที่มีส่วนผสมทัลคัมและปราศจากทัลคัม จากผลการทดสอบพบว่า ในย่านอินฟราเรดกลาง โมเดลมีความถูกต้องในการจำแนกอยู่ที่ 93.33% ในขณะที่ในย่านอินฟราเรดไกล โมเดลมีความถูกต้องในการจำแนกมากกว่าอยู่ที่ 100% ใน จากผลการทดสอบทั้งหมดแสดงให้เห็นถึงศักยภาพในการนำเทคนิคที่เสนอนี้ไปใช้ในการตรวจวัดและประเภทการเคลือบแร่ทัลคัมในผลิตภัณฑ์แป้งที่ จะช่วยลดการพึ่งพาผู้เชี่ยวชาญ ลดต้นทุน และเพิ่มความมั่นใจในคุณภาพและความปลอดภัยของผลิตภัณฑ์แป้ง

คำสำคัญ: การจำแนกการเคลือบผิวทัลคัม การตรวจวัดทัลคัม พูเรียทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโตรสโกปี การเรียนรู้ของเครื่อง ผลิตภัณฑ์แป้ง

Abstract

This article proposes methods for detecting the use of talc and classifying the coating types of talc, which is a primary component in industrial and personal care products, using non-destructive optical measurement techniques via spectroscopy in the mid-infrared (Mid-IR) and far-infrared (Far-IR) regions. This study used a Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) device to collect the complete spectral data, which was then analyzed using a machine learning

technique. Experimental results show that, by using the Extra Trees Classifier model to predict 150 pure talc spectra with different coatings, this technique can correctly classify talc coating types with an accuracy of 97.14% in both the mid-infrared and far-infrared regions. Consequently, the model is additionally trained and applied to spectra measured from 60 powder product samples, including baby powder and edible starch, to classify talc-free and talc-based products. The testing results show that the model achieves a classification accuracy of 93.33% in the mid-infrared region. In contrast, in the far-infrared region, the model achieves a perfect classification accuracy of 100%. These findings demonstrate the potential of the proposed technique for detecting talc and its coating types in talcum powder products, thereby reducing reliance on experts, lowering costs, and increasing confidence in the quality and safety of powder products.

Keywords: Talcum Coating Classification, Talcum Detection, Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR), Machine Learning, Powder Products

1. บทนำ

แม้ว่ารายงานการศึกษาที่ผ่านมาจะพบว่า การใช้แป้งฝุ่นที่มีส่วนประกอบของแร่ทัลคัมมีแนวโน้มทำให้เกิดโรคมะเร็ง [1-4] และทำให้ผู้บริโภคเริ่มมีความกังวลเกี่ยวกับผลิตภัณฑ์ที่มีทัลคัมเป็นส่วนประกอบ แต่ในปัจจุบันยังคงมีการนำเอาทัลคัมมาใช้ในหลายด้านเนื่องด้วยคุณสมบัติที่โดดเด่น โดยเฉพาะความสามารถในการปรับปรุงคุณสมบัติทางกายภาพของผลิตภัณฑ์ เช่น ช่วยเพิ่มความยืดเกาะ ความทนทาน และความนุ่มนวล ซึ่งแร่ทัลคัมที่นิยมใช้ในผลิตภัณฑ์ดูแลส่วนบุคคลมักจะผ่านกระบวนการเคลือบด้วยสาร Silane หรือ Methicone ตามประเภทของผลิตภัณฑ์ เช่น เครื่องสำอาง ยา และพลาสติก [5-6] อย่างไรก็ตาม การเคลือบเหล่านี้ยังทำให้เกิดความเสี่ยงทั้งในด้านสุขภาพของผู้ใช้

และผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม เช่น อาจก่อให้เกิดการแพ้ระคายเคือง ความเสี่ยงในการเกิดโรคปอด ยากต่อการกำจัดและรีไซเคิล [7] และมีความเสี่ยงต่อการปนเปื้อนโลหะหนักอย่างแร่ใยหินที่มีแหล่งค้นพบใกล้เคียงกันกับแร่ทัลคัมที่ขุดพบ [8-9] ดังนั้น การตรวจจับการใช้แร่ทัลคัม และการจำแนกประเภทการเคลือบผิวของแร่ทัลคัมจึงมีความสำคัญ เพราะช่วยทำให้สามารถตรวจสอบประเภทของการเคลือบให้แน่ใจว่ามีความเหมาะสมกับประเภทของผลิตภัณฑ์ ลดการสูญเสียทรัพยากร ลดความเสียหายต่อผลิตภัณฑ์ มีความปลอดภัยต่อการใช้งาน ป้องกันความเสี่ยงต่อสุขภาพของผู้บริโภค

ในปัจจุบัน วิธีการตรวจวัดทัลคัมที่นิยมใช้ ได้แก่ เทคนิค X-ray Diffraction (XRD) [10] Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) [11] และ Near-Infrared (NIR) Spectroscopy [12] ซึ่งมีข้อจำกัดหลายประการ เช่น ทำให้เกิดความเสียหายของตัวอย่าง ใช้ระยะเวลาในการวิเคราะห์นาน และต้องอาศัยผู้ปฏิบัติงานที่มีความเชี่ยวชาญ งานวิจัยนี้จึงมีการนำเทคนิคสเปกโทรสโกปี (Spectroscopy Technique) มาใช้ในการตรวจสอบทัลคัม ซึ่งเป็นเทคนิคที่รวดเร็ว มีกระบวนการที่ไม่ซับซ้อน และไม่ทำลายตัวอย่าง (non-destructive) ทำให้เทคนิคนี้ถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์ตัวอย่างได้ทั้งในเชิงคุณภาพและปริมาณอย่างแพร่หลาย [13] โดยอาศัยการวัดผ่านเครื่อง Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ข้อมูลที่ได้จากเครื่องดังกล่าวจะอยู่ในรูปแบบของสเปกตรัม ที่บ่งบอกการเปลี่ยนแปลงพลังงานของโมเลกุลและให้ข้อมูลการดูดกลืนที่แตกต่างกันของสารเคมีนั้นๆ (Fingerprint) โดยข้อจำกัดของเทคนิคนี้สารที่ใช้ในการทดสอบมักอยู่ในรูปแบบของแข็งหรือก๊าซ เนื่องจากการใช้ FT-IR ในการวัดของเหลวอาจมีข้อจำกัดในการเตรียมตัวของตัวอย่างและการละลายของสารที่มีความเข้มข้นต่ำหรือมีการละลายที่ไม่ดีพอสำหรับการวัด

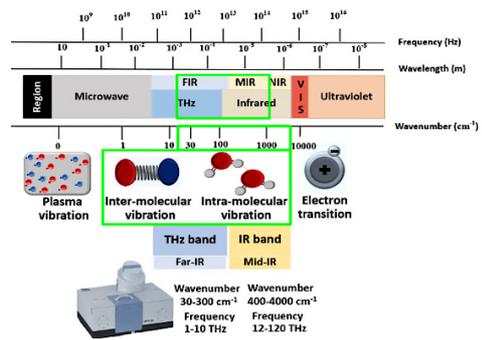
ในการศึกษานี้ใช้เทคนิค Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) ที่มีประสิทธิภาพสูงเพื่อวัดสเปกตรัมของทัลคัมบริสุทธิ์ ผลิตภัณฑ์แป้งเด็ก และผลิตภัณฑ์แป้งสำหรับบริโภคที่อยู่ในรูปแบบผง โดยวัดในย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region ;Mid-IR) และอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; Far-IR) ซึ่งมีคุณลักษณะเฉพาะในการดูดกลืนแสงที่ช่วยในการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลคัม นอกจากนี้ งานวิจัย

ยังได้ประยุกต์ใช้การวิเคราะห์ข้อมูลด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพและความน่าเชื่อถือของกระบวนการวิเคราะห์ ลดระยะเวลา และสามารถจัดการกับชุดข้อมูลขนาดใหญ่ได้อย่างมีประสิทธิภาพ กระบวนการนี้นำไปสู่การสร้างแบบจำลองที่สามารถจำแนกประเภทการเคลื่อนของแร่ที่ลึกลับได้ รวมทั้งตรวจจับและจำแนกผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีที่ลึกลับและปราศจากที่ลึกลับ ผลการทดลองที่ได้แสดงให้เห็นว่าแนวทางนี้ช่วยให้สามารถตรวจจับที่ลึกลับที่ผ่านการเคลื่อนในแบบต่างๆ ได้รวดเร็ว ทั้งในแป้งฝุ่นสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภคลดต้นทุน ลดความซับซ้อนในการวิเคราะห์ และลดการพึ่งพาบุคลากรเฉพาะทาง

2. วิธีการและทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

2.1 เทคนิคสเปกโทรสโกปี (Spectroscopy Technique)

เทคนิคสเปกโทรสโกปี เป็นเทคนิคที่ใช้ในการศึกษาอันตรกิริยา (Interaction) ระหว่างสารตัวอย่างกับคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้า สำหรับรูปแบบของเทคนิคสเปกโทรสโกปีที่ใช้ คือ Absorption Spectroscopy ที่ใช้ศึกษาการดูดกลืนพลังงานคลื่นของสารตัวอย่าง โดยคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ส่องผ่านสารตัวอย่าง จะทำให้อะตอมภายในโมเลกุลเกิดการสั่นสะเทือน (Vibration) และโมเลกุลในตัวอย่างจะดูดซับรังสี (Absorption) บางส่วนที่ความยาวคลื่นจำเพาะ คลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่นิยมใช้ในการตรวจวัดรูปแบบนี้ จะมีความถี่อยู่ในย่านอินฟราเรด (IR) ที่ได้รับความนิยมอย่างแพร่หลายสำหรับใช้ในการวิเคราะห์สสาร โดยมีช่วงเลขคลื่น (Wavenumber) ตั้งแต่ 30 ถึง 4,000 cm^{-1} อีกทั้งการตรวจวัดรูปแบบนี้ยังมีประสิทธิภาพในการวิเคราะห์แบบไม่ทำลายตัวอย่าง (Non-destructive) และใช้ปริมาณตัวอย่างปริมาณน้อย โดยผลลัพธ์ที่ได้จะแสดงผลออกมาในลักษณะของสเปกตรัมที่แตกต่างกัน (Fingerprint) ดังนั้นจึงสามารถใช้สเปกตรัมเหล่านี้ในการระบุอันตรกิริยาทั้งภายในโมเลกุล (Intra-Molecular Vibrations) ระหว่างโมเลกุล (Inter-Molecular Vibrations) กลุ่มฟังก์ชันเฉพาะในตัวอย่าง ตลอดจนการกำหนดความบริสุทธิ์หรือวิเคราะห์องค์ประกอบของสารที่มีความซับซ้อนดังแสดงในรูปที่ 1

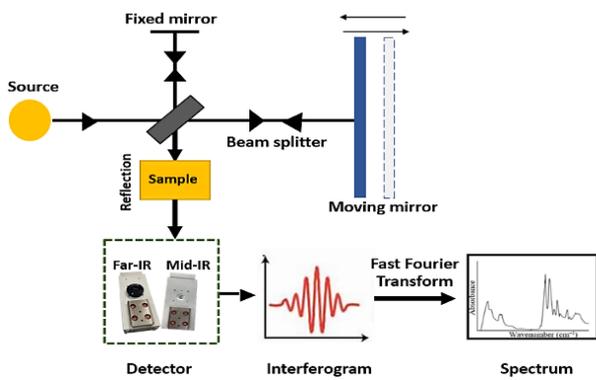


รูปที่ 1 แสดงหลักการของเทคนิค Absorption Spectroscopy โดยอาศัยความถี่ของคลื่นแม่เหล็กไฟฟ้าที่ต่างกันในการศึกษาอันตรกิริยาแบบต่างๆ ของสารตัวอย่าง

2.2 เทคนิคการตรวจวิเคราะห์ด้วยเครื่องฟูเรียร์ทรานซ็อมอินฟราเรดสเปกโตรสโคปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy; FT-IR)

ในการศึกษารุ่นนี้ได้เลือกใช้เครื่องมือวัดสัญญาณสเปกตรัมแบบ Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR) (VERTEX 80v, Bruker, MA, USA) โดยทำการเก็บข้อมูลในคลื่นย่านอินฟราเรดกลาง (Middle Infrared Region; Mid-IR) และย่านอินฟราเรดไกล (Far Infrared Region; Far-IR) ซึ่งเทคนิคดังกล่าวได้ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในการจำแนกประเภทของสารอินทรีย์ สารอนินทรีย์ และพันธะเคมีในโมเลกุล สำหรับหลักการการทำงานจะเริ่มจากการส่องแสงอินฟราเรดไปยังตัวอย่าง โดยพลังงานของแสงที่เดินทางผ่านตัวอย่างจะถูกดูดกลืนไปบางส่วนโดยโมเลกุลของสารตัวอย่าง และแสงที่เดินทางผ่านตัวอย่างแล้วถูกจะสะท้อนโดยกระจกที่อยู่ฝั่งตรงข้าม การปรับตำแหน่งของกระจกที่เคลื่อนที่ได้ (Moving mirror) จะเป็นการเปลี่ยนระยะและเวลาที่แสงเดินทางในเส้นทางหนึ่ง และเมื่อแสงในเส้นทางนั้นรวมกับแสงที่อยู่ในอีกเส้นทางหนึ่งที่สะท้อนมาจากกระจกที่อยู่กับที่ (Fixed mirror) ก็จะทำให้เกิดรูปแบบการแทรกสอดของแสงที่แตกต่างไปตามโครงสร้างและองค์ประกอบของโมเลกุลของสาร โดยรูปแบบการแทรกสอดนั้นจะถูกตรวจวัดด้วยตัวรับสัญญาณที่สามารถวัดค่าพลังงานของแสงที่เหลืออยู่ในแต่ละความยาวคลื่นได้ และข้อมูลที่วัดได้นี้ จะถูกนำเข้าสู่กระบวนการฟูเรียร์ทรานซ็อม (Fourier Transform) ซึ่งเป็นกระบวนการที่แปลงสัญญาณที่วัดได้ ให้อยู่ในรูปแบบของ

สเปกตรัมการดูดกลืนแสงที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มของแสงกับความถี่หรือเลขคลื่น ดังแสดงในรูปที่ 2



รูปที่ 2 หลักการทำงานของเครื่องฟูเรียร์ทรานส์ฟอร์มอินฟราเรดสเปกโตรสโกปี (Fourier Transform Infrared Spectroscopy; FT-IR)

2.3 การเตรียมตัวอย่าง (Sample Preparation)

ในการศึกษานี้จะใช้ตัวอย่างที่ผ่านกระบวนการเคลือบที่แตกต่างกัน 3 แบบ ได้แก่ ทัลคัมที่ไม่ผ่านกระบวนการเคลือบ (Original) ทัลคัมที่ผ่านกระบวนการเคลือบด้วยเมทิลโคน (Methicone Coated) และทัลคัมที่ผ่านกระบวนการเคลือบด้วยซิลเลน (Silane Coated) โดยสารตัวอย่างทัลคัมทั้งหมดที่ใช้เป็นเกรดเชิงวิเคราะห์ (ความบริสุทธิ์ >96%) ส่วนโพลีเอทิลีน (Polyethylene; PE) และโพแทสเซียมโบรไมด์ (Potassium bromide; KBr) จาก (Sigma-Aldrich, MO, USA) ถูกใช้เป็นสารยึดเกาะสำหรับการผสมสารตัวอย่างทัลคัม ตัวอย่างทั้งหมดจะถูกจัดเตรียมในรูปแบบผงโดยเริ่มจากการนำสารตัวอย่างทัลคัมผสมกับสารยึดเกาะในอัตราส่วนที่ต่างกันตามย่านความถี่ กล่าวคือ ในย่านอินฟราเรดกลาง จะผสมตัวอย่างกับ KBr ที่อัตราส่วน 1:99 (w/w) ตวงสารผสมน้ำหนัก 100 มิลลิกรัม ส่วนในย่านอินฟราเรดไกลจะผสมตัวอย่างกับ PE ที่อัตราส่วนมวล 15:85 (w/w) ตวงสารผสมน้ำหนัก 30 มิลลิกรัม นำไปบรรจุใส่ในเครื่องอัดเม็ดกลม (Pellet Pressure) แบบไฮดรอลิก ภายใต้อุณหภูมิและความดัน 7 ตันเป็นเวลา 5 นาที สารตัวอย่างจึงจะอยู่ในรูปแบบเม็ด ซึ่งสามารถนำตัวอย่างเม็ดไปเก็บไว้ในถุงพลาสติก (PE) เพื่อ

เตรียมบรรจุใส่วงล้อบรรจุตัวอย่าง (Sample Wheel) ของเครื่อง FT-IR และทำการวัดในลำดับถัดไป

ในงานวิจัยนี้ เราได้ทำการเก็บข้อมูลตัวอย่างของทัลคัมสามกลุ่ม ได้แก่ ทัลคัมที่ไม่ผ่านกระบวนการเคลือบ ทัลคัมที่ผ่านกระบวนการเคลือบด้วย Methicone และทัลคัมที่ผ่านกระบวนการเคลือบด้วย Silane โดยในแต่ละกลุ่มเราได้เก็บตัวอย่างจำนวน 5 ตัวอย่างในแต่ละย่านความถี่ (อินฟราเรดกลางที่เลขคลื่น 400-4,000 cm^{-1} และอินฟราเรดไกลที่เลขคลื่น 30-300 cm^{-1}) สำหรับแต่ละตัวอย่างจะทำการวัดข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด 10 ครั้ง ส่งผลให้ได้จำนวนสเปกตรัมทั้งหมด 50 สเปกตรัมต่อกลุ่มการเคลือบ รวมทั้งหมด 150 สเปกตรัมสำหรับทั้งสามกลุ่มการเคลือบ โดยข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดนี้จะถูกนำไปใช้ในการสร้างโมเดลสำหรับแยกประเภทการเคลือบผิวของทัลคัม

เมื่อโมเดลสามารถแยกประเภทการเคลือบผิวของทัลคัมได้อย่างแม่นยำแล้ว ข้อมูลสเปกตรัมจากทั้งสามกลุ่มการเคลือบ (ทั้งหมด 150 สเปกตรัม) จะถูกนำมาใช้เพื่อฝึกฝนโมเดลเพิ่มเติมในการจำแนกประเภทของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีและไม่มีส่วนประกอบของทัลคัม ข้อมูลเหล่านี้เป็นข้อมูลที่สำคัญในการตรวจสอบการมีอยู่ของทัลคัมในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นได้อย่างมีประสิทธิภาพมากขึ้น ข้อมูลจากการวิเคราะห์การเคลือบผิวจะเป็นตัวชี้วัดสำคัญที่ช่วยให้โมเดลสามารถจดจำและตรวจสอบลักษณะเฉพาะของทัลคัมได้อย่างมีประสิทธิภาพ ในการฝึกฝนโมเดลเพิ่มเติม นั้น ข้อมูลที่ใช้มาจะเป็นสเปกตรัมที่ได้จากผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่ไม่มีส่วนประกอบของทัลคัม โดยแบ่งเป็นผลิตภัณฑ์จากสารเติมแต่งเครื่องสำอาง 4 ชนิด ทั้งหมด 120 สเปกตรัม และผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค 4 ชนิด ทั้งหมด 20 สเปกตรัม รวมทั้งหมดเป็น 140 สเปกตรัม ดังนั้น ข้อมูลที่ใช้ในการฝึกฝนเพื่อตรวจสอบการมีอยู่ของทัลคัมมีทั้งสิ้น 290 สเปกตรัม

นอกจากนี้ยังมีการเก็บตัวอย่างจากผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่หาซื้อได้ตามห้างสรรพสินค้าชั้นนำเพื่อใช้เป็นข้อมูลชุดทดสอบประสิทธิภาพการตรวจสอบการมีอยู่ของทัลคัม โดยแบ่งเป็นผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กที่มีทั้งสูตรที่มีส่วนประกอบของทัลคัม (จำนวน 5 แบรินด์) และสูตรปราศจากทัลคัม (จำนวน 4 แบรินด์) ซึ่งแต่ละแบรินด์ถูกวัดจำนวน 5 สเปกตรัม รวม

ทั้งหมด 45 สเปกตรัม และผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค 3 ชนิดที่มีการใช้อย่างแพร่หลายมากที่สุด ได้แก่ แป้งสาลี, แป้งข้าวเจ้าและแป้งข้าวโพด [14-15] จำนวนชนิดละ 5 สเปกตรัม รวม 15 สเปกตรัม รวมทั้งหมด 60 สเปกตรัม

การทดสอบโมเดลที่สร้างกับผลิตภัณฑ์จริงจะช่วยเพิ่มความมั่นใจในการนำไปใช้งานจริง และช่วยตรวจสอบคุณภาพและความปลอดภัยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นในท้องตลาดทั่วไป โดยผู้ผลิตสามารถตรวจสอบการมีอยู่หรือการเคลือบผิวของทัลคัมได้อย่างรวดเร็วและแม่นยำ รวมถึงช่วยในการพัฒนาผลิตภัณฑ์ใหม่ได้อย่างมีประสิทธิภาพ

2.4 วิธีการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing)

ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมดที่ได้จากการวัดผ่านเครื่อง FT-IR จะถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์ผล เพื่อการตีความผลลัพธ์อย่างมีประสิทธิภาพ ในที่นี้ได้ทำการประมวลผลข้อมูลสเปกตรัมเบื้องต้นทั้งหมดสองวิธี ได้แก่ 1. การเลือกช่วงของสเปกตรัม (Wavenumber Selection) เพื่อตัดข้อมูลสเปกตรัมในช่วงเลขคลื่นที่ไม่สำคัญหรือไม่เกี่ยวข้องออกไป สามารถช่วยลดขนาดข้อมูลที่จำเป็นและเพิ่มความชัดเจนให้กับส่วนที่สนใจของสเปกตรัม 2. การปรับเส้นฐานสเปกตรัม (Baseline Removal) เพื่อทำการลดความเข้มของสัญญาณสเปกตรัมที่เกิดจากการกระเจิงสัญญาณแสงบนตัวอย่างในระหว่างการเก็บข้อมูล (Scattering Effects) ทำให้สัญญาณสเปกตรัมที่ได้แสดงรูปแบบการดูดกลืนที่ชัดเจนมากขึ้นและ 3. การลบค่าผิดปกติ (Outlier Removal) เพื่อลบข้อมูลสเปกตรัมที่มีค่าผิดปกติหรือห่างจากค่าปกติในชุดข้อมูลนั้นออกไป ขั้นตอนทั้งหมดนี้จะถูกทำกับชุดข้อมูลสำหรับการฝึกฝนโมเดล (Training dataset) ซึ่งเป็นชุดข้อมูลที่ใช้ในการเรียนรู้ของเครื่อง หลังจากที่ไม่ได้ผ่านการฝึกฝนเรียบร้อยแล้ว จึงนำโมเดลที่ฝึกฝนแล้วไปทดสอบหรือใช้กับชุดข้อมูลทดสอบ (Test dataset) เพื่อทดสอบประสิทธิภาพของโมเดลในการจำแนกและการตรวจจับทัลคัมในตัวอย่างที่ไม่เคยเห็นมาก่อน

2.5 การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA)

สเปกตรัมทั้งหมดที่ผ่านการประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น จะถูกนำมาจัดกลุ่มประเภทการเคลือบ โดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA) ที่ทำการแปลงข้อมูลสเปกตรัมให้อยู่ในอีกระบบพิกัดหนึ่ง โดยข้อมูลที่ถูกลดแล้วจะมีจำนวนมิติเท่าเดิม แต่จะมีการเรียงลำดับความสำคัญในการอธิบายข้อมูลจากมากไปน้อย กล่าวคือ ตัวแปรที่อยู่ในมิติแรกๆ มักจะถูกเรียกว่า Principal Components (PCs) ที่สามารถใช้อธิบายรูปแบบข้อมูลในสเปกตรัมได้ส่วนใหญ่หรือเกือบทั้งหมด ดังนั้นกระบวนการดังกล่าวจึงทำให้สามารถเลือกใช้ Principal Components เพียงแค่ 2-3 ตัวแปร เพื่อบรรยายคุณลักษณะของข้อมูลสเปกตรัมได้เกือบทั้งหมด ซึ่งหลักการนี้จะช่วยทำให้ลดขนาดมิติ (Dimensionality Reduction) ของข้อมูลได้ และนอกจากนี้ Principal Components ที่ได้สามารถนำมาใช้แสดงผลความแตกต่างของข้อมูลให้อยู่ในรูปแบบที่เข้าใจง่ายมากขึ้น ดังแสดงในรูปของผลการทดลองที่จะนำเสนอในลำดับถัดไป

2.6 การเรียนรู้ด้วยเครื่อง (Machine Learning)

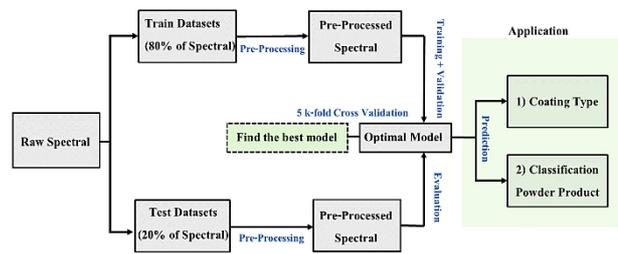
ในการวิจัยนี้เราใช้เทคนิคการวิเคราะห์ข้อมูลสเปกตรัมจากเครื่อง FT-IR เพื่อจำแนกประเภทการเคลือบผิวของทัลคัมที่แตกต่างกัน 3 ประเภทและตรวจจับการมีอยู่ของทัลคัม โดยใช้โมเดล Machine Learning ชุดข้อมูลฝึกอบรมถูกใช้ในสัดส่วน 80% ของข้อมูลทั้งหมด เพื่อสร้างโมเดล และชุดข้อมูลทดสอบถูกใช้ในสัดส่วน 20% เพื่อตรวจสอบประสิทธิภาพของโมเดลที่สร้างขึ้นและเพื่อป้องกันการเกิด Overfitting ที่อาจเกิดขึ้นจากความซับซ้อนของโมเดล เราจึงได้ทำการลด Dimensionality ของข้อมูลด้วยเทคนิค PCA เพื่อลดความซับซ้อนและช่วยให้โมเดลสามารถเข้าใจโครงสร้างข้อมูลได้มากยิ่งขึ้น นอกจากนี้ PCA ยังช่วยลดความเสี่ยงในการเกิด Overfitting โดยการลบข้อมูลที่จำเป็นออกไปจากข้อมูลฝึกอบรม

สำหรับกระบวนการเรียนรู้ด้วยเครื่องแบบอัตโนมัตินี้ เพื่อจำแนกหรือทำนายประเภทการเคลือบของทัลคัมจากข้อมูลสเปกตรัม FT-IR จะต้องมีการทำ Data Pre-Processing เพื่อให้ข้อมูลพร้อมใช้งานกับโมเดลได้อย่างเหมาะสมทุกครั้งทำการฝึกอบรมและประเมินโมเดล เมื่อได้รับข้อมูลที่ถูกรวมผลเบื้องต้นแล้ว ข้อมูลในชุดฝึกอบรมจะถูกแบ่งออกเป็นส่วนใหญ่

สำหรับการฝึกโมเดล 80% และส่วนข้อมูลตรวจสอบ (Validation Dataset) สำหรับปรับปรุง Hyperparameters ของโมเดล เพื่อป้องกันการเกิด Overfitting และให้โมเดลมีประสิทธิภาพที่ดีที่สุด เพื่อปรับปรุง Hyperparameters ของโมเดลอย่างมีประสิทธิภาพและลดความเสี่ยงในการเกิด Overfitting เราใช้เทคนิค k-fold Cross Validation โดยทำการแบ่งชุดฝึกอบรวมออกเป็น k ส่วนเท่าๆ กัน (ในที่นี้ k = 5) กล่าวคือชุดฝึกอบรวมทั้งหมดจะถูกแบ่งออกเป็น 5 ส่วนเท่าๆ กัน ในแต่ละรอบของการ cross-validation (fold) 4 folds จะถูกใช้ เป็น training set และ 1 fold จะถูกใช้ เป็น validation set กระบวนการนี้จะถูกทำซ้ำทั้งหมด 5 รอบ โดยในแต่ละรอบ validation set จะเป็นกลุ่มที่แตกต่างกัน จากนั้นจะประเมินโมเดลในแต่ละ fold โดยเก็บประสิทธิภาพของโมเดลที่ได้ในแต่ละรอบ (fold) เพื่อหาค่าเฉลี่ยของประสิทธิภาพของโมเดลที่ถูกต้องที่สุด ดังนั้น k-fold Cross Validation ช่วยให้เรามั่นใจได้ว่าโมเดลของเรามีประสิทธิภาพในการจำแนกและทำนายประเภทการเคลือบของทัลค์และลดความเสี่ยงในการเกิด Overfitting จากการฝึกโมเดลด้วยข้อมูลฝึกอบรวมทั้งหมดที่ใช้ในการสร้างโมเดลครั้งนี้

ในการศึกษานี้ เราได้เลือกใช้โมเดลการเรียนรู้ของเครื่องสามประเภท ได้แก่ 1. Extra Trees Classifier 2. Random Forest Classifier และ 3. Logistic Regression โดยที่เลือกใช้โมเดลเหล่านี้มาใช้เนื่องจากโมเดลทั้งสามนี้ทำให้เราได้เปรียบเทียบโมเดลที่ใช้เทคนิคแตกต่างกัน ได้แก่เปรียบเทียบประสิทธิภาพระหว่างโมเดลที่ง่ายต่อการตีความและโมเดลที่ซับซ้อนและเห็นถึงความแตกต่างในการจัดการกับปัญหา overfitting ซึ่งจะช่วยให้เราเห็นภาพรวมของประสิทธิภาพโมเดลในสถานการณ์ต่างๆ โดยแต่ละโมเดลจะถูกปรับปรุง Hyperparameters ผ่านกระบวนการตรวจสอบข้อมูล (Validation) เพื่อให้ได้โมเดลที่มีประสิทธิภาพสูงสุด ทั้งนี้ประสิทธิภาพของแบบจำลองจะถูกประเมินผ่านตัวชี้วัดดังนี้ 1. อัตราส่วนของการทำนายที่ถูกต้องทั้งหมด (Accuracy; ACC) 2. พื้นที่ใต้กราฟ ROC ซึ่งบ่งชี้ความสามารถในการแยกแยะระหว่างคลาส (Area Under the Curve; AUC) 3. ความแม่นยำในการทำนาย (Precision; Prec.) และ 4. ความสามารถในการค้นหาวางอย่างที่เป็น Positive (Recall) เมื่อได้โมเดลที่มีประสิทธิภาพ

มากที่สุดแล้ว จึงนำค่าที่คำนวณได้มาอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกลมาเปรียบเทียบกัน เพื่อหาว่าสเปกตรัมในช่วงคลื่นความถี่ใดให้ผลลัพธ์การจำแนกที่ดีที่สุด ซึ่งขั้นตอนนี้จะช่วยให้สามารถเลือกใช้ช่วงคลื่นความถี่ที่เหมาะสมที่สุดสำหรับการวิเคราะห์ต่อไป รูปที่ 3 แสดงการเรียนรู้ด้วยเครื่อง และการทำนายประเภทการเคลือบของทัลค์จากโมเดลที่ได้รับการฝึกอบรวมแล้ว



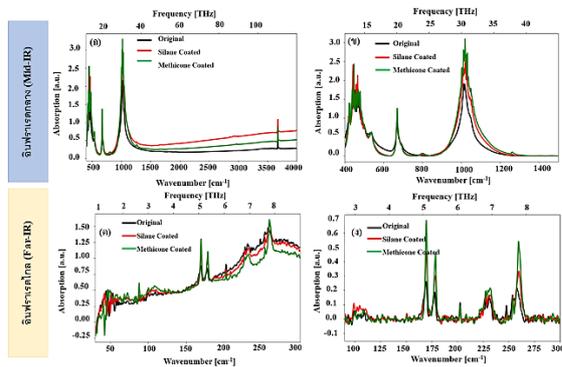
รูปที่ 3 กระบวนการเรียนรู้ด้วยเครื่อง สำหรับใช้จำแนกประเภทการเคลือบทัลค์จากข้อมูลสเปกตรัมการดูดกลืนแสง ทั้งในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล

3. ผลการทดลอง

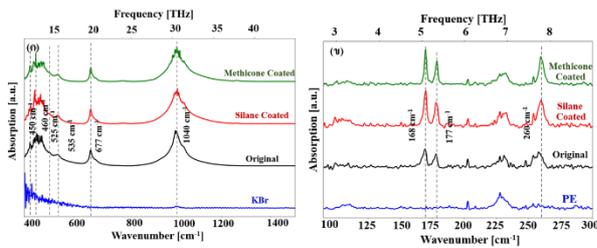
3.1 รูปแบบของสเปกตรัมการดูดกลืนแสง (Absorption Spectra) และกระบวนการประมวลผลเบื้องต้น (Spectral Pre-Processing)

ตัวอย่างสเปกตรัมของทัลค์ที่มีการเคลือบที่แตกต่างกัน 3 ชนิดที่วัดได้จากเครื่อง FT-IR ก่อนการประมวลผลเบื้องต้น ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล แสดงในรูปที่ 4 (ก) และ (ค) ตามลำดับ จากรูปจะเห็นได้ว่า เส้นสเปกตรัมการดูดกลืนแสงที่ได้นั้นมีสัญญาณในบางช่วงของเลขคลื่นที่เป็นสิ่งรบกวน และเส้นสเปกตรัมมีระดับเส้นฐานที่แตกต่างกัน ซึ่งอาจทำให้ความเข้มสัญญาณสเปกตรัมผิดเพี้ยนไป และทำให้การวิเคราะห์และการตีความข้อมูลไม่ถูกต้อง เพื่อให้ข้อมูลสเปกตรัมมีข้อมูลที่เหมาะสำหรับการวิเคราะห์ จึงต้องทำการประมวลผลเบื้องต้นกับข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด โดยในย่านอินฟราเรดกลาง ได้ทำการเลือกใช้สเปกตรัมในช่วงเลขคลื่นที่บริเวณ 400-1,500 cm^{-1} เท่านั้น พร้อมกับทำการปรับเส้นฐานของสเปกตรัมทั้งหมดให้อยู่ในระดับ

เดียวกัน ดังแสดงในรูปที่ 4 (ข) ส่วนในย่านอินฟราเรดไกล ทำการเลือกใช้สเปกตรัมในช่วงเลขคลื่นที่บริเวณ 90-300 cm^{-1} พร้อมทั้งทำการปรับเส้นฐานของสเปกตรัมทั้งหมดให้อยู่ในระดับเดียวกัน ดังแสดงในรูปที่ 3 (ง) การประมวลผลสเปกตรัมเบื้องต้น จะช่วยลดโอกาสที่จะมีข้อมูลที่ไม่เกี่ยวข้อง เพื่อให้ได้ข้อมูลที่มีคุณภาพและเป็นประโยชน์สูงสุดในการวิเคราะห์



รูปที่ 4 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงก่อนในย่านการวัดอินฟราเรดกลาง (ก) ก่อนประมวลผลล่วงหน้า และ (ข) หลังประมวลผลล่วงหน้า และในย่านการวัดอินฟราเรดไกล (ค) ก่อนประมวลผลล่วงหน้า และ (ง) หลังประมวลผลล่วงหน้า



รูปที่ 5 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ย ($n = 50$) ของฟิล์มที่ผ่านการเคลือบต่างกัน (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล โดยสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดกลาง

3.2 การวิเคราะห์คุณลักษณะการดูดกลืนแสง (Spectral Absorption Characteristics Analysis)

รูปที่ 5 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงเฉลี่ยของสารฟิล์มบริสุทธิ์ที่ผ่านการเคลือบ 3 ชนิด คือ ไม่ผ่านการเคลือบ ผ่านการเคลือบด้วย Methicone และผ่านการเคลือบด้วย Silane โดยตัวอย่างทั้งหมดถูกผสมกับตัวยึดเกาะอย่างโพรแทสเซียมโบรไมด์ (KBr)

ในกรณีของย่านอินฟราเรดกลาง (รูปที่ 5 (ก)) และโพลีเอทิลีน (PE) ในกรณีของย่านอินฟราเรดไกล (รูปที่ 5 (ข)) จากรูปจะเห็นได้ว่า แม้ฟิล์มจะมีการเคลือบที่ต่างกัน แต่ยังคงให้ผลสเปกตรัมที่แสดงยอดพีค (Peaks) ในบริเวณเดียวกัน

ฟิล์ม หรือในชื่อทางเคมีคือ $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ เป็นแร่ที่ประกอบด้วยแมกนีเซียม (Mg), ซิลิกอน (Si), ออกซิเจน (O) และไฮโดรเจน (H) โครงสร้างโมเลกุลของฟิล์มที่กล่าวมาข้างต้น ส่งผลให้สามารถตรวจจับและอธิบายการสั่นสะเทือนของพันธะในโมเลกุลได้ด้วยเทคนิคสเปกโตรสโคปี (รูปที่ 5 (ก)) จะมียอดพีคการดูดกลืนแสงที่อธิบายถึงการสั่นสะเทือนของพันธะในโมเลกุลที่เกี่ยวข้อง บริเวณที่ใช้อธิบายความเกี่ยวข้องของกลุ่มซิลิกอน (Silicon) และออกซิเจน (Oxygen) ได้แก่ ตำแหน่ง 450 cm^{-1} และ 460 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับ O-Si-O) , 525 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับ Si-O) และ $1,040 \text{ cm}^{-1}$ (เกี่ยวข้องกับ Si-O-Si) นอกจากนี้ยังพบการเชื่อมต่อนระหว่างซิลิกอน (Si) ออกซิเจน (O) และแมกนีเซียม (Mg) ได้แก่ ในบริเวณตำแหน่ง 535 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับ Mg-O) และ 677 cm^{-1} (เกี่ยวข้องกับการสั่น Si-O-Mg) ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองจากงานวิจัยที่ทำการทดลองในย่านอินฟราเรดกลางก่อนหน้า [15-16]

ตารางที่ 1 ตำแหน่งพีคของสเปกตรัมและความสัมพันธ์กับกลุ่มฟังก์ชัน

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

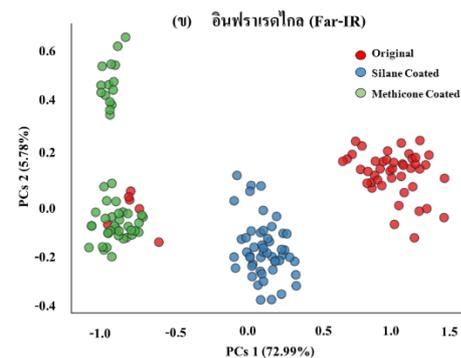
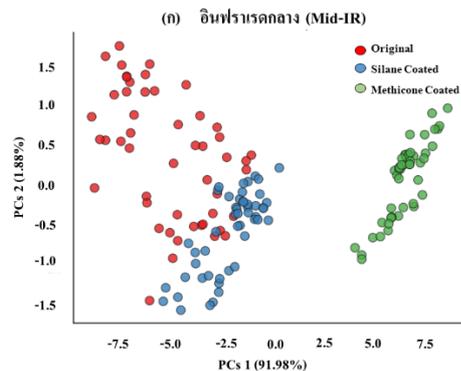
สำหรับสเปกตรัมในย่านอินฟราเรดไกล รูปที่ 5 (ข) ตำแหน่งพีคที่เกิดขึ้นในตำแหน่งที่ต่างกันของสเปกตรัมนั้นสามารถอธิบายการยึดและการสั่นสะเทือนของอะตอมได้ โดยอาศัยการคำนวณทางทฤษฎีด้วยวิธีการ Density Functional Theory (DFT) สเปกตรัมของสารตัวอย่างที่มีส่วนผสมของทัลคัมบริสุทธิ์จะปรากฏพีคดูดกลืนแสงอยู่ที่ประมาณบริเวณพีค 168 cm^{-1} , 177 cm^{-1} และ 260 cm^{-1} ที่แสดงถึงการสั่นสะเทือนของกลุ่มแมกนีเซียม (Mg) และออกไซด์ไฮดรอกไซด์ (OH) [17] ดังแสดงในตารางที่ 1

3.3 ผลการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลคัมโดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis Results)

ตัวอย่างสเปกตรัมจำนวน 150 สเปกตรัมในแต่ละย่านถูกนำมาใช้ในกระบวนการวิเคราะห์ข้อมูลด้วยการวิเคราะห์องค์ประกอบหลัก (Principal Component Analysis; PCA) ซึ่งเป็นเครื่องมือทางสถิติที่ช่วยลดมิติของข้อมูล โดยการหาความสัมพันธ์และจัดกลุ่มข้อมูลเบื้องต้น โดยไม่ต้องใช้ข้อมูลที่ระบุคำตอบ (Label) การวิเคราะห์ PCA และเลือก Principal Components 2 ตัวแปรที่มีความสำคัญมากที่สุด จะช่วยให้เราได้กราฟสองมิติแบบ scatter plot ดังแสดงในรูปที่ 6

รูปที่ 6 (ก) แสดงการวิเคราะห์ข้อมูลในย่านอินฟราเรดกลาง พบว่า Principal Component 1 (PC1) มีความแปรปรวนอธิบายได้สูงถึง 91.98% และ Principal Component 2 (PC2) มีความแปรปรวนอธิบายได้ 1.88% ซึ่งโดยรวมแล้ว ทั้งสองคอมโพเนนต์นี้สามารถอธิบายความแปรปรวนรวมได้ 93.86% ของข้อมูลทั้งหมด ซึ่งหมายความว่า ข้อมูลในย่านนี้มีการกระจายตัวที่สามารถอธิบายได้ดีมากจากเพียงสองคอมโพเนนต์นี้ ในทางตรงกันข้าม (รูปที่ 6 (ข)) แสดงผลการวิเคราะห์ข้อมูลในย่านอินฟราเรดไกล พบว่า Principal Component 1 (PC1) มีความแปรปรวนอธิบายได้ 72.99% และ Principal Component 2 (PC2) มีความแปรปรวนอธิบายได้ 5.78% โดยรวมทั้งสองคอมโพเนนต์นี้สามารถอธิบายความแปรปรวนรวมได้ 78.77% ของข้อมูลทั้งหมด โดยที่ข้อมูลแต่ละจุดในกราฟจะแทนด้วยสเปกตรัม 1 เส้น ซึ่งจากรูปดังกล่าว จะแสดงให้เห็นการจัดกลุ่ม

ของตัวอย่างสเปกตรัมตามประเภทของการเคลือบทัลคัม อย่างไรก็ตาม การทับซ้อนกันของจุดข้อมูลยังคงมีอยู่ ทำให้การแยกประเภทของการเคลือบยังไม่ชัดเจนเพียงพอ จึงได้มีการใช้การวิเคราะห์โดยการเรียนรู้ของเครื่อง เพื่อลดความไม่ชัดเจนนี้



รูปที่ 6 ผลการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลคัมโดยใช้การวิเคราะห์องค์ประกอบหลักในย่านการวัด (ก) อินฟราเรดกลาง (ข) อินฟราเรดไกล

3.4 เปรียบเทียบประสิทธิภาพแบบจำลองโมเดลโดยใช้เทคนิคการเรียนรู้ของเครื่อง (Classification Performance using Machine Learning)

ในการศึกษานี้ ข้อมูลสเปกตรัมทั้งหมด 150 สเปกตรัมในแต่ละย่านที่ผ่านการประมวลผลล่วงหน้าแล้ว ถูกนำมาใช้ในกระบวนการเรียนรู้เพื่อสร้างแบบจำลองสำหรับการจำแนกประเภทการเคลือบของทัลคัม ตารางที่ 2 แสดงผลการประเมินประสิทธิภาพของโมเดลในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล (k-fold = 5) จำนวน 3 โมเดล ได้แก่ 1. Extra Trees Classifier 2. Random Forest Classifier และ 3. Logistic

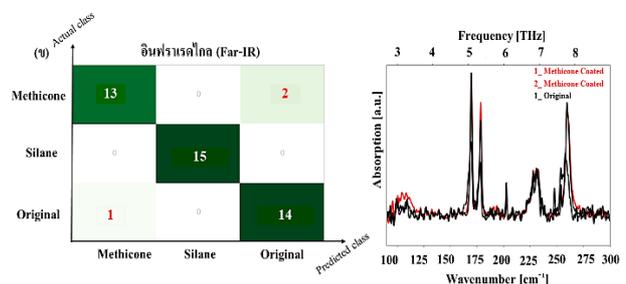
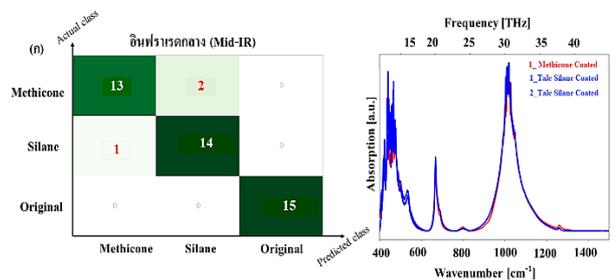
Regression จากการวิเคราะห์ผลลัพธ์ พบว่าโมเดล Extra Trees Classifier ให้ผลลัพธ์ที่ดีที่สุด โดยอ้างอิงจากตัวชี้วัดหลักในการประเมิน ได้แก่ ค่า ACC, ค่า AUC, ค่า Prec. และค่า Recall สำหรับในย่านอินฟราเรดกลางมีค่าอยู่ที่ 97.14, 99.97, 97.50 และ 97.14 ตามลำดับ และในย่านอินฟราเรดไกลมีค่าอยู่ที่ 97.14, 98.81, 97.50 และ 97.14 ตามลำดับ ผลลัพธ์ที่ได้แสดงให้เห็นว่าโมเดล Extra Trees Classifier เป็นโมเดลที่มีประสิทธิภาพสูงในการจำแนกประเภทการเคลือบของฟิล์มในทั้งสองย่านของสเปกตรัมอินฟราเรด โดยสามารถให้ค่าความถูกต้องและความแม่นยำที่สูงกว่าโมเดลอื่น ๆ ที่นำมาเปรียบเทียบ

ตารางที่ 2 การประเมินโมเดลประสิทธิภาพของโมเดลในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล (k-fold = 5)

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

นอกจากนี้ ในงานวิจัยนี้ได้รายงานผลการจำแนกประเภทการเคลือบในรูปแบบของ Confusion Matrix เพื่อประเมินความถูกต้องของโมเดลที่ใช้ในการจำแนกประเภทการเคลือบของฟิล์มในทั้งสองย่านจากข้อมูลสเปกตรัมชุดทดสอบจำนวน 45 สเปกตรัม ร่วมกับโมเดลการจำแนก Extra Trees Classifier

พบว่า ในรูปที่ 7 แสดงถึงข้อบกพร่องบางประการ พบว่า จากลักษณะและการซ้อนทับกันของสเปกตรัมที่วัดได้มีความใกล้เคียงกันอย่างมาก ส่งผลให้ในย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล มีการจำแนกประเภทการเคลือบผิดพลาดย่านละ 3 โดยในย่านอินฟราเรดกลาง โมเดลมีการจำแนกประเภทผิดพลาด โดยจำแนกการเคลือบ Methicone เป็น Silane จำนวน 2 สเปกตรัม และการเคลือบ Silane เป็น Methicone อีก 1 สเปกตรัม แสดงในรูปที่ 7(ก) ส่วนทางด้านของอินฟราเรดไกล โมเดลมีการจำแนกประเภทผิดพลาด โดยจำแนกการเคลือบ Methicone เป็น Original จำนวน 2 สเปกตรัม และ Original เป็น Methicone อีก 1 สเปกตรัม ในการวิเคราะห์เหตุผลที่โมเดลทำนายผิดพลาดใน 3 สเปกตรัม ที่เคลือบ Silane เป็น Methicone นั้น เราได้แสดง 3 สเปกตรัม ของ Silane ที่ทำนายผิดและเปรียบเทียบกับสเปกตรัมของ Methicone พบว่าลักษณะของสเปกตรัมที่เคลือบ Silane และ Methicone มีความใกล้เคียงกันอย่างมากในช่วงเลขคลื่นที่สำคัญ โดยเฉพาะช่วงที่มีการซ้อนทับกันของพีคทำให้โมเดลเกิดความสับสนในการจำแนกประเภท



รูปที่ 7 ผลการจำแนกประเภทการเคลือบของฟิล์มผ่านการสร้าง confusion matrix โดยใช้โมเดล Extra Trees Classifier ในย่านการวัด (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล

3.5 การนำไปใช้ประโยชน์กับผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นต่างๆ

จากผลการทดลองในหัวข้อ 3.4 เห็นได้ชัดว่า โมเดลการจำแนกประเภทที่สร้างขึ้นโดยใช้ Extra Trees Classifier ในทั้งสองย่านให้ความแม่นยำในการทำนายสูงกว่า 95% ในชุดข้อมูลที่ไม่เคยเห็นมาก่อน ในการทดลองนี้จะเป็นการนำโมเดล Extra Trees Classifier ที่ได้รับการฝึกฝนแล้ว ไปประยุกต์ใช้ในการตรวจจับทัลคัมในผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นทั่วไป ที่หาซื้อได้ตามห้างสรรพสินค้าชั้นนำและผ่านการเคลือบด้วยสารเคลือบที่แตกต่างกัน การนำโมเดลที่ได้รับการฝึกฝนแล้วไปใช้งานจริงยังเป็นการประหยัดทรัพยากรและเวลาในการพัฒนา ทำให้ผู้ผลิตสามารถมั่นใจได้ในคุณภาพและความปลอดภัยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นจากโมเดลที่สร้างขึ้นโดยใช้การตรวจจับทัลคัมด้วยเทคนิคดังกล่าว เพิ่มความมั่นใจให้กับผู้บริโภคในเรื่องคุณภาพและความปลอดภัยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่น

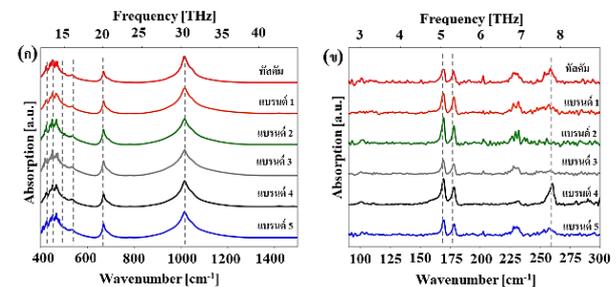
3.5.1 ผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก

รูปที่ 8 แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก โดยมีทั้งสูตรที่มีส่วนผสมของทัลคัม (จำนวน 5 แบรินต์) และสูตรปราศจากทัลคัม (จำนวน 4 แบรินต์) ผลการวิเคราะห์พบว่า สเปกตรัมที่วัดได้ทั้งในย่านอินฟราเรดกลาง (รูปที่ 8 (ก)) และย่านอินฟราเรดไกล (รูปที่ 8 (ข)) จะมีพีคการดูดกลืนที่ตรงกับสเปกตรัมของทัลคัม ซึ่งสามารถสังเกตได้อย่างชัดเจนในกราฟ ทำให้สามารถแยกแยะได้ว่าผลิตภัณฑ์เหล่านี้มีการใช้ทัลคัมเป็นส่วนประกอบหลัก

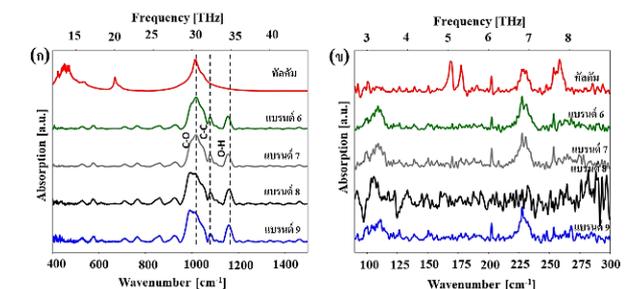
รูปที่ 9 (ก) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่ปราศจากทัลคัม (แบรินต์ 6-9) ในย่านอินฟราเรดกลาง โดยยอดพีคการดูดกลืนที่แตกต่างจากทัลคัมบริสุทธิ์สามารถสังเกตด้วยตาเปล่าได้ชัดเจน อย่างไรก็ตาม ในรูปดังกล่าวสามารถสังเกตพีคการดูดกลืนในช่วงบริเวณ 900-1,200 cm^{-1}

โดยพีคที่เกิดขึ้นในตำแหน่งเลขคลื่นประมาณ 1,040, 1,070 และ 1,150 cm^{-1} ซึ่งไม่ตรงกับพีคที่เกิดขึ้นในสเปกตรัมของทัลคัมบริสุทธิ์ ซึ่งผู้วิจัยสันนิษฐานว่า อาจเกิดจากแป้งฝุ่นเหล่านี้ถูกผลิตมาจากแป้งที่มาจากพืช ซึ่งมีองค์ประกอบหลักเป็นคาร์โบไฮเดรตที่เป็นลักษณะเฉพาะของแป้งที่มาจากพืช [18] แม้ในบริเวณ 1,040 cm^{-1} พีคที่เกิดขึ้นจะทับซ้อนกับพีคที่เกิดจากทัลคัมบริสุทธิ์ แต่ก็ไม่ได้มีความเกี่ยวข้องกับการมีอยู่

ของทัลคัม รูปที่ 9 (ข) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่ปราศจากทัลคัม (แบรินต์ 6-9) ในย่านอินฟราเรดไกล โดยสเปกตรัมไม่แสดงยอดพีคการดูดกลืนในบริเวณเดียวกับทัลคัมบริสุทธิ์ พีคที่โดดเด่น ได้แก่ ในบริเวณ 168 cm^{-1} และ 177 cm^{-1} ไม่แสดงพีคการดูดกลืนที่ตรงกับเลขคลื่นเฉพาะของทัลคัมในช่วงนี้ ทำให้สามารถแยกแยะระหว่างแป้งฝุ่นที่มีทัลคัมและแป้งฝุ่นที่ปราศจากทัลคัมได้อย่างมีประสิทธิภาพ



รูปที่ 8 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก สูตรปราศจากทัลคัมในย่านการวัด (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล



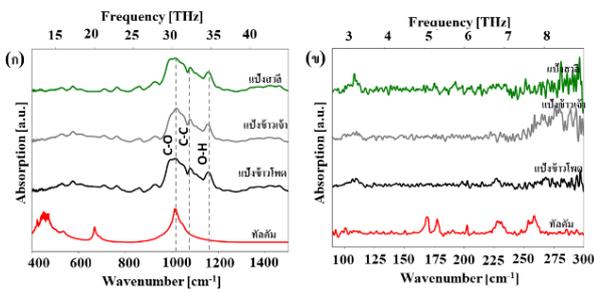
รูปที่ 9 สเปกตรัมการดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็ก สูตรปราศจากทัลคัมในย่าน (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล

3.5.2 ผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค

รูปที่ 10 (ก) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภค 3 ชนิดที่มีการใช้อย่างแพร่หลายมากที่สุด ได้แก่ แป้งสาลี, แป้งข้าวเจ้า, และแป้งข้าวโพด [19-20] จากรูปพบว่า ในย่านอินฟราเรดกลางจะพบการดูดกลืนในช่วงบริเวณ 900 ถึง 1,200 cm^{-1} ซึ่งอาจเกิดจากแป้งจากพืชที่มีส่วนประกอบหลักเป็น อะไมโลส (Amylose) และ อะไมโลเพคติน

(Amylopectin) ซึ่งทั้งสองเป็นโพลีแซ็กคาไรด์ (Polysaccharide) ที่ประกอบด้วยหน่วยย่อยของกลูโคส (C₆H₁₀O₅) ซึ่งเป็นเรื่องปกติสำหรับแป้งที่มาจากพืชที่มีการสั่นสะเทือนแบบโค้งงอของกลุ่มคาร์บอน-ออกซิเจน (Carbon-Oxygen; C-O), คาร์บอน-คาร์บอน (Carbon-Carbon; C-C) และ ออกซิเจน-ไฮโดรเจน (Oxygen-Hydrogen; OH) ของคาร์โบไฮเดรตในบริเวณอะโนเมอร์ในตำแหน่งเลขคลื่นประมาณ 1,040 cm⁻¹, 1,070 cm⁻¹ และ 1,150 cm⁻¹ ตามลำดับ [18] ไม่ใช้การมีอยู่ของทาลค์แต่สเปกตรัมเหล่านี้เป็นลักษณะเฉพาะของส่วนประกอบทางเคมีในแป้งที่มาจากพืชเท่านั้น

รูปที่ 10 (ข) แสดงสเปกตรัมการดูดกลืนของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นแบ่งฝุ่นสำหรับบริโภคในย่านอินฟราเรดไกล โดยสเปกตรัมไม่แสดงยอดพีกการดูดกลืนในบริเวณเดียวกับทาลค์บริสุทธิ์ (บริเวณ 168 cm⁻¹ และ 177 cm⁻¹) ซึ่งเป็นพื้นที่ที่ทาลค์มีการดูดกลืนของแสง อย่างไรก็ตาม สเปกตรัมในบริเวณอื่นๆ ยังแสดงความแตกต่างระหว่างผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีทาลค์และไม่มีทาลค์

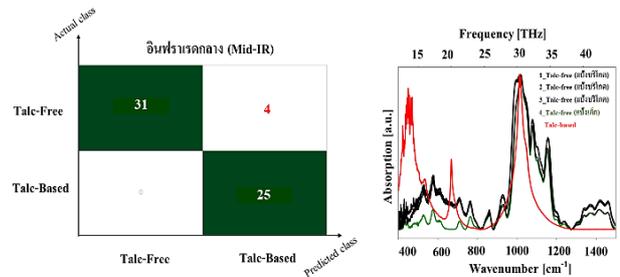


รูปที่ 10 สเปกตรัมดูดกลืนแสงเฉลี่ยของผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับบริโภคในย่านการวัด (ก) อินฟราเรดกลาง และ (ข) อินฟราเรดไกล

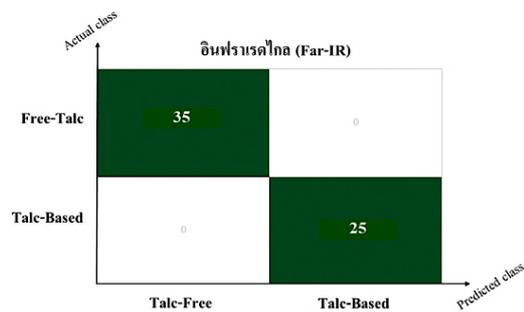
3.6 การประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลอง Extra Trees Classifier เพื่อการจำแนกผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีทาลค์และไม่มีทาลค์

ในการประเมินประสิทธิภาพของแบบจำลอง Extra Trees Classifier สำหรับการจำแนกระหว่างผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีทาลค์และไม่มีทาลค์ เราใช้ตัวอย่างสเปกตรัมทั้งหมด 60 สเปกตรัม (มีทาลค์ 25 สเปกตรัมและไม่มีทาลค์ 35 สเปกตรัม) ที่ได้มาจากผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นสำหรับเด็กและสำหรับบริโภคมาเป็นข้อมูลชุด

ทดสอบ โดยตัวอย่างแบ่งออกเป็นดังนี้ 1. ผลิตภัณฑ์แป้งเด็ก 45 สเปกตรัม (สูตรทาลค์ 25 สเปกตรัมและปราศจากทาลค์ 20 สเปกตรัม) และ 2. ผลิตภัณฑ์แป้งบริโภคที่ปราศจากทาลค์ 15 สเปกตรัม



รูปที่ 11 ผลการจำแนกการมีอยู่ของทาลค์ในแป้งสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภคผ่านการสร้าง confusion matrix โดยใช้โมเดล Extra Trees Classifier ในย่านการวัดอินฟราเรดกลาง



รูปที่ 12 ผลการจำแนกการมีอยู่ของทาลค์ในแป้งสำหรับเด็กและแป้งสำหรับบริโภคผ่านการสร้าง confusion matrix โดยใช้โมเดล Extra Trees Classifier ในย่านการวัดอินฟราเรดไกล

ผลการวิเคราะห์พบว่า ในย่านอินฟราเรดกลางนี้มีข้อบกพร่องในการจำแนก เนื่องจากมีการทำนายแป้งสำหรับบริโภคที่ไม่มีทาลค์ว่ามีทาลค์จำนวน 4 สเปกตรัม (แป้งฝุ่นเด็ก 1 สเปกตรัมและแป้งฝุ่นสำหรับบริโภค 3 สเปกตรัม) ส่งผลให้ความแม่นยำลดลงอยู่ที่ 93.33% ดังแสดงในรูปที่ 11 ในทางตรงกันข้าม ทางด้านอินฟราเรดไกล โมเดลมีความสามารถในการแยกแยะผลิตภัณฑ์แป้งฝุ่นที่มีทาลค์และไม่มีทาลค์อย่างมีประสิทธิภาพ โดยสามารถจำแนกได้อย่างแม่นยำถึง 100% ดังแสดงในรูปที่ 12 เนื่องจากพิกการดูดกลืนในย่านนี้มีความชัดเจน

และพิกที่เกิเกิดขึ้นนั้นไม่ซับซ้อน ส่งผลให้การแยกแยะเป็นไปได้อย่าง ผลลัพธ์เหล่านี้ แสดงให้เห็นว่าแบบจำลอง Extra Trees Classifier ที่ได้สร้างขึ้นนี้มีประสิทธิภาพสูงในการจำแนก ผลិតภัณฑ์แบ่งผู้่นสำหรับเด็กและแบ่งสำหรับผู้บริโภคที่มีทัลคัม และไม่มีทัลคัมในทั้งสองย่านการวัด ความสามารถในการ ตรวจจับพิศการตูดกลืนที่เฉพาะเจาะจงของทัลคัมในสเปกตรัม ของผลิตภัณฑ์ ซึ่ให้เห็นว่าโมเดลสามารถแยกแยะทัลคัมได้แม้มี ส่วนผสมอื่นๆ ที่ซับซ้อนในผลิตภัณฑ์

4. สรุปผลและอภิปรายผล

การศึกษาในครั้งนี้นำเสนอวิธีการตรวจจับการมีอยู่และจำแนก ประเภทการเคลือบของทัลคัมโดยใช้การตรวจวัดเชิงแสงแบบไม่ ทำลาย ด้วยเทคนิคสเปกโทรสโกปี ผลการศึกษาพบว่าการใช้ เทคนิคดังกล่าวในทั้งย่านอินฟราเรดกลางและอินฟราเรดไกล ร่วมกับการประมวลผลสัญญาณเบื้องต้นและวิเคราะห์ผลด้วยการ เรียนรู้ของเครื่อง สามารถทำให้เกิดการตรวจจับและการจำแนก ประเภทการเคลือบของทัลคัมได้อย่างมีประสิทธิภาพ มีความ รวดเร็วและแม่นยำ โดยไม่ทำลายตัวอย่าง และลดการใช้บุคลากร ในการวิเคราะห์ลงได้ เทคนิคนี้ช่วยให้ผู้ผลิตสามารถ ตรวจจับทัลคัมในผลิตภัณฑ์ต่าง ๆ ได้อย่างแม่นยำแม้ว่าจะมี ส่วนผสมอื่น ๆ ที่ซับซ้อนอยู่ด้วย ทำให้สามารถตรวจสอบคุณภาพ และความปลอดภัยของผลิตภัณฑ์แบ่งผู้่นได้ ลดความเสี่ยงในการ จำหน่ายผลิตภัณฑ์ที่มีคุณภาพต่ำ และเพิ่มความมั่นใจให้กับ ผู้บริโภคในเรื่องความปลอดภัยและคุณภาพของผลิตภัณฑ์แบ่งผู้่น

5. ข้อเสนอแนะ

สามารถพัฒนาและทดสอบโมเดลการเรียนรู้แบบกึ่งมีผู้ควบคุม (Semi-Supervised Learning) ที่รวมข้อมูลที่มีการระบุเฉลย (Label) บางส่วนเข้ากับข้อมูลที่ไม่มีการระบุเฉลยได้ การ ประยุกต์ใช้เทคนิคการเรียนรู้ของเครื่องแบบนี้สามารถเพิ่มความ ยืดหยุ่นและความแม่นยำในการตรวจจับ รวมถึงการเก็บตัวอย่าง เพิ่มเติมและการพัฒนาฐานข้อมูลที่ครอบคลุมจะช่วยปรับปรุง ประสิทธิภาพของโมเดลให้ดียิ่งขึ้น อีกทั้งยังสามารถลดต้นทุนใน การระบุเฉลยข้อมูล และเพิ่มความน่าเชื่อถือในการวิเคราะห์และ ตรวจสอบผลิตภัณฑ์ในอุตสาหกรรมต่างๆ โดยที่ผลลัพธ์ที่ได้จาก

การวิจัยครั้งนี้จะเป็นพื้นฐานสำคัญในการพัฒนาเครื่องมือและ เทคโนโลยีสำหรับการควบคุมคุณภาพผลิตภัณฑ์ที่มีส่วนผสม ของทัลคัมในอนาคต

6. กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัยนี้ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจากภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า คณะวิศวกรรมศาสตร์และเทคโนโลยีอุตสาหกรรม มหาวิทยาลัย ศิลปากร และขอบคุณทีมวิจัยเทคโนโลยีเทระเฮิร์ตซ์ ศูนย์ เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และคอมพิวเตอร์แห่งชาติ (เนคเทค- สวทช.) ที่กรุณาช่วยสนับสนุนอุปกรณ์ในงานวิจัย

7. เอกสารอ้างอิง

- [1] K. Al Awam, S. Johnson, A. Alonazi, A. Aleeh, A. Aldhamen, A. Alhaddad, S. Alnouf, F. Almutairi, R. Zila, R. Algoud, D. Alghurab, M. A. AlSayegh, and B. Alnakli, "The effect of cosmetic talc powder on health," *Indian Journal of Respiratory Care*, Vol. 8, pp. 18–21, 2019. doi: 10.4103/ijrc.ijrc_24_18.
- [2] D. W. Cramer, W. R. Welch, R. E. Scully, and C. Wojciechowski, "Ovarian cancer and talc. A case-control study," *Cancer*, Vol. 50, 1982. doi: 10.1002/1097-0142(19820715)50:2<372::AID-CNCR2820500235>3.0.CO;2-S.
- [3] D. W. Cramer, A. F. Vitonis, K. L. Terry, W. R. Welch, and L. J. Titus, "The association between talc use and ovarian cancer," *Epidemiology (Cambridge, Mass.)*, Vol. 27, pp. 334–346, 2016. doi:10.1097/EDE.0000000000000434.
- [4] R. Penninkilampi and G. D. Eslick, "Perineal talc use and ovarian cancer: A systematic review and meta-analysis," *Epidemiology*, Vol. 29, pp. 41–49, 2018. doi:10.1097/EDE.0000000000000745.

- [5] Kobo Products Inc. (June 2015). *Kobo surface treated pigments and powders*. [Online]. Available: <https://www.koboproductsinc.com/Downloads/Kobo-Surface-Treated-Pigments-and-Powders-Combined-June2015.pdf>
- [6] L. C. Becker, W. Bergfeld, D. Belsito, R. A. Hill, C. Klaassen, D. C. Liebler, J. G. Marks, R. C. Shank, T. J. Slaga, P. W. Snyder, and F. A. Andersen, "Safety assessment of Dimethicone crosspolymers as used in cosmetics," *Int. J. Toxicol.*, Vol. 33, pp. 115S–65S, 2014. doi: 10.1177/1091581814524963.
- [7] Sokan-Adeaga, A.A., Sokan-Adeaga, M.A., Sokan-Adeaga, E.D., Oparaji, A.N., Edris, H., Tella, E.O., Balogun, F.A., Aledoh, M., and Amubieya, O.E., "Environmental toxicants and health adversities: A review on interventions of phytochemicals," *Journal of Public Health Research*, Vol. 12, 2023.
- [8] Stoiber, T., Fitzgerald, S.M., and Leiba, N.S., "Asbestos Contamination in Talc-Based Cosmetics: An Invisible Cancer Risk," *Environmental Health Insights*, Vol. 14, 2020. doi: 10.1177/1178630220976558.
- [9] Sanchez, M.S., McGrath-Koerner, M., and McNamee, B.D., "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*, 114791, 2022. doi: 10.1016/j.envres.2022.114791.
- [10] Jamali, S., Shaikh, N.M., Khoso, M.A., Jamil, Y., Bhutto, W.A., Soomro, A.M., and Mari, R.H., "Elemental analysis of talcum powder using spectroscopic techniques," *Optik*, 169246, 2022. doi: 10.1016/j.ijleo.2022.169246.
- [11] Bhatt, C.R., Sanghapi, H.K., Yueh, F.Y., and Singh, J.P., "LIBS application to powder samples," in *Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (Second Edition)*, edited by J.P. Singh and S.N. Thakur, Elsevier, 2020, pp. 247-262. ISBN 9780128188293. doi: 10.1016/B978-0-12-818829-3.00010-1.
- [12] Liu, Y., Sun, L., Ran, Z., Pan, X., Zhou, S., and Liu, S., "Prediction of Talc Content in Wheat Flour Based on a Near-Infrared Spectroscopy Technique," *Journal of Food Protection*, pp. 1655-1662, 2019. doi: 10.4315/0362-028x.jfp-18-582.
- [13] Fadlelmoula, A., Pinho, D., Carvalho, V., Catarino, S.O., and Minas, G.M., "Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy to Analyse Human Blood over the Last 20 Years: A Review towards Lab-on-a-Chip Devices," *Micromachines*, Vol. 13, 2022. doi: 10.3390/mi13020187.
- [14] Liu, H., Xiong, W., Mottaleb, K.A., Krupnik, T.J., Burgueño, J.A., Pequeno, D.N., and Wu, W., "Contrasting contributions of five factors to wheat yield growth in China by process-based and statistical models," *European Journal of Agronomy*, Vol. 130, 2021, 126370. doi: 10.1016/j.eja.2021.126370.
- [15] Gwartz, J.A., and Garcia-Casal, M.N., "Processing maize flour and corn meal food products," *Annals of the New York Academy of Sciences*, Vol. 1312, No. 1, pp. 66-75, April 2014. doi: 10.1111/nyas.12299.
- [16] Ossman, M., Mansour, M.S., Fattah, M.A., Taha, N.A., and Kiros, Y., "Peanut shells and talc powder for removal of hexavalent chromium from aqueous solutions," *Bulgarian Chemical Communications*, Vol. 46, pp. 629-639, 2014.

- [17] Li, X., Zhang, Y., and He, Y., "Rapid detection of talcum powder in tea using FT-IR spectroscopy coupled with chemometrics," *Scientific Reports*, Vol. 6, 2016. doi: 10.1038/srep30313.
- [18] Caballero-Agosto, E.R., Sierra-Vega, N.O., Rolon-Ocasio, Y., Hernández-Rivera, S.P., Infante-Degró, R.A., Fontalvo-Gomez, M., Pacheco-Londoño, L.C., and Infante-Castillo, R., "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*, 2023. doi: 10.1016/j.focha.2023.100582.
- [19] Martin, F., Micoud, P., Delmotte, L., Marichal, C., Dred, R.L., Parseval, P., Mari, A., Fortune, J.P., Salvi, S., Béziat, D., Grauby, O., and Ferret, J., "The structural formula of talc from the Trimouns Deposit, Pyrenees, France," *Canadian Mineralogist*, Vol. 37, pp. 997-1006, 1999.
- [20] Larentzos, J.P., Greathouse, J.A., and Cygan, R.T., "An ab Initio and Classical Molecular Dynamics Investigation of the Structural and Vibrational Properties of Talc and Pyrophyllite," *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 111, pp. 12752-12759, 2007. doi: 10.1021/jp072959f.