ระบบผู้เชี่ยวชาญอัตโนมัติสำหรับการวิเคราะห์นิ่วในทางเดินปัสสาวะจากอินฟราเรดสเปกโทรแกรม

Automated Expert System for Urolithiasis Classification from Infrared Spectrogram

เจียระไน พลนุ้ย

Jiaranai Ponnui

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญา
วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้า
มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Engineering in Electrical Engineering
Prince of Songkla University
2557

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

ระบบผู้เชี่ยวชาญอัตโนมัติสำหรับการวิเคราะห์นิ่วในทางเดินปัสสาวะจากอินฟราเรดสเปกโทรแกรม

Automated Expert System for Urolithiasis Classification from Infrared Spectrogram

เจียระไน พลนุ้ย

Jiaranai Ponnui

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญา
วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมไฟฟ้า
มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Engineering in Electrical Engineering
Prince of Songkla University
2557

ลิขสิทธิ์ของมหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์

ชื่อวิทยานิพนธ์ ระบบผู้เชี่ยวชาญอัตโนมัติสำหรับการวิเคราะห์นิ่วในทางเดินปัสสาวะจากอินฟราเรดสเปกโทรแกรม

ผู้เขียน นางสาวเจียระไน พลนุ้ย

สาขาวิชา วิศวกรรมไฟฟ้า

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

…….

(รองศาสตราจารย์ บุญเจริญ วงศ์กิตติศึกษา**)**

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

…….

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ สาวิตร์ ตัณฑนุช)

คณะกรรมการสอบ

…….ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.พรชัย พฤกษ์ภัทรานนต์)

……...กรรมการ

(รองศาสตราจารย์ บุญเจริญ วงศ์กิตติศึกษา)

……...กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ สาวิตร์ ตัณฑนุช)

……...กรรมการ

(ดร.อจลวิชญ์ ฉันทวีโรจน์)

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์ อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษา ตามหลักสูตรปริญญา วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต สาขาวิชา วิศวกรรมไฟฟ้า

……

(รองศาสตราจารย์ ดร.ธีระพล ศรีชนะ)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

ขอรับรองว่า ผลงานวิจัยนี้เป็นผลมาจากการศึกษาวิจัยของนักศึกษาเอง และขอขอบคุณผู้ที่มีส่วนเกี่ยวข้องทุกท่านไว้ ณ ที่นี้

ลงชื่อ…….
(รองศาสตราจารย์ บุญเจริญ วงศ์กิตติศึกษา)
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์

ลงชื่อ…….
(นางสาวเจียระไน พลนุ้ย)
นักศึกษา

ข้าพเจ้าขอรับรองว่า ผลงานวิจัยนี้ไม่เคยเป็นส่วนหนึ่งในการอนุมัติปริญญาในระดับใดมาก่อน และไม่ได้ถูกใช้ในการยื่นขออนุมัติปริญญาในขณะนี้

ลงชื่อ…….
(นางสาวเจียระไน พลนุ้ย)
นักศึกษา

ชื่อวิทยานิพนธ์ ระบบผู้เชี่ยวชาญอัตโนมัติสำหรับการวิเคราะห์นิ่วในทางเดินปัสสาวะจากอินฟราเรดสเปกโทรแกรม

ผู้เขียน นางสาวเจียระไน พลนุ้ย

สาขาวิชา วิศวกรรมไฟฟ้า

ปีการศึกษา 2556

บทคัดย่อ

โรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะเป็นกลุ่มโรคที่พบได้มากในปัจจุบัน สาเหตุ มาจากค่านิยมในการบริโภคอาหาร และการสะสมของเสียภายในร่างกาย เป้าหมายหลักในการรักษานิ่วประกอบด้วย 2 ส่วนคือการกำจัดนิ่วออกและการป้องกันการกลับมาเป็นซ้ำ ซึ่งมีโอกาสกลับมาเป็นซ้ำสูงถึงร้อยละ 39 การทราบองค์ประกอบของนิ่วจะช่วย ป้องกันปัญหานี้ได้ วิธีอินฟราเรดสเปกโทร สโกปีเป็นวิธีที่เหมาะสมที่สุดในการวิเคราะห์นิ่ว ลักษณะสเปกตรัมจะแตกต่างกันออกไปตามองค์ประกอบทางเคมีของแต่ละชนิด การแปลผลแบ่งออกเป็น 2 ส่วนคือการแปลผลเชิงคุณภาพซึ่งเป็นการใช้ตำแหน่งพีคในการจำแนกชนิดของนิ่ว และการแปลผลเชิงปริมาณในกรณีนิ่วชนิดผสม เพื่อบอกปริมาณของนิ่วแต่ละชนิดองค์ประกอบ

วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือการจำแนกชนิดของนิ่วในทางเดินปัสสาวะ และบอกปริมาณในกรณีนิ่วชนิดผสม ปัญหาเบื้องต้นที่พบได้จากการแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้นคือ ความแปรปรวนของเส้นแนวโน้ม ดังนั้นจึงเลือก การทำอนุพันธ์อันดับ หนึ่งและอันดับสองซึ่งมีประสิทธิภาพเป็นอย่างมาก มาใช้ในการกำจัดเส้นแนวโน้ม แต่ผลที่ตามมาคือ ปรากฏสัญญาณรบกวน ปะปนอยู่บนสเปกตรัม ดังนั้นจึงมีการกำจัดสัญญาณรบกวนโดยใช้ ตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์เปรียบเทียบกับวิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียดเพื่อหาวิธีการที่ดีที่สุดในการกำจัดสัญญาณรบกวน โดยประเมินผลจากค่า SNR ปรากฏว่า ตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ พหุนามอันดับสองขนาดหน้าต่างพิจารณาเท่ากับ 5 มีผลการวัดค่า SNR ดีที่สุดเท่ากับ 64.04 ในขณะที่วิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียด นั้นให้ผลการวัดค่า SNR ที่ดีที่สุดเท่ากับ 48.05 เมื่อใช้เวฟเล็ต db08(L2) เมื่อเปรียบเทียบผลการระบุตำแหน่งพีคจากทั้งสองวิธีดังกล่าวกับการระบุตำแหน่งพีคจากอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้น พบว่าผลการระบุตำแหน่งพีคจากสเปกตรัมตั้งต้นนั้นมีเปอร์เซ็นต์ความถูกต้องมากกว่าผลจากการทำอนุพันธ์อันดับสองในกรณีของนิ่วชนิดเดี่ยว ส่วนกรณีนิ่วชนิดผสมนั้นพบว่าอนุพันธ์อันดับสองสามารถระบุตำแหน่งพีคสำคัญของนิ่วองค์ประกอบได้มากกว่าเนื่องจากสามารถจำแนกพีคที่มีการซ้อนทับกันได้

ในส่วนของการแปลผลเชิงปริมาณของนิ่วชนิดผสม โดยวิธี zero-crossing first-derivative และการวัดค่าความเข้มข้น จากตำแหน่งความถี่ 1324 cm^{-1} ซึ่งเป็นพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต จากวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกลย์ และวิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียด เมื่อนำมาประเมิ นผลค่าความผิดพลาดเบี่ยงเบนมาตรฐาน (SEP) พบว่ามีค่า 0.0129 และ 0.0127 ตามลำดับ แต่พบว่าค่าความเข้มข้นที่ได้จากตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตที่ได้จากการทำอนุพันธ์อันดับสอง ซึ่งเป็นผลจากการทดลองมีค่าสอดคล้องกับ ค่าความเข้มข้นที่ได้จากเส้นโค้งอ้างอิงมากกว่า

คำสำคัญ นิ่วในทางเดินปัสสาวะ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์ วิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียด

Thesis Title	Automated Expert System for Urolithiasis Classification from Infrared Spectrogram
Author	Miss Jiaranai Ponnui
Major Program	Electrical Engineering
Academic Year	2013

ABSTRACT

Urolithiasis is frequently found in nowadays because of consumer behavior and accumulation of waste products in the body. Goals are removing and preventing a recurrence of urinary stone, which has a chance to recurrent high 39 percent after surgery. The knowledge of the chemical composition is important to prevent recurrence of stones. Infrared spectroscopy is suitable method for analysis urinary stone composition. Each spectrum is depended on chemical formula. The interpretation of infrared spectra separate in 2 types; qualitative analysis and quantitative analysis.

The purpose of this research is classification of Urolithiasis from infrared spectroscopy and measuring quantitative in case of mixed stone. The first problem of interpreting is baseline offset from zero because of scattering of light. The 1^{st} and 2^{nd} derivative are high performance to eliminate baseline slope but it affected by noise. Savitzky-Golay filter (2 polynomial, 5 side points) are compared with multiresolution analysis method (db08(L2) for noise removal. Savitzky-Golay filter is better than multiresolution analysis method because Savitzky-Golay filter has SNR value = 64.04, on the others hand multiresolution analysis method has SNR value only 48.05. However, the qualitative analysis results from original spectrum are better than 2 methods in case of pure stone. For mixed stone, the results from second derivative can identify peaks more than original spectrum because the second derivative has performance for distinguish the overlapped peaks.

In case of quantitative analysis with COM-COD mixed stone, the analysis employ zero-crossing first-derivative and calculation intensity value at 1324 cm^{-1} which is COD's peak. The results of Savitzky-Golay filter has SEP value = 0.0129 and the results of multiresolution analysis method has SEP value = 0.0127, respectively.

Keyword: Urolithiasis, Infrared spectroscopy, Savitzky-Golay filter, Multiresolution analysis method

สารบัญ

	หน้า
สารบัญ	(10)
รายการตาราง	(14)
รายการภาพประกอบ	(15)
สัญลักษณ์คำย่อและตัวย่อ	(20)
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ความสำคัญและที่มาของงานวิจัย	1
1.2 การทบทวนวรรณกรรม	4
1.2.1 การประมวลผลสัญญาณขั้นต้น (preprocessing methods)	4
1.2.2 การดึงคุณลักษณะสำคัญของสัญญาณ (feature extraction)	6
1.3 วัตถุประสงค์	7
1.4 ขอบเขตงานวิจัย	7
1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	7
1.6 วิธีดำเนินการวิจัย	7
บทที่ 2 ทฤษฎีและหลักการ	9
2.1 นิ่วในทางเดินปัสสาวะ (urinary tract stones)	9
2.2 เทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบของนิ่วในปัจจุบัน	11
2.3 ขั้นตอนการวิเคราะห์นิ่วโดยวิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี	11
2.4 อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (infrared spectroscopy)	12
2.4.1 แสงอินฟราเรด (infrared radiation)	12
2.4.2 ประเภทของการสั่น	15
2.4.3 อินฟราเรดสเปกตรัม (IR spectrum)	16
2.4.4 ตำแหน่งของแถบดูดกลืน	18
2.5 การแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัม	19
2.5.1 ระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัม(spectrum manipulation)	19

สารบัญ(ต่อ)

	หน้า
2.5.1.1 การปรับเส้นพื้นฐาน (baseline correction)	19
2.5.1.2 การปรับเส้นเรียบ (smoothing)	21
2.5.1.3 อนุพันธ์สเปกตรัม (spectral derivatives)	22
2.5.1.4 การปรับขนาดสัญญาณบรรทัดฐาน (Normalization)	22
2.5.2 เทคนิคที่ใช้ในการแปลผล	23
2.5.2.1 การแปลงเวฟเล็ต (wavelet transform)	23
2.5.2.2 วิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด	24
2.5.2.3 ตัวกรองของซาวิสกี้-โกเลย์ (Savitzky-Golay filter)	24
2.5.2.4 การหาอนุพันธ์ (derivative)	27
2.5.3 การแปลผลเชิงคุณภาพ	28
2.5.3.1 นิ่วที่มีแคลเซียมเป็นองค์ประกอบหลัก (Calcium stone)	28
2.5.3.2 นิ่วแมกนีเซียม แอมโมเนียมฟอสเฟต (Magnesium Ammonium Phosphate stone) หรือนิ่วสตรูไวต์ (Struvite)	33
2.5.3.3 นิ่วยูริก (Uric acid stone)	34
2.5.3.4 นิ่วซิสทีน (Cystine)	35
2.5.5.5 นิ่วแซนทีน (Xanthine)	36
2.5.4 การแปลผลเชิงปริมาณ	37
2.5.5 ตัวชี้วัดประสิทธิภาพ (performance indicator)	38
2.5.5.1 Signal-to-Noise Ratio (SNR)	38
2.5.5.2 Standard Error of Performance (SEP)	39
บทที่ 3 การทดลอง	40
3.1 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วในทางเดินปัสสาวะที่นำมาทดลอง	40
3.1.1 สมมุติฐาน	40
3.1.2 ตัวอย่างของนิ่วที่ใช้ในการทดลอง	41
3.2 ระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัม	42
3.3 ขั้นตอนการทดลอง	43

สารบัญ(ต่อ)

	หน้า
3.4 เครื่องมือและการกำหนดค่าพารามิเตอร์ของเครื่องมือที่ใช้ในโปรแกรม LabVIEW	44
3.5 แผนภูมิแสดงขั้นตอนการทดลอง	45
บทที่ 4 ผลการทดลอง	46
4.1 ขั้นตอนประมวลผลสัญญาณขั้นต้น	46
4.1.1 การปรับขนาดสัญญาณบรรทัดฐาน (normalization)	46
4.1.2 ขั้นตอนการกำจัดเส้นแนวโน้มพื้นฐาน (baseline correction)	47
4.1.3 การปรับเส้นเรียบสเปกตรัม (spectral smoothing)	48
4.1.3.1 ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้น	49
4.1.3.2 ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์	49
4.1.3.3 ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด	52
4.2 การแปลผลเชิงคุณภาพ (Qualitative analysis)	55
4.2.1 การกำหนดค่าเครื่องมือในโปรแกรม LabVIEW เพื่อระบุตำแหน่งพีค	55
4.2.1.1 กรณีอินฟราเรดสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น	55
4.2.1.2 กรณีอินฟราเรดสเปกตรัมที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้นและผ่านการทำอนุพันธ์อันดับสอง	57
4.2.2 การแปลผลเชิงคุณภาพของอินฟราเรดสเปกตรัมกรณีไม่ผ่านการประมวลผลขั้นต้น	58
4.2.2.1 นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต	58
4.2.2.2 นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต	59
4.2.2.3 นิ่วสตูไวท์	59
4.2.2.4 นิ่วแซนทีน	60
4.2.2.5 นิ่วซิสทีน	61

สารบัญ(ต่อ)

	หน้า
4.2.2.6 นิ่วบรูไชต์	61
4.2.2.7 นิ่วยูริก	62
4.2.2.8 นิ่วผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต	63
4.2.3 การแปลผลเชิงคุณภาพของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้นและการทำอนุพันธ์อันดับสอง	67
4.2.3.1 กรณีใช้ตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์	67
4.2.3.2 กรณีใช้วิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียด	71
4.3 ผลการแปลผลเชิงปริมาณ	73
บทที่ 5 สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ	81
5.1 การวิเคราะห์และสรุปผลการทดลอง	81
5.1.1 ผลการทดลองจากขั้นตอนการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น	81
5.1.2 ผลการแปลผลเชิงคุณภาพ	81
5.1.3 ผลการการแปลผลเชิงปริมาณจากจากวิธี zero-crossing first-derivative และการประเมินค่า Standard Error of Performance (SEP)	82
5.2 ปัญหาและข้อเสนอแนะ	82
5.2.1 ปัญหา	82
5.2.2 ข้อเสนอแนะ	83
บรรณานุกรม	84
ภาคผนวก	88
ภาคผนวก ก ผลงานที่ตีพิมพ์	89
ประวัติผู้เขียน	95

รายการตาราง

		หน้า
ตารางที่ 2.1	รังสีแม่เหล็กไฟฟ้าช่วงต่าง ๆ	13
ตารางที่ 2.2	ช่วงคลื่นของอินฟราเรด	14
ตารางที่ 3.1	ตัวอย่างของนิ่วที่ใช้ในการทดลอง	41
ตารางที่ 4.1	ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้น	49
ตารางที่ 4.2	อัตราส่วนร้อยละของปริมาณองค์ประกอบนิ่วชนิดผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต และส่วนประกอบไม่ทราบชนิด	65
ตารางที่ 4.3	ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่งแถบดูดกลืน 1324 cm^{-1} ของนิ่วเดี่ยวชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต (COM)	76
ตารางที่ 4.3	ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง 1324 cm^{-1} ของนิ่วผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต (COM) และนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต(COD)	78

รายการภาพประกอบ

		หน้า
ภาพประกอบ 1-1	จำนวนประชากรทั้งประเทศที่ป่วยเป็นโรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะ ตั้งแต่ปีพ.ศ. 2550-2553	1
ภาพประกอบ 1-2	จำนวนประชากรที่ป่วยเป็นโรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะ ตั้งแต่ปีพ.ศ. 2550-2553 โดยจำแนกตามภูมิภาค	2
ภาพประกอบ 2-1	ตำแหน่งที่พบนิ่วในทางเดินปัสสาวะ	9
ภาพประกอบ 2-2	เทคนิคบดผสมก้อนนิ่วตัวอย่างกับโพแทสเซียมโบรไมด์	12
ภาพประกอบ 2-3	เครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี	12
ภาพประกอบ 2-4	การสั่นพื้นฐานรูปแบบต่างๆ	15
ภาพประกอบ 2-5	ลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัมในรูปแบบการดูดกลืนแสง (Absorbance)	17
ภาพประกอบ 2-6	เส้นพื้นฐานถูก offset ขึ้นมาจากเส้นศูนย์	20
ภาพประกอบ 2-7	เส้นพื้นฐานมีค่าความชัน	21
ภาพประกอบ 2-8	เส้นพื้นฐานโค้ง	21
ภาพประกอบ 2-9	การเปรียบเทียบสเปกตรัมของสารที่ผ่านและไม่ผ่านการปรับเส้นเรียบ	22
ภาพประกอบ 2-10	(a) ลักษณะสัญญาณก่อนผ่านตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ (b) ลักษณะสัญญาณหลังผ่านตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ ที่มีจำนวนตำแหน่งในการพิจารณาเท่ากับ 65 ตำแหน่ง และมีอันดับของพหุนาม 2, 4 และ 6 ตามลำดับ	26
ภาพประกอบ 2-11	ลักษณะสเปกตรัมหลังการแปลงอนุพันธ์อันดับต่างๆ	28
ภาพประกอบ 2-12	โครงสร้างทางเคมีของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต โมโนไฮเดรต	28
ภาพประกอบ 2-13	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต โมโนไฮเดรต	29
ภาพประกอบ 2-14	โครงสร้างทางเคมีของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรต	30
ภาพประกอบ 2-15	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรต	30
ภาพประกอบ 2-16	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแคลเซียมฟอสเฟต	31
ภาพประกอบ 2-17	โครงสร้างทางเคมีของนิ่วบรูไชท์	32
ภาพประกอบ 2-18	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วบรูไชท์	32

รายการภาพประกอบ(ต่อ)

		หน้า
ภาพประกอบ 2-19	โครงสร้างทางเคมีของนิ่วสตรูไวต์	33
ภาพประกอบ 2-20	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วสตรูไวต์	33
ภาพประกอบ 2-21	โครงสร้างทางเคมีของนิ่วยูริก	34
ภาพประกอบ 2-22	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วยูริก	34
ภาพประกอบ 2-23	โครงสร้างทางเคมีของนิ่วซิสทีน	35
ภาพประกอบ 2-24	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วซิสทีน	35
ภาพประกอบ 2-25	โครงสร้างทางเคมีของนิ่วแซนทีน	36
ภาพประกอบ 2-26	อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแซนทีน	36
ภาพประกอบ 2-27	เส้นโค้งมาตรฐานเปรียบเทียบ	37
ภาพประกอบ 2-28	ลักษณะการคำนวณค่า SNR สำหรับอินฟราเรดสเปกตรัม	38
ภาพประกอบ 3-1	หน้าต่างแสดงตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมจากโปรแกรม EZ OMNIC	40
ภาพประกอบ 3-2	ระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัม	42
ภาพประกอบ 3-3	แผนภูมิแสดงขั้นตอนการทดลอง	45
ภาพประกอบ 4-1	ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมตัวอย่างเมื่อแสดงผลโดยโปรแกรม LabVIEW	46
ภาพประกอบ 4-2	อินฟราเรดสเปกตรัมหลังการทำ Normalization	47
ภาพประกอบ 4-3	อินฟราเรดสเปกตรัมเมื่อผ่านการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่ง	48
ภาพประกอบ 4-4	ค่า SNR เฉลี่ยของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์	50
ภาพประกอบ 4-5	ผลการเปรียบเทียบขนาดพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังการทำ smoothing ด้วยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ที่หน้าต่างการพิจารณาเท่ากับ 5 และ 11 side points	51
ภาพประกอบ 4-6	ผลการเปรียบเทียบลักษณะสเปกตรัมก่อนและหลังการทำ smoothing โดยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ ที่หน้าต่างพิจารณาเท่ากับ 5 side points	52

รายการภาพประกอบ(ต่อ)

		หน้า
ภาพประกอบ 4-7	ค่า SNR เฉลี่ยของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด	53
ภาพประกอบ 4-8	ผลการเปรียบเทียบขนาดพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังการทำ smoothing ด้วยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด (db08(L2))	54
ภาพประกอบ 4-9	ผลการเปรียบเทียบลักษณะสเปกตรัมก่อนและหลังการทำ smoothing ด้วยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด (db08(L2))	54
ภาพประกอบ 4-10	ผลการระบุตำแหน่งจากการกำหนดค่า width ค่าต่างๆ	56
ภาพประกอบ 4-11	อินฟราเรดสเปกตรัมที่ใช้เทคนิคตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ และผ่านการทำอนุพันธ์อันดับสอง	57
ภาพประกอบ 4-12	อินฟราเรดสเปกตรัมที่ใช้เทคนิควิเคราะห์หลายระดับความละเอียดและผ่านการทำอนุพันธ์อันดับสอง	58
ภาพประกอบ 4-13	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต	58
ภาพประกอบ 4-14	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต	59
ภาพประกอบ 4-15	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วสตูไวท์	60
ภาพประกอบ 4-16	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแซนทีน	60
ภาพประกอบ 4-17	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วซิสทีน	61
ภาพประกอบ 4-18	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วบรูไชต์	62
ภาพประกอบ 4-19	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วยูริก	62
ภาพประกอบ 4-20	เปอร์เซ็นต์ความถูกต้องในการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวที่ไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น	63

รายการภาพประกอบ(ต่อ)

		หน้า
ภาพประกอบ 4-21	(A) อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วออกซาเลตโมโนไฮเดรต (COM) (B) อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วออกซาเลตไดไฮเดรต (COD) (C) อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วผสมระหว่างนิ่วออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วออกซาเลตไดไฮเดรต (COM+COD)	64
ภาพประกอบ 4-22	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมนิ่วชนิดผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ตัวอย่างที่ 19	65
ภาพประกอบ 4-23	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมนิ่วชนิดผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ตัวอย่างที่ 79	65
ภาพประกอบ 4-24	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมนิ่วชนิดผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ตัวอย่างที่ 101	66
ภาพประกอบ 4-25	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตในช่วงความถี่ 4000-400 cm^{-1}	67
ภาพประกอบ 4-26	หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตในช่วงความถี่ 2000-400 cm^{-1}	68
ภาพประกอบ 4-27	เปอร์เซ็นต์ความถูกต้องในการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวที่ผ่านตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์และการทำอนุพันธ์อันดับสอง	68
ภาพประกอบ 4-28	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 107	69
ภาพประกอบ 4-29	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 167	70
ภาพประกอบ 4-30	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 79	70
ภาพประกอบ 4-31	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 101	71
ภาพประกอบ 4-32	เปอร์เซ็นต์ความถูกต้องในการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวโดยใช้วิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียดและการทำอนุพันธ์อันดับสอง	71
ภาพประกอบ 4-33	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 107	72

รายการภาพประกอบ(ต่อ)

		หน้า
ภาพประกอบ 4-34	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 167	72
ภาพประกอบ 4-35	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 79	73
ภาพประกอบ 4-36	ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 101	73
ภาพประกอบ 4-37	zero-crossing-point first-derivative Infrared spectrum (SG)(COM)	77
ภาพประกอบ 4-38	zero-crossing-point first-derivative Infrared spectrum (SG)	79
ภาพประกอบ 4-39	zero-crossing-point first-derivative Infrared spectrum (MRA)	79

สัญลักษณ์คำย่อและตัวย่อ

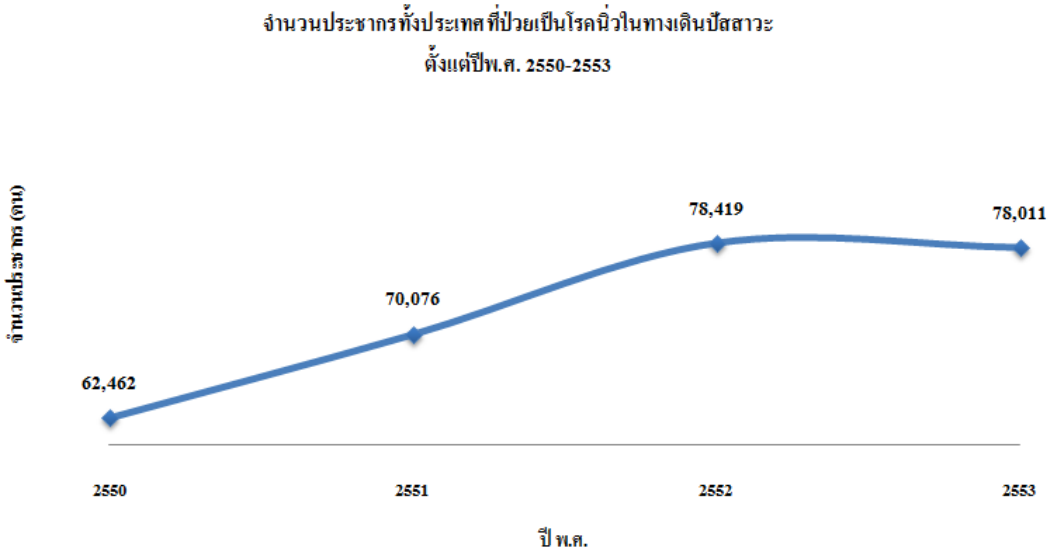
COM	Calcium Oxalate MonoHydrate นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต
COD	Calcium Oxalate DiHydrate นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต
MRA	Multiresolution analysis วิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียด
SNR	Signal to Noise Ratio อัตราส่วนระหว่างสัญญาณต่อสัญญาณรบกวน
SEP	Standard Error of Performance ค่าความผิดพลาดที่เกิดขึ้นจากการประเมินผล

บทที่ 1

บทนำ

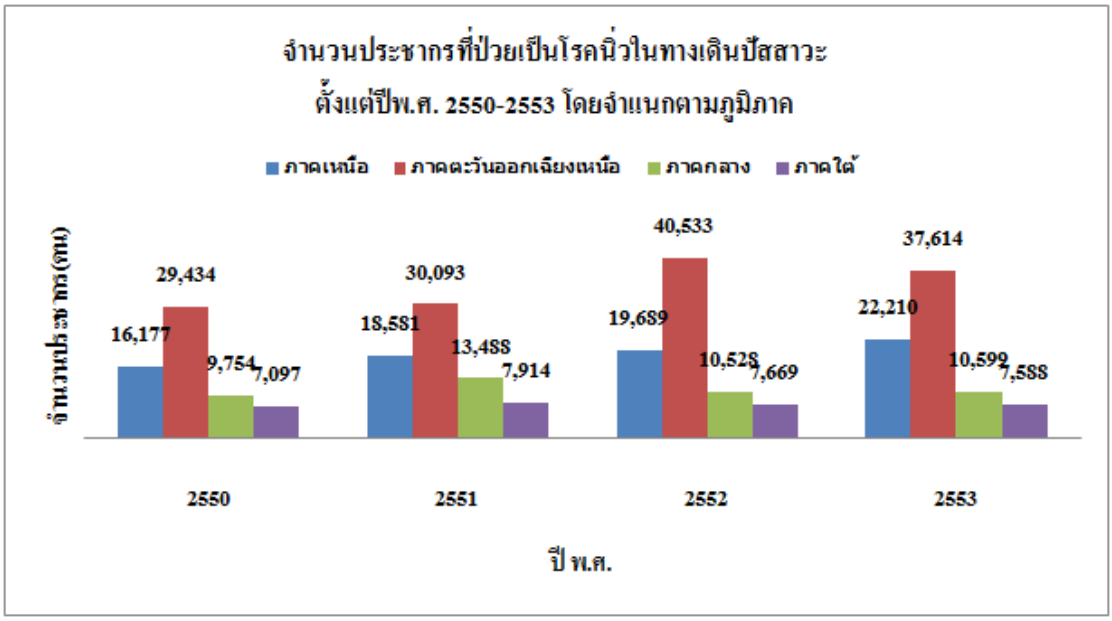
1.1 ความสำคัญและที่มาของงานวิจัย

เมื่อกล่าวถึงปัญหาด้านสุขภาพที่พบได้มากในปัจจุบัน หลายคนจะนึกถึงโรคมะเร็ง โรคหัวใจ โรคเส้นเลือดตีบ หรือโรคอ้วน ซึ่งปัญหาดังกล่าวเป็นสาเหตุอันดับต้นๆ ของการเสียชีวิต แต่จากข้อมูลสถิติของกระทรวงสาธารณะสุขพบว่า โรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะก็เป็นอีกกลุ่มโรคที่พบบ่อย และสามารถนำไปสู่การเสียชีวิตได้เช่นกัน หากไม่ได้รับการรักษาที่เหมาะสม นิ่วในระบบทางเดินปัสสาวะแบ่งออกเป็น นิ่วในไต นิ่วในท่อไต นิ่วในกระเพาะปัสสาวะ หรือนิ่วในท่อปัสสาวะ ก้อนนิ่วเหล่านี้จะทำให้เกิดการติดเชื้อในระบบทางเดินปัสสาวะซึ่งส่งผลกระทบต่อการทำงานของไต เป็นสาเหตุของไตเสื่อม ในระยะยาวจะส่งผลให้เกิดภาวะไตอักเสบเรื้อรัง และกลายเป็นโ รคไตวายซึ่งเป็นสาเหตุของการเสียชีวิตได้ มีแนวโน้มพบผู้ป่วยโรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะเพิ่มสูงขึ้นในทุกปี โดยอ้างอิง จาก รายงานสถิติผู้ป่วยโรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะของกระทรวงสาธารณะสุขตั้งแต่ปี พ.ศ. 2550-2553[1] ดังแสดงในภาพประกอบ 1-1



ภาพประกอบ 1-1 จำนวนประชากรทั้งประเทศที่ป่วยเป็นโรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะ ตั้งแต่ปีพ.ศ. 2550-2553

เมื่อพิจารณาโดยจำแนก ตามภูมิภาคแล้วพบว่าภาคตะวันออกเฉียงเหนือมีอัตราการป่วยเป็นโรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะมากที่สุด และรองลงมาคือภาคเหนือ ดังภาพประกอบ 1-2



ภาพประกอบ 1-2 จำนวนประชากรที่ป่วยเป็นโรคนิ่วในทางเดินปัสสาวะ
ตั้งแต่ปีพ.ศ. 2550-2553 โดยจำแนกตามภูมิภาค

สาเหตุหลักของการเกิดนิ่วมาจากค่านิยมในการบริโภคอาหารที่มีส่วนทำให้เกิดนิ่วและมีการสะสมตัวของก้อนนิ่วภายในร่างกาย นอกจากนั้นก็เป็นผลมาจาก ของเสีย ที่เกิดขึ้น ในร่างกาย ได้แก่ แคลเซียมออกซาเลต ฟอสเฟต และกรดยูริก ดังนั้นกลไกการเกิด นิ่วแต่ละชนิดจะแตกต่างกันตามลักษณะองค์ประกอบหลักทางเคมี โดยแบ่งออกเป็น 5 กลุ่มใหญ่ๆ คือ นิ่วแคลเซียมออกซาเลต นิ่วยูริก นิ่วแมกนีเซียมแอมโมเนียมฟอสเฟส นิ่วซีสทีน และนิ่วแซนทีน [2]

การกำจัดก้อนนิ่วโดยทั่วไปจะใช้วิธีการผ่าเอาก้อนนิ่วออก หรือใช้รังสีสลายก้อนนิ่ว ทิ้งก็ได้ โดยเป้าหมายหลักในการรักษานิ่วในทางเดินปัสสาวะจะประกอบด้วย 2 ส่วนคือ การกำจัดนิ่วออกจากตัวผู้ป่วย และการป้องกันการกลับมาเป็นซ้ำ ซึ่งเป็นเป้าหมายสำคัญของการรักษา เนื่องจากพบว่าโอกาสการเกิดนิ่วซ้ำหลังการผ่าตัดหรือสลายนิ่วสูงถึงร้อยละ 39 [2] อาจมีสาเหตุมาจากการเหลือค้างของนิ่ว เดิม หรือ จาก การรับประทานอาหาร แบบเดิม ที่มีส่วนทำให้เกิดนิ่ว นอกจากนั้นการกลับมาเป็นซ้ำจะทำให้ ตัวผู้ป่วยรวมถึงภาครัฐ ต้องเสียค่าใช้จ่ายในการรักษา เพิ่มมากขึ้น

การทราบองค์ประกอบทางเคมีของก้อนนิ่วจะเป็นวิธีการป้องกันการกลับมาสะสมของนิ่วใหม่ ซึ่งวิธีการวิเคราะห์องค์ประกอบของนิ่วในปัจจุบันมีด้วยกันอยู่หลาย วิธี [3-5] ได้แก่ Thermal analysis (การวิเคราะห์ด้วยความร้อน) Chemical analysis (การวิเคราะห์ทางเคมี) X-ray diffraction (การวิเคราะห์การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์เมื่อกระทบกับสาร) Infrared spectroscopy (การวิเคราะห์ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมจากการดูดกลืนแสงอินฟราเรดของสาร)

วิธีที่ได้รับความนิยมและใช้กันอย่างแพร่หลายคือ วิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี และเอ็กซ์เรย์ดิฟแ ฟรกชัน แต่พบว่า วิธีเอ็กซ์เรย์ดิฟแฟรกชันนั้น เหมาะสำหรับการวิเคราะห์สารที่มีลักษณะเป็นผลึก [5] ต้องใช้สารเฉพาะสำหรับการตรวจสอบนิ่วแต่ละชนิด ซึ่งสารที่ใช้ทดสอบจะมีราคาแพง นอกจากนั้นในการวิเคราะห์สาร ที่มีขนาดของตัวอย่างเท่ากัน จะมีค่าใช้จ่ายที่สูง กว่า [6] จากสาเหตุดังกล่าวทำให้ วิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ได้รับความนิยมมากกว่า ขั้นตอนในการวิเคราะห์โดยใช้วิธีนี้ทำได้โดยการบดผสมก้อนนิ่วตัวอย่างกับโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr pellet) แล้วนำไปอัดแรงดัน เม็ดสารดังกล่าวจะถูกนำไปเข้าเครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี โมเลกุลของสารจะดูดกลืนพลังงานของรังสีอินฟราเรดช่วงกลาง (mid-infrared) จนทำให้เกิดการสั่นของพันธะภายในโมเลกุล ปรากฏการณ์ทั้งหมดที่เกิดขึ้น จะถูกบันทึกไว้เป็นอินฟราเรดสเปกตรัม ซึ่งลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัมจะแสดงความสัมพันธ์ระหว่างตำแหน่งแถบดูดกลืนในรูปของเล ขคลื่น (wavenumber, cm^{-1}) กับค่าความเข้มข้น (intensity) ซึ่งอาจจะแสดงอยู่ในรูปของค่า เปอร์เซ็น ต์การส่งผ่านแสง (%transmittance, T) หรือค่าการดูดกลืนแสง (absorbance, A) ก็ได้ [7] จากนั้น จะเข้าสู่ขั้นตอนการการแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัม ซึ่งมีด้วยกันสองด้านคือ การแปลผล เชิงคุณภาพ (qualitative analysis) คือการ ระบุตำแหน่งการเกิด จุดยอด (peak) หรือ ที่เรียกว่าตำแหน่งแถบดูดกลืนความถี่ โดยแต่ละตำแหน่งแถบดูดกลืนความถี่จะเป็นผลมาจากการดูดกลืนแสงอินฟร าเรดของหมู่ฟังก์ชันที่แตกต่างกันตามอ งค์ประกอบทางเคมี ของนิ่ว ชนิดนั้นๆ และ โอกาสที่อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วต่างชนิดจะเหมือนกันทั้งหมดนั้นมีน้อยมาก จึงสามารถใช้ผลส่วนนี้ในการจำแนกนิ่วชนิดต่างๆ ออกจากกันได้ การแปลผลอีกส่วนหนึ่ง คือการแปลผลในเชิงปริมาณ (quantitative analysis) จะถูกนำมาใช้วิเคราะห์ในกรณีที่เป็นนิ่วชนิดผสม เพื่อหาอัตราส่วนประกอบ ของนิ่วชนิดผสมนั้นจากค่าความเข้มข้นที่วัดได้จาก ตำแหน่ง แถบดูดกลืนความถี่ นิ่วผสมที่พบมากที่สุดคือนิ่วผสมชนิดนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต

งานวิจัยนี้ได้นำเสนอระบบผู้เชี่ยวชาญอัตโนมัติสำหรับการคัดแยกนิ่วชนิดต่าง ๆ จากการแปลผลอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วในทางเดินปัสสาวะที่เกิดขึ้นเองตามธรรมชาติ ซึ่งก้อนนิ่วอาจมีส่วนประกอบอื่นๆ นอกเหนือจากส่วนประกอบหลักของนิ่วชนิดนั้นๆ ปะปนอยู่ โดยเฉพาะการแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วชนิดซึ่งจะ ประกอบด้วย ตำแหน่งแถบดูดกลืนความถี่จำนวนมากและมีความซับซ้อน การแปลผลจึงทำได้ยาก ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงได้ศึกษาและพัฒนาระบบสำหรับช่วยในการแปรผลอินฟราเรดสเปกตรัม ของนิ่วประเภทต่างๆ ให้ ง่าย รวดเร็ว และมีความแม่นยำเพียงพอในการระบุชนิด รวมถึงองค์ประกอบของนิ่ว เพื่อประโยชน์ในการรักษาต่อไป

1.2 การทบทวนวรรณกรรม

จากการศึกษาบทความและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการแปลผลอินฟราเรดสเปกตรัม ในสารประกอบชีวภาพชนิดต่างๆ พบว่าสามารถแบ่งออกเป็น 2 ส่วนได้แก่ ส่วนแรกคือ ขั้นตอนการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น (preprocessing methods) ประกอบไปด้วยการปรับขนาดสัญญาณบรรทัดฐาน (normalization) การกำจัดสัญญาณเส้นแนวโน้ม (baseline correction) และการปรับเส้นเรียบสเปกตรัม (spectral smoothing) และส่วนที่สองคือขั้นตอนการแปลผล ซึ่งจะประกอบไปด้วยการแปลผลเชิงคุณภาพและการแปลผลเชิงปริมาณ ปัญหาที่พบในกา รแปลผลจากอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีคือการวางตัวผิดปกติ ของเส้นแนวโน้มพื้นฐาน (baseline) ซึ่งเป็นผลจากปัจจัยภายนอกขณะการทดลอง ได้แก่ อุณหภูมิ หรือความชื้นของเครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี และการซ้อนทับกันของตำแหน่งพีค (overlapped peaks) อาจส่งผลให้การแปลผลทั้งชนิด และปริมาณของนิ่วผิดพลาดได้ มีงานวิจัยที่เกี่ยวข้องซึ่งได้รับการตีพิมพ์ดังต่อไปนี้

1.2.1 การประมวลผลสัญญาณขั้นต้น (preprocessing methods)

ผลการศึกษาบทความเกี่ยวกับการแปลผลอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีพบว่ามีการมุ่งเน้นไปที่ 2 ขั้นตอนก่อนการแปลผล ได้แก่การกำจัดเส้นแนวโน้ม และการกำจัดสัญญาณรบกวน วิธีการที่ถูกนำมาใช้ในขั้นตอนการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น สำหรับอินฟราเรด ส เปกโทรสโกปีมีดังต่อไปนี้ โดยจะถูกแบ่งออกเป็นสองส่วน คือส่วนของการปรับเส้นแนวโน้ม พื้นฐาน (baseline correction) และส่วนของการการกำจัดสัญญาณรบกวน (spectral smoothing)

บทความ [8] กล่าวว่า Schulze et al. [9] ได้ทำการศึกษาวรรณกรรมเกี่ยวกับกำจัดเส้นแนวโน้มที่เกิดขึ้นบนอินฟราเรดสเปกตรัม โดยนำเสนอใน 3 วิธีการได้แก่ วิธีการปรับเส้นโค้ง

(curve fitting) ซึ่งเป็นวิธีการที่ง่ายที่สุดในการปรับเส้นแนวโน้ม โดย การหาเส้นโค้งพอดี ของสเปกตรัม แล้วนำไปลบออกจากสเปกตรัมเดิม (subtracting) ซึ่งในความเป็นจริงพบว่าเส้นโค้งพอดีที่ได้อาจไม่ใช่เส้นแนวโน้มที่แท้จริงของสเปกตรัม วิธีการต่อมาคือ วิธีวิเคราะห์ความถี่ (frequency analysis) โดยการแปลงฟูเรียร์ (fourier transform) และการแปลงเวฟเล็ต (wavelet transform) พบว่ามีการประยุกต์ใช้การวิเคราะห์ความถี่ในขั้นตอนการประมวลผลสัญญาณขั้นต้นสำหรับอินฟราเรดสเปกตรัมหลากหลายแขนง โดยเฉพาะอย่างยิ่ง บทความที่เกี่ยวข้องกับการวิเคราะห์องค์ประกอบทางเคมีของสาร โดยการ แบ่งลักษณะสัญญาณออกเป็นองค์ประกอบความถี่สูง (high frequency features) องค์ประกอบความถี่กลาง (middle-frequency features) และองค์ประกอบความถี่ต่ำ (low frequency features) โดยมองเส้นแนวโน้มเป็นองค์ประกอบความถี่ต่ำ ดังนั้นการกำจัดองค์ประกอบความถี่ต่ำออกไป ก็จะเป็นการกำจัดเส้นแนวโน้ม [10] โดยใช้การแปลงเวฟเล็ตแบบ Daubechies เนื่องจากมีโครงสร้างคล้ายกับลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัมมากที่สุด แต่ข้อด้อยที่พบคือไม่มีทฤษฎีตรงตัวที่ใช้สำหรับอธิบายการกำจัดเส้นแนวโน้มนี้ วิธีการ สุดท้ายคือการ หาอนุพันธ์ (Derivative) [4-5], [11-14] ซึ่งมีทั้งการใช้อนุพันธ์อันดับหนึ่งและอนุพันธ์อันดับสอง นอกจากนั้นลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังการทำอนุพันธ์จะง่ายต่อการนำไปแปลผลเชิงปริมาณอีกด้วย ข้อด้อย ของวิธีการนี้ คือการกำหนดค่าที่เหมาะสมเพื่อกำจัดเส้นแนวโน้ม เนื่องจากพบว่าหากกำหนดค่าหน้าต่างของการวิเคราะห์กว้างเกินไปจะเป็นการบิดเบือนลักษณะของ พีค ในขณะเดียวกันหากกำหนดค่าให้แคบเกินไปก็จะยิ่งเป็นการเพิ่มสัญญาณรบกวนในสเปคตรัมมากยิ่งขึ้น

วิธีการที่ใช้ในขั้นตอนการกำจัดสัญญาณรบกวน ที่พบมากที่สุดคือ วิธีกรองเฉลี่ยเคลื่อนที่ (moving average) [14-15] และตัวกรองของซาวิสกี้- โกเลย์ (Savitzky-Golay filter) [4-5], [11], [14-17] ซึ่งพบว่าวิธีตัวกรองเฉลี่ยเคลื่อนที่ใช้วิธีการแทนที่ค่าช่วงที่พิจารณาด้วยค่าเฉลี่ยของตำแหน่งทั้งหมดที่อยู่ในช่วงนั้น และค่าดังกล่าวจะเป็นตัวกำหนดอันดับพหุนามของการปรับเส้นโค้ง (polynomial degree) ดังนั้นจะส่งผลให้ข้อมูลบางตำแหน่งเกิดกา รสูญหาย ทำให้ลักษณะของสเปกตรัมที่ได้มีความผิดเพี้ยนสูง ส่วนตัวกรองของซาวิสกี้-โกเลย์ นั้น เรียกได้อีกอย่างว่าหน้าต่างตัวกรองเฉลี่ยเคลื่อนที่ (moving window averaging) ซึ่งจะแตกต่างกับตัวกรองเฉลี่ยเคลื่ อนที่ตรงที่จะต้องมีการกำหนดทั้งขนาดหน้าต่างของการวิเคราะห์ (window size) และอันดับของพหุนาม

(polynomial order) ซึ่งค่าพหุนามนี้จะใช้สำหรับการปรับเส้นเรียบของสเปกตรัม หน้าต่างของการวิเคราะห์จะเลื่อนตำแหน่งการพิจารณาไปเรื่อยๆ ทีละตำแหน่งจนสิ้นสุดตำแหน่งการพิจารณา

1.2.2 การดึงคุณลักษณะสำคัญของสัญญาณ (feature extraction)

จากที่ได้กล่าวไปแล้วว่าขั้นตอนการแปลผลจากอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีนั้นแบ่งออกเป็นสองส่วน คือการแปลผลเชิงคุณภาพและการแปลผลเชิงปริมาณ จากบทความวิจัยที่ได้ศึกษามาพบว่าโดยส่วนมากแล้วจะเป็นการศึกษาวิธีการสำหรับการแปลผลในเชิงปริมาณเป็นส่วนใหญ่ การแปลผลในเชิงปริมาณเป็นการบ อกอัตราส่วนประกอบของหมู่ฟังก์ชั นจากอินฟราเรดสเปกตรัม ซึ่งอาจเป็นการผสมระหว่างสารประกอบสองชนิด หรือมากกว่า เนื่องจากโดยธรรมชาติแล้ว นิ่วในทางเดินปัสสาวะจะเป็นการผสมกันระหว่างนิ่วหลายชนิด ดังนั้นจึงต้องการความแม่นยำในการวิเคราะห์เชิงปริมาณ วิธีการที่มีการตีพิมพ์และได้รับการยอมรับเด่นๆ มีสองวิ ธีคือ การใช้โครงข่ายประสาทเทียมในการวิเคราะห์ (artificial neuron network) [17] และวิธีการ หาอนุพันธ์ ทั้งอันดับที่ 1 และ 2 (1^{st} – 2^{nd} derivative) [4-5], [11], [14-17] ซึ่งจากการศึกษาบทความวิจัยทั้งหมดพบว่าข้อด้อยของการวิเคราะห์โดยการใช้โครงข่ายประสาทเทียมคือ จำเป็นจะต้องมีตัวอย่างในการทดลองจำนวนมาก ขั้นตอนการกำหนดค่าตัวแปลซับซ้อน ยุ่งยาก แต่ให้ผลการทดลองที่ละเอียดและมีความแม่นยำสูง ในขณะที่ข้อดีของวิธีการหาอนุ พันธ์คือสามารถระบุตำแหน่งแถบดูดกลืนแสงที่อยู่ในส่วนของการซ้อนทับ (overlapping) ได้จากการหาอนุพันธ์อันดับสองของอินฟราเรดสเปกตรัม และ สามารถหาเปอร์เซ็ นต์อัตราส่วนผสมของนิ่วที่เกิดจากนิ่ วสองชนิดได้โดยการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งควบคู่ไปกับการใช้ตำแหน่งจุดตัดผ่านศูนย์ (zero-crossing) และตัวกรองของซาวิสกี้- โกเลย์ ซึ่งพบว่ามีอีกหลายบทความวิจัยที่ใช้วิธีการนี้ไปประยุกต์ใช้สำหรับการหาอัตราส่วนผสมระหว่างสารสองชนิดด้วย [17], [19] ข้อด้อยที่พบได้จากวิธีนี้คือการที่ลักษณะสเปกตรัมที่ได้หลังการทำอนุพันธ์จะไม่เหมือนกับลักษณะสเปกตรัมตั้งต้น เนื่องจากเมื่อผ่านการ ทำอนุพันธ์ขนาดของอินฟราเรดสเปกตรัมจะลดลงในอัตรา 1 ใน 3 [4] นอกจากนั้นยังพบว่าตำแหน่งพีคที่มีค่าเป็นบวก จะเปลี่ยนไปมีค่าเป็นลบเมื่อผ่านการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่งแล้ว

จากการศึกษาบทความข้างต้นพบว่าการทำอนุพันธ์เป็นวิธีการที่มีประสิทธิภาพในการกำจัดเส้นแนวโน้มพื้นฐานของอินฟราเรดสเปกตรัม และยังมีประโยชน์ ต่อการแปลผลเชิงคุณภาพและปริมาณ ซึ่งส่วนใหญ่จะทำงานควบคู่ไปกับตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ในการกรองสัญญาณรบกวน

ที่เกิดขึ้นหลังจากผ่านการทำอนุพันธ์ อย่างไรก็ตาม พบว่ายังไม่มีการทดลองกับอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วที่เกิดขึ้นเองโดยธรรมชาติในประเทศไทย ในงานวิจัยนี้จึงได้ใช้วิธีการขั้นต้นเป็นเทคนิคสำคัญในการวิเคราะห์ผล และทำการทดลองเปรียบเทียบตัวกรองสัญญาณ รบกวนจากตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ที่เป็นวิธีการเดิมกับวิธีการวิเคราะห์ความถี่โดยการแปลงเวฟเล็ต แล้ววิเคราะห์ผลผลที่ได้ ทั้งในส่วนของการแปลผลเชิงปริมาณและเชิงคุณภาพ ตามลำดับ

1.3 วัตถุประสงค์

1.3.1 เพื่อศึกษาลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัม และการแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัม

1.3.2 เพื่อศึกษานิ่วในทางเดินปัสสาวะ และความแตกต่างของนิ่วแต่ละชนิดตามหมู่ฟังก์ชันที่เป็นองค์ประกอบ

1.3.3 เพื่อเปรียบเทียบวิธีการและหาวิธีการที่เหมาะสม ในการวิเคราะห์ผลจากอินฟราเรดสเปกตรัม สำหรับการกำหนดเงื่อนไขให้กับระบบผู้เชี่ยวชาญ

1.4 ขอบเขตงานวิจัย

1.4.1 ใช้ข้อมูล อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีของนิ่วใ นทางเดินปัสสาวะที่ นำมาจากโรงพยาบาลเชียงใหม่ ปี พ.ศ. 2544 จำนวน 52 ตัวอย่าง โดยข้อมูลที่นำมาทดลองมีทั้งนิ่วชนิดเดี่ยวและชนิดผสม บันทึกผลมาในโปรแกรม EZ OMNIC

1.4.2 สามารถแปลผลเชิงคุณภาพจากตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมได้

1.4.3 สามารถแปลผลเชิงปริมาณจากตัวอย่างของนิ่วชนิดผสมได้

1.5 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

ได้เครื่องมือสำหรับการจำแนกประเภทของนิ่วจากอินฟราเรดสเปกตรัมที่มีความซับซ้อน สำหรับช่วยย่นระยะเวลาในการแปลผล และตัดปัญหาเรื่องขาดผู้เชี่ยวชาญในการแปลผล

1.6 วิธีดำเนินการวิจัย

1.6.1 ศึกษาและค้นคว้าโครงงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

1.6.2 ศึกษา หลักการของ อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีและรวบรวมข้อมูลอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วประเภทต่าง ๆ

1.6.3 ศึกษาวิธีการแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัม และเทคนิคที่ใช้ในการแปลผลทั้งเชิงคุณภาพและปริมาณ

1.6.4 สร้างเงื่อนไขการตัดสินใจโดยใช้ซอฟ ต์แวร์ LabVIEW ในการวิเคราะห์ผลข้อมูล และใช้เทคนิคในการแปลผลมาทดลองใช้กับข้อมูลจริง

1.6.5 ตรวจสอบ พัฒนาและแก้ไขจุดบกพร่องของอัลกอริทึ่มที่ใช้ในการแปลผลอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วในทางเดินปัสสาวะ

1.6.6 ตรวจสอบอีกครั้ง สรุปผลและเขียนรายงาน

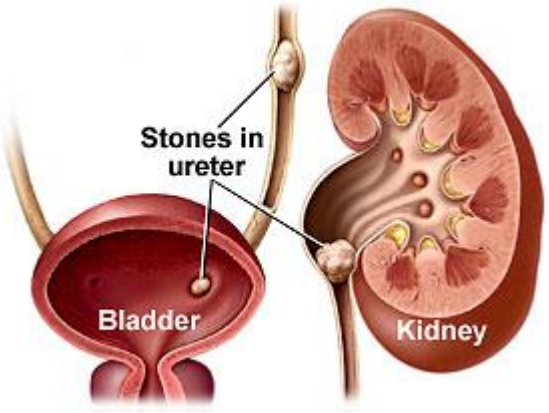
บทที่ 2

ทฤษฎีและหลักการ

การวิเคราะห์และการแปลผลจากอินฟราเรดส เปกโทรสโกปี จะประกอบด้วยสองส่วนหลักๆ คือ การประมวลผลสัญญาณขั้นต้น และส่วนของการแปลผล ดังนั้นผู้วิจัยจะแบ่งทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับงานวิจัยดังต่อไปนี้ 1) นิ่วในทางเดินปัสสาวะ (Urinary tract stone) 2) เทคนิคที่ใช้ในการวิเคราะห์นิ่ว 3) ขั้นตอนการวิเคราะห์นิ่วโดย วิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี 4) หลักการของอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี 5) การแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัม

2.1 นิ่วในทางเดินปัสสาวะ (urinary tract stones)

นิ่วเกิดจากการตกผลึกของของเสียที่จะขับออกทางปัสสาวะ รวมตัวกันเป็นนิ่วเกิดขึ้นในไต ซึ่งก้อนนิ่วในระยะแรกที่มีขนาดเล็กก็อาจจะเคลื่อนที่หลุดออกมาที่ท่อไต และลงไปที่กระเพาะปัสสาวะ หากเกิดการสะสมของผลึกจำนวนมาก ขนาดของนิ่วก็จะยิ่งมีขนาดใหญ่ขึ้น หรืออาจมีก้อนนิ่วปริมาณที่เยอะขึ้น ทำให้ค้างอยู่ในบริเวณที่เรียกว่า ทางเดินปัสสาวะและในไต [2] โดยตำแหน่งที่พบแสดงได้ในภาพประกอบ 2-1 โดยนิ่วในทางเดินปัสสาวะแบ่งออกเป็น 2 ประเภทคือ นิ่วในไตและท่อไต (renal calculi, ureteral calculi) และนิ่วในกระเพาะปัสสาวะและทางเดินปัสสาวะ (vesicle calculi, urethral calculi)



ภาพประกอบ 2-1 ตำแหน่งที่พบนิ่วในทางเดินปัสสาวะ [20]

การมีนิ่วอาจทำให้เกิดโรคแทรกซ้อนได้หลายอย่าง ทั้งการติดเชื้อในระบบทางเดินปัสสาวะ หรือภาวะไตทำงานหนักจนเกิดภาวะไตวายเรื้อรังอาจถึงขั้นเสียชีวิตได้ ดังนั้นการรักษาโรคนิ่วจะมุ่งเน้นในสองทาง คือ การนำนิ่วออก และการป้องกันไม่ให้เป็นซ้ำซึ่งเป็นขั้นตอนสำคัญในการรักษา เนื่องจากโอกาสในการกลับมาเป็นซ้ำมีมากถึงร้อยละ 39 ขึ้นอยู่กับองค์ประกอบของก้อนนิ่ว [2-3]

ก้อนนิ่วมีองค์ประกอบ 2 ส่วนคือ ส่วนที่เป็นแร่ธาตุ (mineral composition) และส่วนที่เป็นสารอินทรีย์ (organic matrix) ซึ่งร้อยละ 5-10 ของสารจำพวกนี้จะเป็นสารโมเลกุลใหญ่ที่พบในปัสสาวะ ได้แก่ โปรตีน ไขมัน และคาร์โบไฮเดรต [2] ส่วนที่เป็นแร่ธาตุเกิดจากการตกผลึกของของเสียที่เป็นสารก่อนิ่วในปัสสาวะ ได้แก่ แคลเซียมออกซาเลต ฟอสเฟต และกรดยูริก การทราบองค์ประกอบของนิ่วจำเป็นมากต่อการรักษา เนื่องจากนิ่วแต่ละชนิดมีกลไกการเกิดและอัตราการเพิ่มปริมาณที่แตกต่างกัน ซึ่งนิ่วในทางเดินปัสสาวะแบ่งออกเป็น 5 ประเภทตามองค์ประกอบทางเคมี ได้แก่

นิ่วแคลเซียมออกซาเลต (calcium oxalate) เป็นนิ่วที่พบมากที่สุดในประเทศไทย โดยพบมากถึงร้อยละ 75-80 นิ่วแคลเซียมออกซาเลตเกิดจากการรวมตัวของแคลเซียมกับกรดออกซาลิก (oxalic acid) นอกจากนั้นยังพบว่ายังมีการรวมตัวกับ สารตัวอื่นอีก เช่น ฟอสเฟส (phosphate) แมกนีเซียม (magnesium) หรือโปแตสเซียม (potassium) ทำให้นิ่วที่มีแคลเซียมเป็นองค์ประกอบหลักมีจำนวนมากที่สุด [2-3] โดยสามารถ แบ่งออกตามสารผสมได้เป็น 5 ประเภทย่อย ได้แก่ นิ่วแคลเซียมออกซาเล ตโมโนไฮเดรต (calcium oxalate monohydrate, whewellite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $Ca_2C_2O_4*H_2O$, นิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรต (calcium oxalate dihydrate, weddelite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $CaC_2O_4*2H_2O$, นิ่วแคลเซียมฟอสเฟต (calcium phosphate, carbonate apatite)มีโครงสร้างทางเคมีคือ $Ca_{10}(PO_4)(CO_3OH)_6(OH)_2$, นิ่วบรูไชต์ (brushite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $CaHPO_4*2H_2O$ และนิ่ววิทล็อกไคต์ (whitlockite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $Ca_3(PO_4)_2$

ส่วนนิ่วชนิดอื่นๆ ได้แก่ นิ่วยูริกมีโครงสร้างทางเคมีคือ $C_5H_4N_4O_3$ พบได้ร้อยละ 6 ซึ่งเกิดจากการรับประทานอาหารที่มีพิวรีน (purine) สูง ซึ่งสารชนิดนี้จะพบมากในสัตว์ปีก นิ่วสตูไวท์หรือนิ่วแมกนีเซียม แอมโมเนียมฟอสเฟตมีโครงสร้างทางเคมีคือ $MgNH_4PO_4*6H_2O$ พบได้มากถึงร้อยละ 15 ส่วนใหญ่เกิดในผู้ป่วยทางเดินปัสสาวะอักเสบเรื้อรัง นิ่วซิสทีนเกิดจากความผิดปกติของ

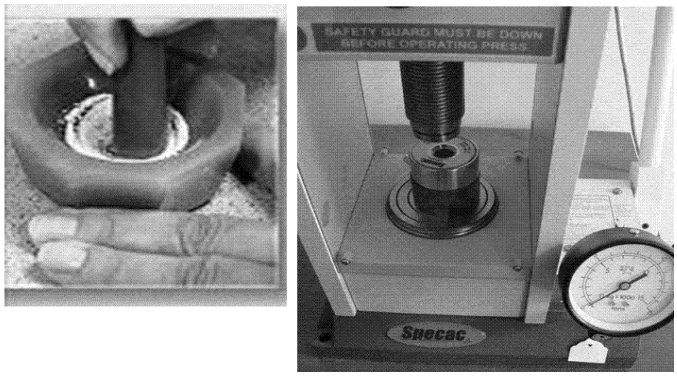
การดูดซึมสาร ซิสทีน [2] มีโครงสร้าง ทางเคมีคือ $C_6H_{12}N_2O_4S_2$ นิ่วตัวสุดท้ายคือนิ่วแซนทีน (xanthine) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $C_5H_4N_4O_2$ ในปัจจุบันมีการวิเคราะห์นิ่วในทางเดินปัสสาวะอยู่หลายวิธีการ แต่วิธีการที่น่าเชื่อถือและได้รับความนิยมมากที่สุดคือวิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี

2.2 เทคนิคการวิเคราะห์องค์ประกอบของนิ่วในปัจจุบัน

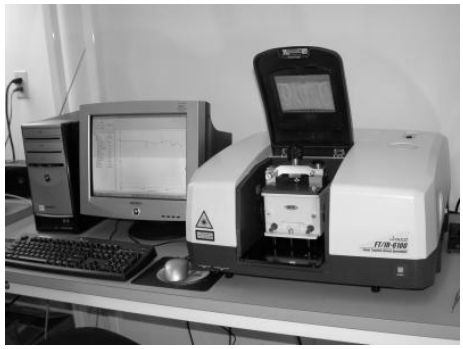
วิธีการวิเคราะห์นิ่วที่ได้รับการยอมรับ และใช้กันอย่างแพร่หลายในปัจจุบันมี 2 วิธี คือ เทคนิคเอกซ์เรย์ดิฟแฟรกชัน (X-ray diffraction) และเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (infrared spectroscopy) ซึ่งพบว่าเทคนิคเอกซ์เรย์ดิฟแฟรกชันนั้นเหมาะสำหรับการวิเคราะห์สารที่เป็น ผลึก และต้องใช้สารเฉพาะสำหรับการตรวจสอบนิ่วแต่ละชนิด ดังนั้นเทคนิคอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีจึงได้รับความนิยมกว่า วิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปีถูก ใช้เพื่อระบุความเป็นเอกลั กษณ์ของสารอินทรีย์ หาสูตรโครงสร้าง หรือหาปริมาณของสาร เนื่องจากโมเลกุลของสารแต่ละชนิด จะดูดกลืนแสงที่ความถี่มีค่าเฉพาะแตกต่างกันไป [7] จนทำให้เกิดการสั่น (vibration) ของพันธะ แถบการดูดกลืนจะถูกบันทึกไว้เป็นสเปกตรัมการดูดกลืนของ สาร สารที่มีองค์ประกอบทา งเคมีของโมเลกุลเหมือนกั นจะมีลักษณ ะสเปกตรัมแบบเดียวกัน โมเลกุลสารอินทรีย์โดยทั่วไปจะมีอินฟราเรดสเปกตรัมที่ค่อนข้างซับซ้อน และยากต่อการแปลความหมาย บางครั้งสารที่มีกลุ่มอะตอม (หมู่ฟังก์ชัน) เดียวกัน ก็ให้แถบดูดกลืน (absorption band) ที่เลขคลื่นเดียวกัน หรือใกล้เคียงกันมาก เพราะโดนหมู่ฟังก์ชันบางตัวบดบังแถบดูดกลืน ดังนั้นการแปลผลจากอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี และระบุหมู่ฟังก์ชันของอินฟราเรดสเปกตรัมที่บันทึกได้ต้องอาศัยผู้เชี่ยวชาญในวิเคราะห์และทำการแปรผล

2.3 ขั้นตอนการวิเคราะห์นิ่วโดยวิธีอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี [3]

การวิเคราะห์วิธี นี้ จะใช้เทคนิคบดผสมก้อนนิ่วตัวอย่างกับโพแทสเซียมโบรไมด์ (KBr pellet) โดยใช้สารตัวอย่างที่ต้องการวิเคราะห์ 2.0 มิลลิกรัม ผสมกับ KBr 100 – 200 มิลลิกรัมในโกร่งอะเกต และบดให้ละเอียดเป็นเนื้อเดียวกัน นำไปใส่ในเครื่องอัด (KBr die) ดังแสดงในภาพประกอบ 2-2 จากนั้นนำไปเข้าเครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี ดังภาพประกอบ 2-3 เพื่ออ่านค่าสเปกตรัม (infrared spectrum)



ภาพประกอบ 2-2 เทคนิคบดผสมก้อนนิ่วตัวอย่างกับโพแทสเซียมโบรไมด์ [21]



ภาพประกอบ 2-3 เครื่องอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี [22]

2.4 อินฟราเรดสเปกโทรสโกปี (infrared spectroscopy)

2.4.1 แสงอินฟราเรด (infrared radiation) [7]

คลื่นรังสีแม่เหล็กไฟฟ้า ที่อยู่ในช่วงที่มองเห็น (visible light) ถูกจำแนกออกตามช่วงตามความถี่ (frequency) ดังตารางที่ 2-1

ตารางที่ 2-1 รังสีแม่เหล็กไฟฟ้าช่วงต่าง ๆ

Type of Radiation	Frequency Range (V : HZ)	Wavelength Range (λ : μm)	Type of Transition
Gamma- rays	$10^{20} - 10^{24}$	<1 pm	Nuclear
X-rays	$10^{17} - 10^{20}$	1nm – 1 pm	Inner electron
Ultraviolet	$10^{15} - 10^{17}$	400 nm -1 nm	Outer electron
Visible	$4 - 7.5x10^{14}$	750 nm – 400 nm	Outer electron
Infrared	$10^{13} - 10^{14}$	25μm -2.5μm	Molecular vibration
Microwave	$3x10^{11} - 10^{13}$	1 mm – 25 μm	Molecular rotation, electron spin flips
Radio Wave	$<3x10^{11}$	>1mm	Nuclear spin flips

อินฟราเรดสเปกโทรสโกปีเป็นเทคนิคที่ใช้แสงอินฟราเรดในการตรวจวิเคราะห์เอกลักษณ์ของสาร จากการดูดกลืนแสงอินฟราเรดในช่วงความถี่ที่มีค่าเฉพาะแตกต่างกันแล้วทำให้เกิดการสั่นของโมเลกุล (vibrations) สเปกตรัมจะแสดงลักษณะเฉพาะของสารแต่ละชนิด โดยช่วงคลื่นของแสงอินฟราเรด ถูกแบ่งออกเป็น 3 ช่วงคลื่น ตามค่าความถี่ คือช่วงสูง, กลาง และต่ำ ดังตารางที่ 2-2

ตารางที่ 2-2 ช่วงคลื่นของอินฟราเรด [7]

Region	Wavelength range (mm)	Wavenumber range (cm^{-1})
Near	0.78 – 2.5	12800 - 4000
Middle	2.5 - 50	4000 - 200
Far	50 -1000	200 - 10

ช่วงคลื่นอินฟราเรดที่นำมาใช้ในการวิเคราะห์คือ อินฟราเรดช่วงกลางซึ่งมีความถี่ตรงกับการสั่นของพันธะโควาเลนซ์ (covalent bond) ในโมเลกุลของสาร สารตัวอย่างจะได้รับพลังงานที่พอเหมาะ พลังงานที่โมเลกุลไดรับเป็นไปตาม กฎของพลังค์ (Planck's equation) [23] ดังสมการ ที่ 2.1

$$E = h\upsilon \tag{2.1}$$

เมื่อ E = ค่าของพลังงาน (J)

h = ค่าคงที่ของพลังค์ (6.626 x 10-34 J-s)

υ = ความถี่มูลฐานของการสั่น

การสั่นของโมเลกุลทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงค่าโมเมนต์ขั้วคู่ (dipole moment) ทำให้โมเลกุลเกิดการดูดกลืนแสงและถูกบันทึกออกมาเป็นอินฟราเรดสเปกตรัม ยิ่งการเคลื่อนไหวของพันธะทำให้เกิด dipole moment มากเท่าใด ลักษณะสเปกตรัมที่ตรวจได้จะยิ่งสูงขึ้นเท่านั้น โดยพันธะแต่ละชนิดจะมีการดูดกลืนแสงที่ความถี่เฉพาะแตกต่างกันไป (quantized energy)

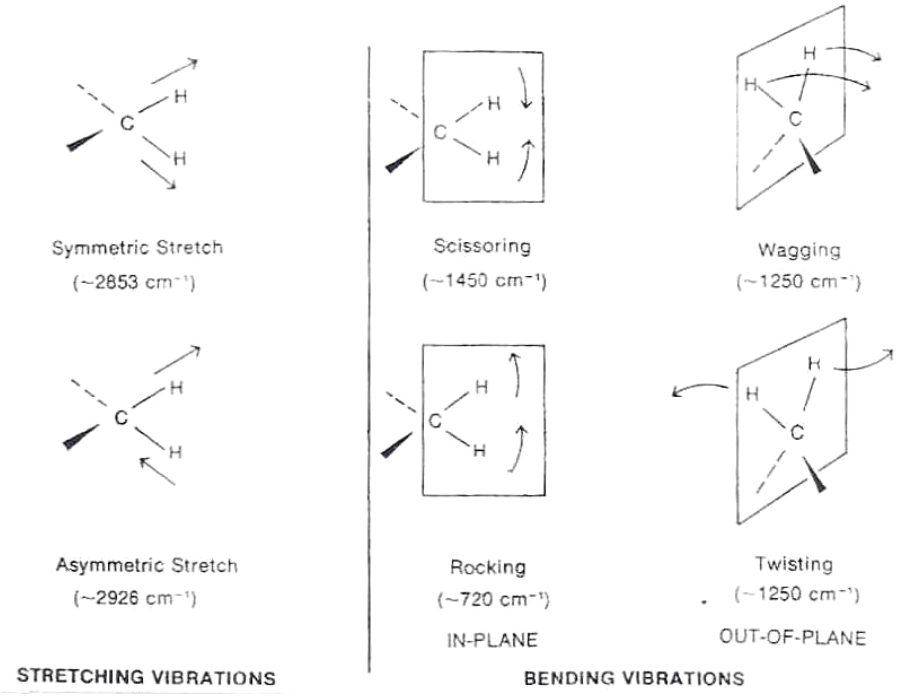
2.4.2 ประเภทของการสั่น

การสั่นแบบพื้นฐาน (fundamental vibration) แบ่งได้เป็น 2 ชนิด คือ

2.4.2.1 การยืด (stretching) เป็นการเปลี่ยนแปลงระยะทางระหว่างอะตอมตามแนวแกนพันธะ แต่มุมของพันธะไม่เปลี่ยนแปลง

2.4.2.2 การงอ (bending) เป็นการสั่นที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของมุมระหว่างอะตอม เช่น การขยับเข้าหากันและแยกกันแบบกรรไกร (scissoring), การเหวี่ยง (rocking), การกระดิก (wagging) และการบิด (twisting)

นอกจากนั้นจะพบการยืดและการงอแบบสมมาตร (symmetric) และแบบอสมมาตร (symmetric) ในกลุ่มอะตอมที่มีอะตอมเหมือนกันอยู่สองอะตอม โดยพลังงานที่ทำให้เกิดการยืดแบบอสมมาตรจะสูงกว่าการยืดแบบสมมาตร ลักษณะการสั่นของโมเลกุลแสดงได้ในภาพประกอบ 2-4



ภาพประกอบ 2-4 การสั่นพื้นฐานรูปแบบต่างๆ [24]

การสั่นของโมเลกุลที่กล่าวมาข้างต้นเรียกว่าการสั่นหลักมูล (fundamental vibration) แต่นอกจากการสั่นแบบหลักมูลแล้ว ยังมีแถบดูดกลืนอื่นๆที่แสดงในอินฟราเรดสเปกตรัม ได้แก่ แถบโอเวอร์โทน (overtone band) แถบรวม (combination band) และเฟอร์มิ แรโซแนนซ์ (Fermi resonance) แถบโอเวอร์โทนจะมีเลขคลื่นเป็น 2, 3, 4... เท่าของการสั่นหลักมูล และบางครั้งมีความเข้มต่ำ เช่นเดียวกับแถบรวมที่มักจะมีความเข้มต่ำเช่นกัน และปรากฏที่เลขคลื่นที่เป็นผลรวมหรือผลต่างของแถบที่เกิดจากการสั่นหลักมูลสองแถบ หรือมากกว่า ถ้าแถบโอเวอร์โทนและแถบรวมเกิดอยู่ใกล้ๆกับแถบการสั่นหลักมูล จะทำให้ความเข้มของแถบหลักมูลลดลง แต่จะเพิ่มค่าความเข้มของแถบโอเวอร์โทน และแถบรวมแทน หรือเกิดการแตกแถบดูดกลืนออกเป็นสองแถบ เรียกปรากฏการณ์นี้ว่าเฟอร์มิ แรโซแนนซ์ [7]

2.4.3 อินฟราเรดสเปกตรัม (IR spectrum)

อินฟราเรดสเปกตรัมเป็นกราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างเลขคลื่น และความเข้มในการดูดกลืน ซึ่งแสดงอยู่ในรูปทรานส์มิทแทนซ์ (transmittance, T) หรือแอบซอร์แบนซ์ (absorbance, A) [7] ดังแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-5 โดยที่ทั้งสองค่าสัมพันธ์กับความเข้มของรังสีอินฟราเรดดังสมการที่ 2.2 ซึ่งเป็นไปตามกฎของ Lambert-Beer

$$T = \frac{I}{I_0} \tag{2.2}$$

เมื่อ I = ความเข้มของรังสีที่ผ่านออกจากตัวอย่างที่ทดสอบ

I_0 = ความเข้มของรังสีที่ตกกระทบตัวอย่างที่ทดสอบ

จากสมการ T มีค่าเป็นศูนย์ถ้ารังสีทั้งหมดถูกดูดกลืน และมีค่าเป็น 1 หากไม่มีการดูดกลืนรังสี ค่าทรานส์มิทแทนซ์มีความสัมพันธ์กับค่าแอบซอร์แบนซ์ดังสมการที่ 2.3

$$A = log\frac{1}{T} = log\frac{I_0}{I} = \varepsilon cl \qquad (2.3)$$

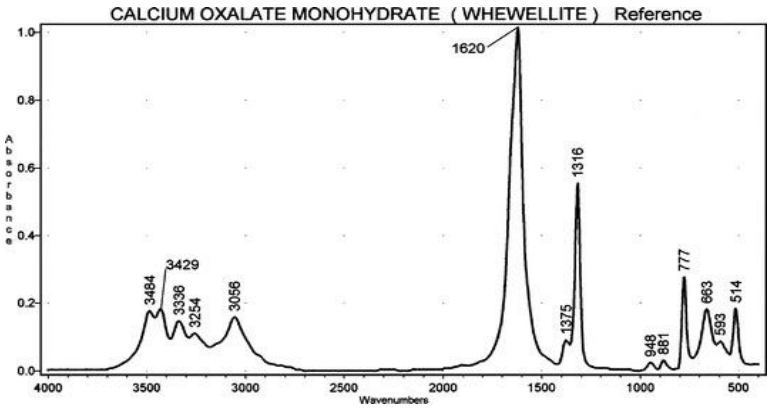
เมื่อ A = แอบซอร์แบนซ์

T = ทรานส์มิทแทนซ์

ε = โมลาร์แอบซอบทิวิตี (molar absorptivity)

c = ปริมาณของสารตัวอย่าง

l = ความหนาของสารตัวอย่าง



ภาพประกอบ 2-5 ลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัมในรูปแบบการดูดกลืนแสง (Absorbance) [25]

จากลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัม สามารถแปลผลจาก ย่านรังสีอินฟราเรดที่ใช้การหาโครงสร้างองค์ของสารแบ่งออกเป็น 3 บริเวณดังนี้

2.4.3.1 ย่านหมู่ฟังก์ชัน (functional group region) เป็นช่วงรังสีที่มีเลขคลื่น 4000 – 1300 cm^{-1} เกิดจากการสั่นของพันธะระหว่างอะตอมสองอะตอม สเปกตรัมในช่วงนี้จะทำให้ทราบชนิดพันธะและอะตอม

- X-H stretching region (4000 – 2500 cm^{-1}) เป็นบริเวณที่เกิดการสั่นแบบ stretching ของพันธะเดี่ยวที่ต่ออยู่กับอะตอมของไฮโดรเจน
- Triple bond region (2500 – 2000 cm^{-1}) เป็นบริเวณที่เกิดการสั่นแบบ stretching ของพันธะสาม เช่น C≡C และ C≡N
- Double bond region (2000 – 1500 cm^{-1}) เป็นบริเวณที่เกิดการสั่นแบบ stretching ของพันธะคู่ เช่น C=C และ C=O

2.4.3.2 ย่านรอยนิ้วมือ (fingerprint region) เป็นช่วงรังสีที่มีเลขคลื่น 1300 – 910 cm^{-1} เกิดจากการสั่นแบบยืดละแบบงอของพันธะ C-C, C-O และ C-N เนื่องจากโมเลกุลมีการสั่นแบบงอมากกว่าแบบยืด ส เปกตรัมจึงมีลักษณะซับซ้อนป ระกอบด้วยแถบจำนวนมาก และหัวไหล่ (shoulders) ซึ่งเป็นแถบขนาดเล็กที่ยื่นออกมาจากแถบขนาดใหญ่ สารบางชนิดอาจมีลักษณะในย่านหมู่ฟังก์ชันคล้ายกัน แต่สามารถระบุความแตกต่างได้จากย่านรอยนิ้วมือ

2.4.3.3 ย่านอะโรแมติก (aromatic region) เป็นช่วงที่มีเลขคลื่น 910 – 650 cm^{-1} สารประกอบอะโรแมติกและเฮเทอโรอะโรแมติกแสดงแถบการงอนอกระนาบของพันธะ C-H ซึ่งมีความสัมพันธ์กับแบบอย่างการแทนที่ (substitution pattern) บนวงแหวนได้

2.4.4 ตำแหน่งของแถบดูดกลืน

ตำแหน่งของแถบดูดกลืนจะปรากฏในรูปของเลขคลื่น (wavenumber (υ), cm^{-1}) หรือความยาวคลื่น (wavelength (λ), μm) โดยเลขคลื่นเป็นสัดส่วนผกผันกับความยาวคลื่น แต่เป็นสัดส่วนโดยตรงกับความถี่ ดังแสดงในสมการที่ 2.4 ดังต่อไปนี้

$$\upsilon = \frac{1}{\lambda} = \frac{f}{c} \tag{2.4}$$

เมื่อ c = ความเร็วของแสง (cm/s)

λ = ความยาวคลื่นของแสง (cm)

f = ความถี่ของแสง (Hz)

ในอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วมักนิยมใช้หน่วยเลขคลื่นมากกว่าหน่วยความยาวคลื่น และเนื่องจากเลขคลื่นเป็นสัดส่วนโดยตรงกับความถี่ จึงมักเรียกเลขคลื่นเป็นความถี่ ตำแหน่งแถบดูดกลืนสามารถคำนวณได้โดยใช้กฎของฮุก (Hooke's Law) อะตอมสองอะตอมและพันธะซึ่งต่อระหว่างอะตอมทั้งสองเหมือนกับฮาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์เชิงเดี่ยว (simple harmonic oscillator) ที่ประกอบด้วยมวลสองชนิดที่ยึดกันด้วยสปริง สมการที่ 2.5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างเลขคลื่นของการยืด (stretching frequency) มวลอะตอม และค่าคงตัวของแรง (force constant) ของพันธะ มีดังต่อไปนี้

$$\upsilon = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2} \quad (2.5)$$

เมื่อ υ = เลขคลื่นของการสั่น (cm^{-1})

c = ความเร็วของแสง (cm/s)

k = ค่าคงตัวของแรงของพันธะ (ไดน์/cm)

μ = reduced mass = $(m_A m_B)/(m_A + m_B)$

m_A และ m_B คือมวลอะตอมของอะตอม A และ B ตามลำดับ

ค่าคงตัวของแรงมีค่าประมาณ 5x105 ไดน์/ซม. สำหรับพันธะเดี่ยว และเพิ่มเป็น 2 และ 3 เท่าสำหรับพันธะคู่และพันธะสามตามลำดับ จากข้างต้นจะเห็นว่าแต่ละตำแหน่งการดูดกลืนของสเปกตรัม จะเป็นไปตามคุณลักษณะเฉพาะของโมเลกุลที่เป็นองค์ประกอบ ทั้งมวลอะตอม หมู่ฟังก์ชัน หรือแม้แต่ลักษณะการจัดเรียงตัวของโมเลกุล

2.5 การแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัม

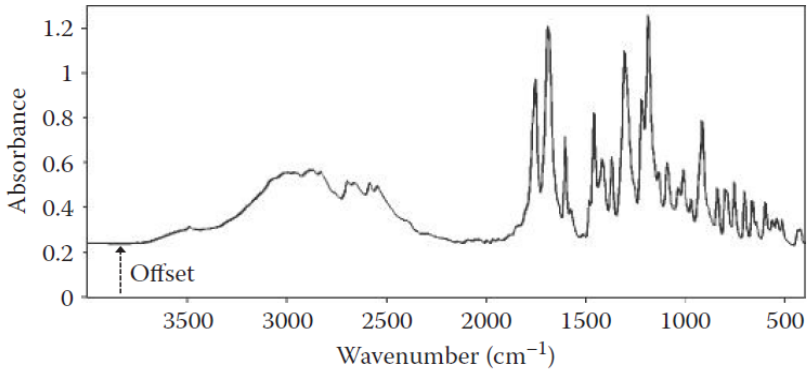
2.5.1 ระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัม (spectrum manipulation)

ระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัมคือ ขั้นตอนการปรับคุณลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมให้สามารถนำไปวิเคราะห์ และแปลผลได้ อินฟราเรดสเปกตรัมแต่ละสเปกตรัมอาจเกิดความผิดเพี้ยนอันเนื่องมาจากเครื่องอินฟราเรดสเปกตรัม จากตัวอย่างที่ใช้ในการการทดลอง หรือจากอุณหภูมิโดยรอบขณะทำการทดลอง ทุกตัวแปรมีผลต่อลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมทั้งหมด การจะแปลผลเพื่อหาอัตลักษณ์ หรือเปรียบเทียบ สารแต่ละชนิด จึงต้องมีขั้นตอนการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัม ซึ่งประกอบไปด้วยขั้นตอนดังต่อไปนี้

2.5.1.1 การปรับเส้นพื้นฐาน bBaseline correction) [25-26]

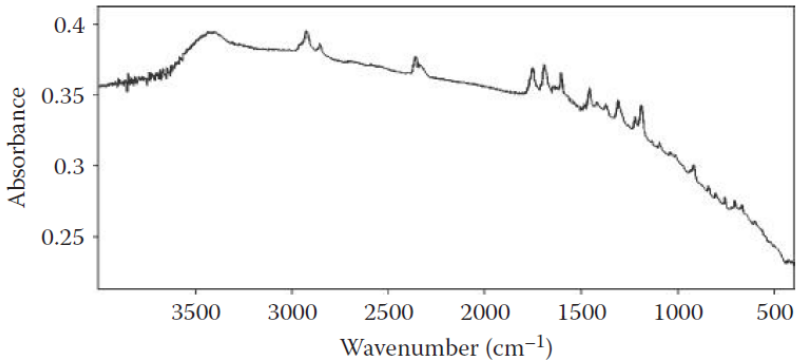
ตำแหน่งเส้นพื้นฐาน (baseline) ในอุดมคติของอินฟราเรดสเปกตรัมในรูปการดูดกลืนแสงควรวางอยู่บนเส้นศูนย์ของค่าความเข้มข้นที่วัดได้ หรือในกรณีสเปกตรัม ของการสะท้อนแสง ตำแหน่งเส้นพื้นฐานจะอยู่ที่ค่าความเข้มข้นเท่ากับ 100% แต่ปัญหาที่พบได้บ่อยในอินฟราเรดสเปกตรัมคือการเกิดความผันผวนของเส้นพื้นฐาน ดังนั้นในขั้นตอนนี้จึงเป็นการกำจัดส่วนนี้ของสเปกตรัมออกไป ซึ่งเป็นส่วนขององค์ประกอบความถี่ต่ำ ความผิดเพี้ยนของเส้นพื้นฐานของสเปกตรัม เกิดขึ้นได้ 3 กรณี ได้แก่

- กรณีที่ 1 เส้นพื้นฐานถูก offset ขึ้นมาจากเส้นศูนย์ (offset baseline) ซึ่งการ offset แบบนี้เท่ากับว่ามีการบวกค่าคงที่ค่าหนึ่งเข้าไปในสเปกตรัม ดังแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-6 ค่า offset เกิดขึ้นได้โดยหลายกรณีได้แก่ ความหนาของตัวอย่างทดลอง การสะท้อน (reflected) และการดูดกลืน (absorbed) ของลำแสงอินฟราเรดที่ทุกตำแหน่งเลขคลื่น ปัญหานี้แก้ไขได้โดยการทำให้ตัวอย่างสารทดลองมีขนาดบางลง ในกรณีที่ยังทำการทดลอง แต่ในกรณีของการวิเคราะห์จากอินฟราเรดสเปกตรัมจะใช้วิธีการลบค่าคงที่ที่เป็นค่า offset ออก



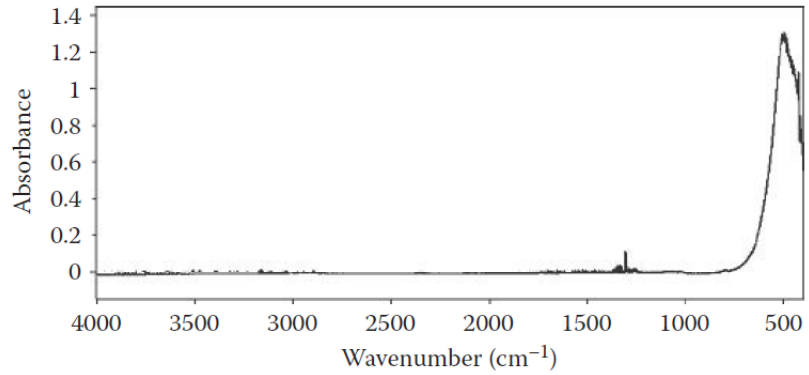
ภาพประกอบ 2-6 เส้นพื้นฐานถูก offset ขึ้นมาจากเส้นศูนย์ [25]

- กรณีที่ 2 เส้นพื้นฐาน มีค่าความชัน (slope baseline) ดังภาพประกอบ 2-7 ซึ่งเกิดจากการกระจาย (scattered) ของแสงจากลำแสงอินฟราเรด (infrared beam) สามารถแก้ไขปัญหานี้โดยทำ KBr pellet ขึ้นมาใหม่ หรือในกรณีที่มีสาเหตุมาจาก sloped baseline drift ของเครื่องมือ อาจเนื่องมาจากความแปรปรวนของอุณหภูมิภายในเครื่องมือและความผันผวนของกำลังไฟฟ้า แก้ไขโดยการปรับค่าพื้นหลังของเครื่องใหม่ (running a fresh background)



ภาพประกอบ 2-7 เส้นพื้นฐานมีค่าความชัน [25]

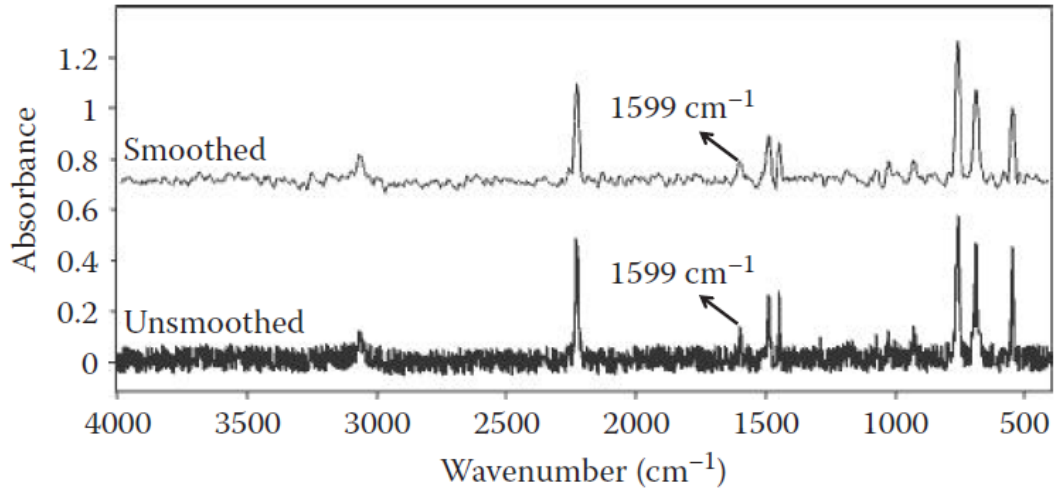
- กรณีที่ 3 การเกิดเส้นพื้นฐาน โค้ง (curvature) ในเพียงบางตำแหน่งเลขคลื่น ดังแสดงในภาพประกอบ 2-8 ซึ่งกรณีนี้มักเกิดจากตัวเครื่องอินฟราเรด



ภาพประกอบ 2-8 เส้นพื้นฐานโค้ง [25]

2.5.1.2 การปรับเส้นเรียบ (Smoothing)

การปรับเส้นเรียบจะถูกนำมาใช้ในกรณีที่ค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมมีค่าน้อย ซึ่งแสดงให้เห็นว่าสัญญาณรบกวนที่ปะปนอยู่มีจำนวนมากเกินไป ตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของสาร banzonitrile [25] ดังภาพประกอบ 2-9 จะสังเกตเห็นได้ว่าในภาพบนซึ่งเป็นอินฟราเรดสเปกตรัมที่ผ่านการปรับเส้นเรียบแล้ว จะเห็นตำแหน่งแถบดูดกลืนที่ความถี่ 1599 cm^{-1} ได้ชัดเจนกว่าอินฟราเรดสเปกตรัมภาพล่างซึ่งยังไม่มีการปรับเส้นเรียบแต่อย่างใด



ภาพประกอบ 2-9 การเปรียบเทียบสเปกตรัมของสารที่ผ่านและไม่ผ่านการปรับเส้นเรียบ [25]

การปรับเส้นเรียบ จะกำจัดสัญญาณรบกวนที่เกิดขึ้น โดยจะทำหน้าที่ เป็นตัวกรองสัญญาณความถี่ต่ำ (low-pass filter) ซึ่งจะกรองเอาองค์ประกอบสัญญาณความถี่สูงออกไป ในที่นี้ก็คือสัญญาณรบกวน โดยที่ไม่ทำให้คุณลักษณะสำคัญของสเปกตรัมสูญหายไป [26] เทคนิคที่ใช้ในการปรับเส้นเรียบสำหรับอินฟราเรดสเปกตรัมที่นิยมใช้กันอย่างแพร่หลายได้แก่ ตัวกรองของซาวิสกี้-โกเลย์ (Savitzky-Golay filter) และวิธีการแปลงเวฟเล็ต (wavelet transform)

2.5.1.3 อนุพันธ์สเปกตรัม (spectral derivatives)

อนุพันธ์สเปกตรัมใช้สำหรับ การวิเคราะห์หาตำแหน่งพีค และการกำจัดเส้นพื้นฐานของสเปกตรัม โดยเฉพาะในกรณีที่อินฟราเรดสเปกตรัมมีตำแหน่งของพีคที่ซ้อนทับกัน จากสมการทางคณิตศาสตร์พบว่า เมื่ออินฟราเรดสเปกตรัมผ่านการ ทำอนุพันธ์อันดับหนึ่ง (1^{st} derivative) จะทำให้จุดพีค ของอินฟราเรดสเปกตรัมมี ค่าเท่ากับ 0 วิธีการดังกล่าวเรียกว่า zero-crossing first derivatives ซึ่งสามารถนำไปใช้ในการแปล ผลเชิงปริมาณได้อีกด้วย นอกจากนั้นพบว่า อนุพันธ์อันดับสอง (2^{nd} derivative) และอนุพันธ์อันดับสูงขึ้นไป ก็สามารถนำมาใช้ในการหาตำแหน่งพีคได้เช่นกัน

2.5.1.4 การปรับขนาดสัญญาณบรรทัดฐาน (Normalization)

Normalization คือการปรับรูปแบบสัญญาณให้อยู่ภายในบรรทัดฐานเดียวกัน เพื่อช่วยลดความซ้ำซ้อนของข้อมูล โดยการทำ normalization ในทาง อินฟราเรดสเปกตรัม เป็นไปเพื่อให้ง่ายต่อการเปรียบเทียบลักษณะโครงสร้าง ตำแหน่งการเกิดพีค และขนาดของการดูดกลืน

แสง ซึ่งจะส่งผลต่อการแปลผลอินฟราเรดสเ ปกตรัมในเชิงปริมาณด้วย การปรับขนาดของอินฟราเรดสเปกตรัมโดยมากจะถูกปรับให้อยู่ในช่วง 0-1 absorbance unit

2.5.2 เทคนิคที่ใช้ในการแปลผล

2.5.2.1 การแปลงเวฟเล็ต (wavelet transform)

การแปลงเวฟเล็ตเหมาะสำหรับข้อมูลที่มีความซับซ้อน มีจำนวนมาก และมีส่วนที่เกิดการซ้อนทับกันของข้อมูล โดยมีพื้นฐานมาจากการแปลงฟูเรียร์ การแปลงเวฟเล็ตของสัญญาณจะอยู่ในรูปของการรวมสัญญาณองค์ประกอบความถี่ต่ำ (approximated version) และองค์ประกอบความถี่สูง (detailed version) ในระดับต่างๆ โดยจะมีค่าสัมประสิทธิ์เวฟเล็ตเป็นค่า น้ำหนักขององค์ประกอบความถี่แต่ละระดับ การวิเคราะห์สัญญาณโดยใช้การแปลงเวฟเล็ตจะนำสัญญาณเวฟเล็ตที่มีโครงสร้างแบบเดียวกันมาใช้สำหรับการอธิบาย ฟังก์ชันที่เป็นฟังก์ชันต้นกำเนิดเรียกว่าเวฟเล็ตแม่ (mother wavelet) โดยที่เวฟเล็ตแต่ละอันในกลุ่มจะเกิดจากการปรับสเกล (scale ; a) เป็นค่าที่แสดงถึงการยืดหดของเวฟเล็ตแม่ ส่วนการเลื่อนตำแหน่ง (translation or shifting ; b) จะเป็นการแสดงตำแหน่งบนแกนเวลา [27] เขียนสมการของเวฟเล็ตได้ดังสมการที่ 2.6

$$\Psi_{a,b}(t) = \frac{1}{\sqrt{a}}\Psi(\frac{t-b}{a}) \tag{2.6}$$

เมื่อ $\Psi(t)$ = ฟังก์ชันของเวฟเล็ตแม่ที่มีการปรับสเกล

a = พารามิเตอร์ของการปรับสเกล (Scaling)

b = พารามิเตอร์ของการเลื่อนตำแหน่ง (Shifting)

รูปแบบการแปลงเวฟเล็ตแบ่งได้เป็นสองแบบ คือ การแปลงเวฟเล็ตแบบต่อเนื่อง (continuous wavelet transform) และการแปลงเวฟเล็ตแบบเต็มหน่วย (discrete wavelet transform) ซึ่งการแปลงเวฟเล็ตแบบเต็มหน่วยจะมีความแม่นยำทางด้านเวลาและความถี่ แต่กระบวนการต้องใช้เวลาในการวิเคราะห์มาก และข้อมูลที่ได้มีความซับซ้อนเกินความจำเป็น จากส่วนนี้การแปลงเวฟเล็ตแบบเต็มหน่วยจึงถูกพัฒนาขึ้น การแปลงเวฟเล็ตแบบเต็มหน่วยคือการปรับสเกลและเลื่อนตำแหน่งของช่วงแบบไม่ต่อเนื่องกัน

ในการศึกษาองค์ประกอบทางเคมี มีการใช้การแปลงเวฟเล็ตสำหรับการระบุลักษณ ะสำคัญของสารประกอบ เนื่องจากสามารถแทนที่โดเมนเวลาด้วยโดเมนอื่นๆ เช่น ความยาวคลื่น (wavelength) ดังนั้นจึงมีการศึกษาใช้การแปลงเวฟเล็ตสำหรับอินฟราเรดสเปกโทรสโกปี เพื่อระบุตำแหน่งและลักษณะของแถบดูดกลืนของหมู่ฟังก์ชันต่างๆ จากลักษณะสเปกตรัม โดยจากการศึกษาของ Bos และ Vrielink [28] พบว่าการแปลงเวฟเล็ตโดยใช้คลื่นเวฟเล็ตแบบ Daubechies wavelet functions จะให้ผลที่มีประสิทธิภาพสูงสุด เนื่องจากลักษณะของคลื่นเวฟเล็ตแบบ Daubechies จะมีลักษณะโครงสร้างคล้ายกับลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัมมากที่สุด

2.5.2.2 วิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด

การวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด (multiresolution analysis) เป็นอีกหนึ่งวิธีการที่ใช้รูปแบบการวิเคราะห์ความถี่ โดย จะแบ่ง ลักษณะสัญญาณออกเป็น 2 องค์ประกอบ ได้แก่สัญญาณองค์ประกอบความถี่สูง เรียกว่า “detail, D” และสัญญาณองค์ประกอบต่ำ เรียกว่า “approximation, A” ซึ่งเป็นการนำสัญญาณที่ได้จากการปรับสเกล a ซึ่งมี b หลายๆ ตำแหน่งมารวมกัน เกิดเป็นสัญญาณระดับความ ละเอียดที่เลือกไว้ และเมื่อนำสัญญาณทั้งหมดมารวมกันแล้วจะทำให้ได้สัญญาณต้นแบบดั้งเดิมคืนมา [29-30]

2.5.2.3 ตัวกรองของซาวิสกี้-โกเลย์ (Savitzky-Golay filter) [31]

ตัวกรองของซาวิสกี้- โกเลย์เป็นเครื่อง มือที่มีประสิทธิภาพในการ กำจัดสัญญาณรบกวนอีกวิธีหนึ่ง โดยมีพื้นฐานมีจากระเบียบวิธีกำลังสองน้อยสุด (least square method) และมีขั้นตอนในการทำงานคล้ายคลึงกับตัวกรองเฉลี่ยเคลื่อนที่ซึ่งเป็นการคำนวณหาค่าเฉลี่ยจากผลรวมของทุกตำแหน่งที่อยู่ในช่วงหน้าต่างที่พิจารณา แล้วแทนที่ด้วยค่าเพียงค่าเดียว ทำให้วิธีตัวกรองเฉลี่ยมีแนวโน้มในการกรองเอาส่วนที่เป็นคุณลักษณะสำคัญของข้อมูลออกไป ตัวกร องของซาวิสกี้- โกเลย์ถูกเรียกอีกอย่างว่า หน้าต่างตัวกรองเฉลี่ยเคลื่อนที่ (moving window averaging) [32] โดยตำแหน่งการพิจารณา (i) จะมีค่าที่ตำแหน่งการพิจารณาเท่ากับ $f_i \equiv f(t_i)$ เมื่อ $t_i = t_0 + \Delta i$ โดยที่ i = …-2, -1, 0, 1, 2,… ดังนั้นสมการที่ได้จาก ตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์สามารถคำนวณได้จากสมการที่ 2.7

$$g_i = \sum_{n=-n_L}^{n_R} c_n f_{i+n} \quad (2.7)$$

เมื่อ i = ตำแหน่งเลขคลื่นที่ต้องการพิจารณา

g_i = ค่าแทนที่ตำแหน่งพิจารณาจากการคำนวณโดยวิธีการซาวิสกี้-โกเลย์

n_{L} = จำนวนตำแหน่งถัดไปทางซ้ายจากตำแหน่งที่พิจารณา

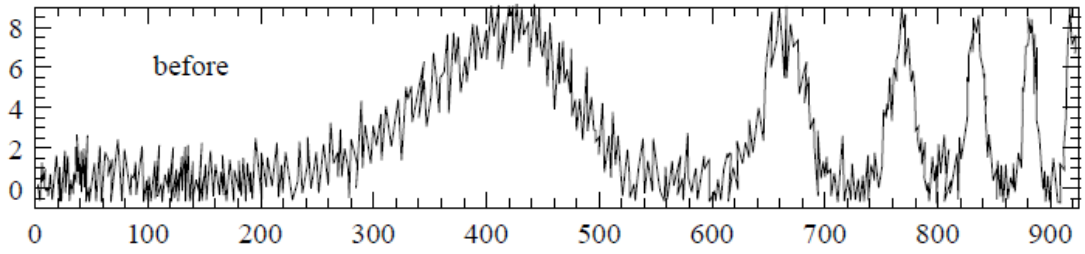
n_R = จำนวนตำแหน่งถัดไปทางขวาจากตำแหน่งที่พิจารณา

f_{i+n} = พารามิเตอร์ของการเลื่อนตำแหน่ง (Shifting)

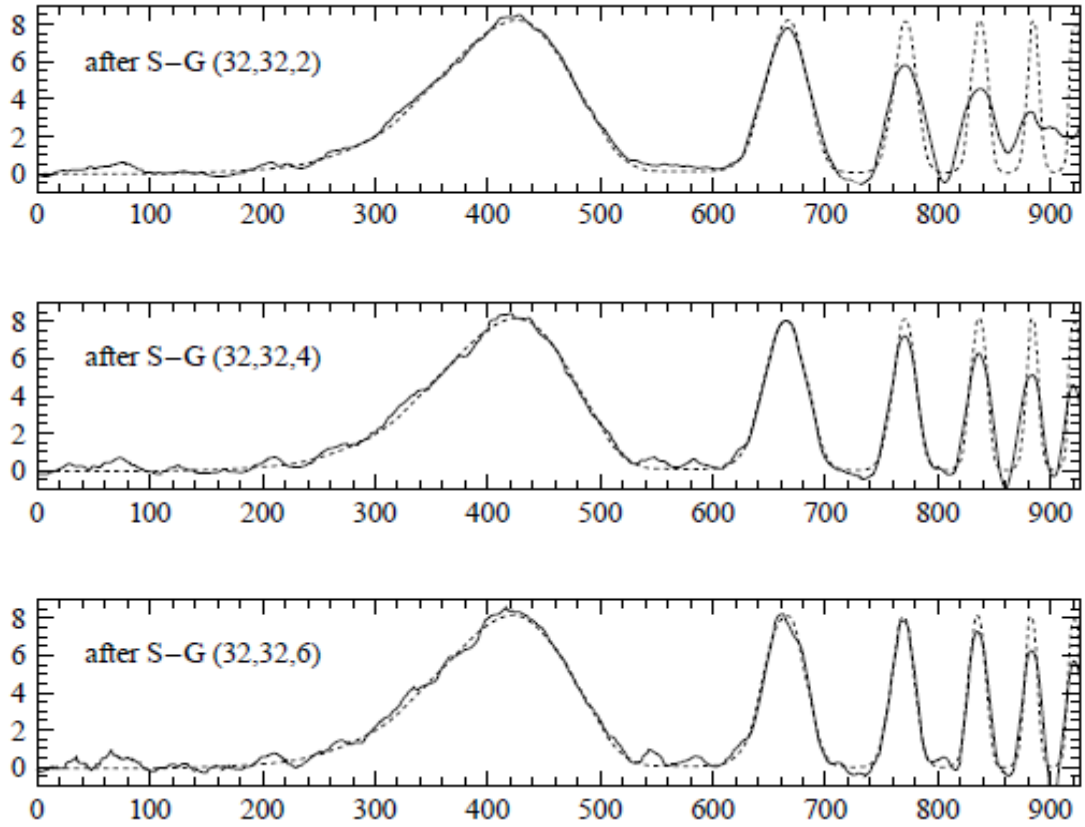
c_n = ค่าคงที่ $(c_n = 1/(n_L + n_R + 1))$

นอกจากนั้นวิธีการของตัวกรองของซาวิสกี้- โกเลย์จำเป็นต้องกำหนด อันดับของ พหุนาม (polynomial order) ในแต่ละช่วงหน้าต่างที่ใช้วิเคราะห์ ซึ่งค่าพหุนามนี้จะใช้สำหรับการปรับเส้นเรียบของสเปกตรัม และมีการกำหนดขนาดหน้าต่างของการวิเคราะห์ (window size) อีกด้วย ถ้าขนาดของหน้าต่างที่ใช้วิเคราะห์ยิ่งกว้าง และอันดับพหุนามต่ำมากเท่าไหร่ ระดับความเรียบของข้อมูลจะยิ่งมากขึ้น ดังแสดงในภาพประกอบ 2-10

(a)



(b)



ภาพประกอบ 2-10 (a) ลักษณะสัญญาณก่อนผ่านตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ (b) ลักษณะสัญญาณหลังผ่านตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ ที่มีจำนวนตำแหน่งในการพิจารณาเท่ากับ 65 ตำแหน่ง และมีอันดับของพหุนาม 2, 4 และ 6 ตามลำดับ [31]

จากภาพประกอบ 2-10 พบว่ายิ่งอันดับของพหุนามมาก การลดทอนสัญญาณก็จะเกิดขึ้นน้อย แต่ประสิทธิภาพในการปรับเส้นเรียบของสัญญาณก็มีน้อยลงเช่นกัน

2.5.2.4 การหาอนุพันธ์ (derivative)

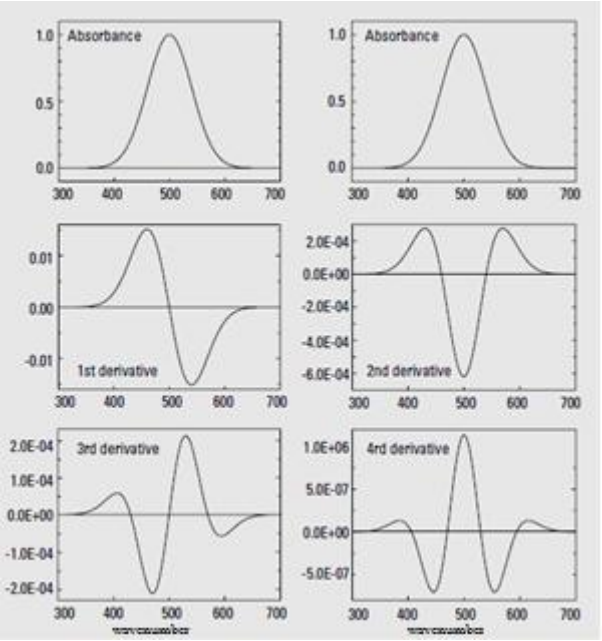
สมการในการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งของสเปกตรัมเป็นอัตราการเปลี่ยนแปลงของค่าการดูดกลืนแสง (absorbance) เทียบกับการเปลี่ยนแปลงของความยาวคลื่น (wavelength) [33] ซึ่งเป็นไปตามสมการที่ 2.8

$$\frac{dA}{d\upsilon} = \frac{(A_{\upsilon+\Delta\upsilon} - A_{\upsilon})}{\Delta\upsilon} \tag{2.8}$$

เมื่อ A = Absorbance

υ = wavenumber (cm^{-1})

จากสมการ ที่ 2.8 จะพบว่าค่า คงที่ต่างๆในสเปกตรัม นั้น เมื่อผ่านการทำอนุพันธ์แล้วจะให้ค่าเท่ากับ 0 ซึ่งเป็นไปตามสมการทางคณิตศาสตร์ ดังนั้นการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งจึงมีประสิทธิภาพในการกำจัดออฟเซต นอกจากนั้นจากการศึกษาบทความวิจัยที่ผ่านมาพบว่ามีการใช้การหาความสัมพันธ์แบบเส้นตรงจากอนุพันธ์อันดับหนึ่งสำหรับการวิเคราะห์ผลเชิงปริมาณสำหรับสารผสม [17], [19] นอกจากนั้น อนุพันธ์อันดับสอง มีประสิทธิภาพมากในการ จำแนกตำแหน่งแถบดูดกลืนแสงที่เกิดการซ้อนทับกัน (overlapped peaks) [4-5], [33] ซึ่งจะถูกนำไปใช้ในขั้นตอน การวิเคราะห์เชิงคุณภาพ ลักษณะของสเปกตรัมที่ผ่านอนุพันธ์อันดับต่างๆ แสดงดังภาพประกอบ 2-11 หลังจากสเปกตรัมผ่านการแปลงอนุพันธ์อันดับหนึ่งเรียบร้อยแล้ว ตำแหน่งแถบดูดกลืนของสเปกตรัมตั้งต้นจะตัดผ่านศูนย์บนเส้นของความยาวคลื่น และจะปรากฏตำแหน่ง แถบดูดกลืนใหม่ทั้งด้านแกนบวกและลบของแกนความยาวคลื่น ซึ่งตำแหน่งแถบดูดกลืน ใหม่ที่เกิดขึ้นเดิมก็คือตำแหน่งที่มีค่าความชันน้อยที่สุดของสเปกตรัมเดิมนั่นเอง



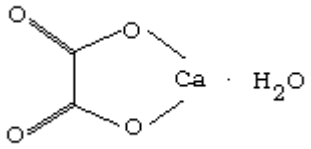
ภาพประกอบ 2-11 ลักษณะสเปกตรัมหลังการแปลงอนุพันธ์อันดับต่างๆ [33]

2.5.3 การแปลผลเชิงคุณภาพ

การประเมินผลเชิงคุณภาพเป็นการแปลความหมายของอินฟราเรดสเปกตรัม ในรูปของการระบุตำแหน่ง พีคสำคัญของนิ่วชนิดต่างๆ ปัญหาที่พบในการแปลผลเชิงคุณภาพคือ อินฟราเรดสเปกตรัมมี ตำแหน่งพีค ซ้อนทับกันซึ่งมักจะเกิดในสเปกตรัมของนิ่วชนิดผสม ซึ่งนิ่วชนิดผสมอาจเกิดขึ้นจากนิ่วสองชนิดหรือมากกว่านั้น และไม่ว่าจะประกอบด้วยนิ่วกี่ชนิด ตำแหน่งพีคสำคัญ ของนิ่วแต่ละชนิดจะ แสดงให้เห็น ในอินฟราเรดสเ ปกตรัม โดยนิ่วแต่ละชนิดก็จะมีตำแหน่งพีคที่แตกต่างกันออกไปตามหมู่ฟังก์ชันที่เป็นองค์ประกอบดังนี้ [34]

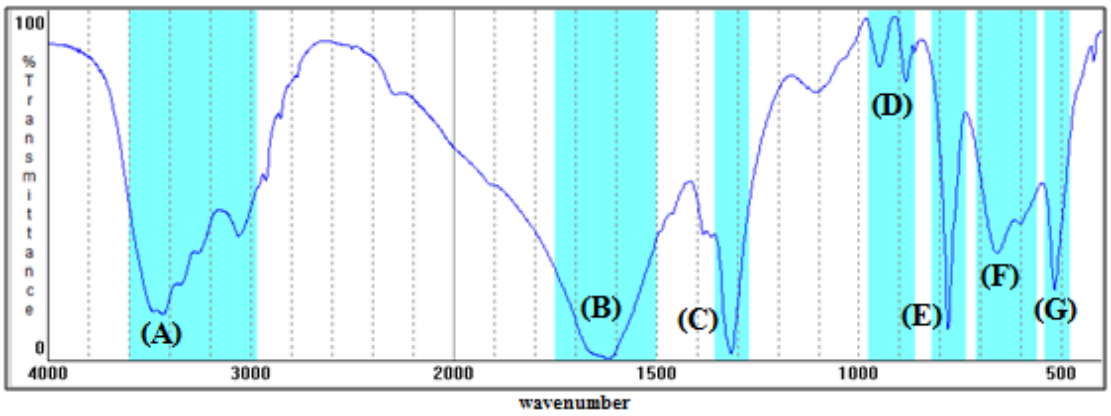
2.5.3.1 นิ่วที่มีแคลเซียมเป็นองค์ประกอบหลัก (calcium stone)

2.5.3.1.1 นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต (calcium oxalate monohydrate, Whewellite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $Ca_2C_2O_4*H_2O$ ดังภาพประกอบ 2-12



ภาพประกอบ 2-12 โครงสร้างทางเคมีของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต โมโนไฮเดรต

จากโครงสร้างของโมเลกุลพบว่าประกอบด้วยพันธะของ C-C หนึ่งตำแหน่ง พันธะ C=O สองตำแหน่ง ในส่วนของโมเลกุลของน้ำก็ประกอบด้วยพันธะ OH สองตำแหน่ง จากพันธะที่กล่าวมาข้างต้นนั้น จะได้ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมดังภาพประกอบ 2-13



ภาพประกอบ 2-13 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต โมโนไฮเดรต

จากภาพประกอบ 2-13 ตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตมีดังนี้

(A) ที่ความถี่ 3477 – 3059 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ O-H ของโมเลกุลของน้ำ

(B) ที่ความถี่ 1620 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นแบบสมมาตรของพันธะ C=O ซึ่งจะมีไหล่ของพีคที่ความถี่ 1646 cm^{-1} แสดงอยู่ด้วย

(C) ที่ความถี่ 1315 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นแบบสมมาตรของพันธะ C=O ซึ่งเป็นตำแหน่งพีค สำคัญที่จะบ่งบอกว่ามีนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตประกอบอยู่ด้วย ในนิ่วชนิดที่เป็นนิ่วผสม

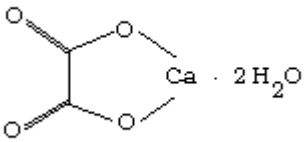
(D) ที่ความถี่ 886 และ 950 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นตามแบบแผนของพันธะ O-H

(E) ที่ความถี่ 780 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ C=O ที่มีความผิดปกติของการจัดเรียงอะตอม ตำแหน่งพีค นี้เป็นตำแหน่งพีค ที่บอกความแตกต่างระหว่างนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต

(F) พีคที่ความถี่ 597 และ 660 cm^{-1}แสดงตำแหน่งพีค ที่เกิดจากการสั่นตามแบบแผนของพันธะ OH

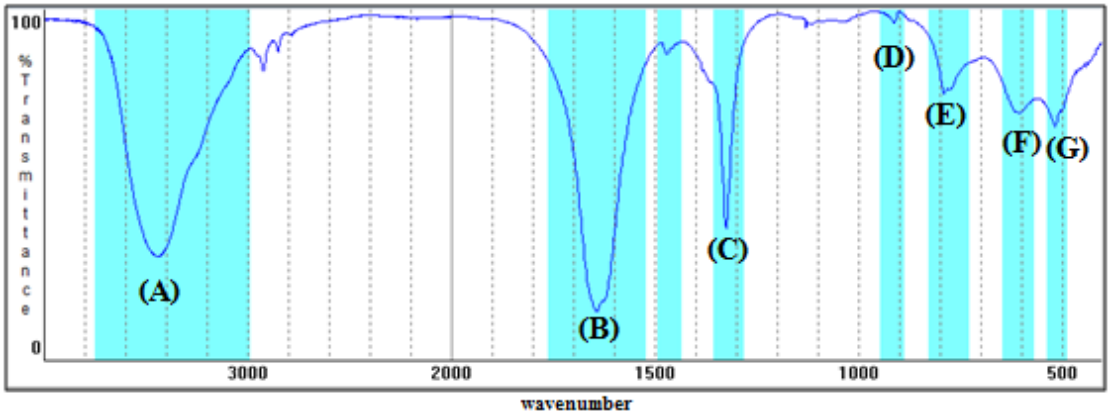
(G) พีคที่ความถี่ 518 cm^{-1} เป็นตำแหน่งพีคที่เกิดในนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ด้วยเช่นกัน จึงต้องใช้ความเข้มของการดูดกลืนแสงอินฟราเรดในการตัดสินใจ

2.5.3.1.2 นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต (Calcium oxalate dehydrate, Weddelite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $CaC_2O_4*2H_2O$ มีลักษณะดังภาพประกอบ 2-14



ภาพประกอบ 2-14โครงสร้างทางเคมีของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรต

นิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรตต่างจากนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ตรงที่ประกอบด้วยโมเลกุลของน้ำจำนวน 2 โมเลกุลเท่านั้น พันธะต่างๆภายในโมเลกุลจะคล้ายกับนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตเป็นอย่างมาก จากพันธะที่กล่าวมาข้างต้นนั้น จะได้ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมดังภาพประกอบ 2-15



ภาพประกอบ 2-15 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรต

จากภาพประกอบ 2-15 แต่ละตำแหน่งพีคที่เกิดการดูดกลืนแสงของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตมีดังนี้

(A) ที่ความถี่ 3476 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ O-H ของโมเลกุลของน้ำแบบผลึก

(B) ที่ความถี่ 1646 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นแบบสมมาตรของพันธะ C=O

(C) ที่ความถี่ 1326 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นแบบสมมาตรของพันธะ C=O ซึ่งเป็นตำแหน่งพีคสำคัญที่จะบ่งบอกว่ามีนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตประกอบอยู่ด้วยในนิ่วชนิดที่เป็นนิ่วผสม

(D) ที่ความถี่ 915 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีค ที่เกิดจากการสั่นของพันธะ O-H และยังเป็นส่วนที่แสดงความแตกต่างกับนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต

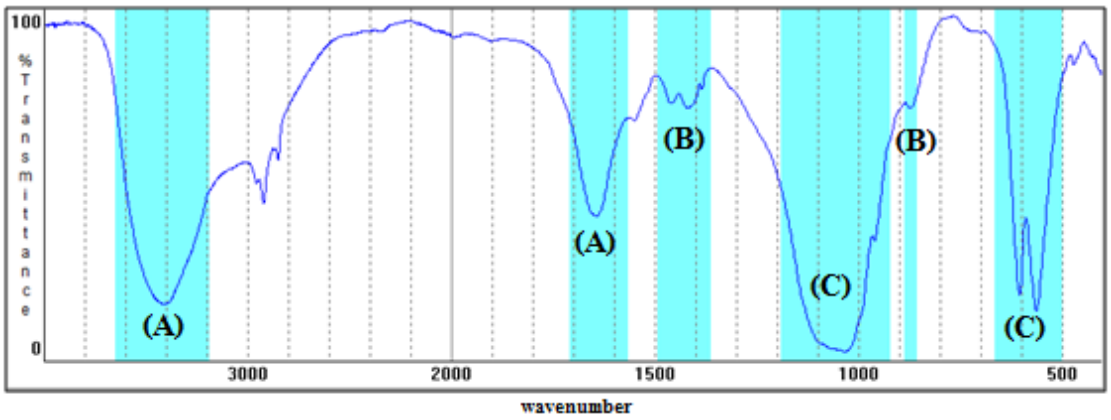
(E) ทีความถี่ 777 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ C=O ที่มีความผิดปกติของการจัดเรียงอะตอม ตำแหน่งพีค นี้เป็น ตำแหน่งพีค ที่บอกความแตกต่างระหว่างนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต

(F) ที่ความถี่ 610 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นตามแบบแผนของพันธะ O-H

(G) ที่ความถี่ 518 cm^{-1} เป็นตำแหน่งพีคที่เกิดในนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลต โมโน ไฮเดรต ด้วยเช่นกัน จึงต้องใช้ความเข้มของการดูดกลืนแสงอินฟราเรดในการตัดสินใจ

2.5.3.1.3 นิ่วแคลเซียมฟอสเฟตหรือนิ่วอะพาไทท์ (Calcium phosphate, Carbonate Apatite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $Ca_{10}(PO_4)_2(CO_3)_6(OH)_2$

นิ่วแคลเซียมฟอสเฟต จะพบลักษณะเด่นจาก กลุ่ม $(PO_4)^{3-}$ ซึ่งเป็นแกนกลางของโมเลกุล มีไอออนลบอิสระจากออกซิเจนทั้งหมด 3 ไอออน ไอออนเหล่านี้จะไปจับกับไอออนบวกของแคลเซียมซึ่งมีไอออนบวกอิสระสองไอออนต่อหนึ่งโมเลกุล โมเลกุลของคาร์บอเนตอะพาไทท์นั้น สามารถบรรจุหมู่ OH อยู่ภายในโครงสร้างของผลึ กแลตติกได้จำนวนมาก จากลักษณะของพันธะ ตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมฟอสเฟตมีลักษณะดังภาพประกอบ 2-16



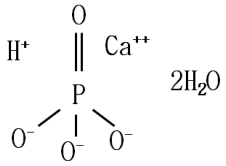
ภาพประกอบ 2-16 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแคลเซียมฟอสเฟต

(A) ตำแหน่งพีคที่ความถี่ 3404 และตำแหน่งพีคที่ความถี่ 1623 cm^{-1} เป็นผลมาจากการบรรจุหมู่ OH อยู่ภายในโครงสร้างของผลึกแลกติด

(B) ตำแหน่งพีคที่ความถี่ 1449, 1415 และ 873 cm^{-1} เป็นผลมาจากหมู่ฟังก์ชัน CO_3

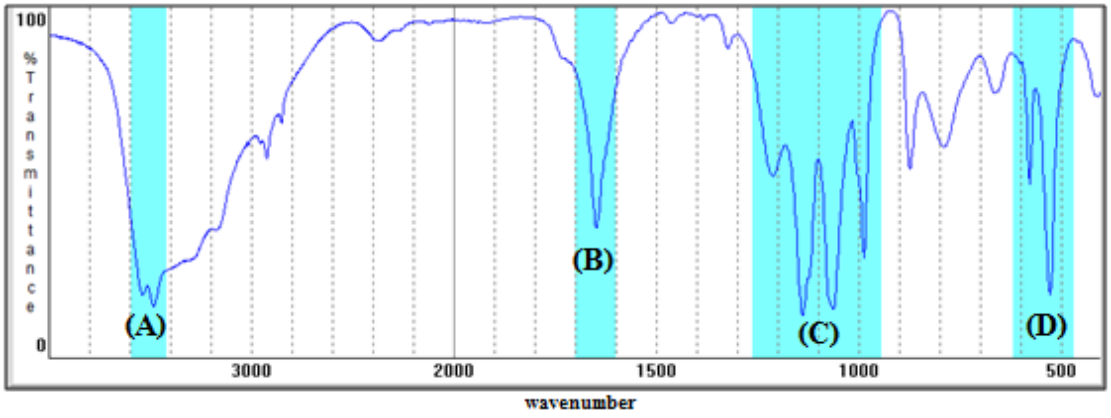
(C) ตำแหน่งพีคที่เห็นอย่างเด่นชัดคือตำแหน่งพีคที่ความถี่ 1035 cm^{-1} ซึ่งเกิดจากการสั่นของหมู่ฟอสเฟส และอีกหนึ่งตำแหน่งคือ 602 และ 566 cm^{-1}

2.5.3.1.4 นิ่วแคลเซียมโมโนไฮโดรเจนฟอสเฟสหรือนิ่วบรูไชท์ (Calcium monohydrogenphosphate dihydrate, Brushite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $CaHPO_4 * 2H_2O$ มีลักษณะดังภาพประกอบ 2-17



ภาพประกอบ 2-17 โครงสร้างทางเคมีของนิ่วบรูไชท์

จากลักษณะโครงสร้างทางเคมี ตำแหน่งพีคที่ปรากฏของนิ่วบรูไชท์สามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-18



ภาพประกอบ 2-18 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วบรูไชท์

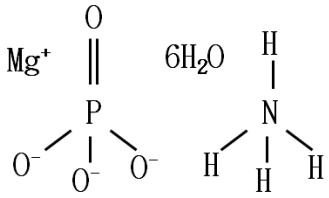
(A) ตำแหน่งความถี่ 3540 และ 3488 cm^{-1} เป็นผลจากการสั่นของหมู่ OH

(B) ตำแหน่งความถี่ 1649 cm^{-1} เป็นผลจากการสั่นของพันธะ O-H ของน้ำ

(C) บริเวณแถบดูดกลืนความถี่ 1000 cm^{-1} เป็นผลมาจากการสั่นของพันธะ HPO_4 ซึ่งทำให้เกิดเป็นตำแหน่งพีค 4 ตำแหน่ง ได้แก่ 985, 1059, 1133 และ 1211 cm^{-1}

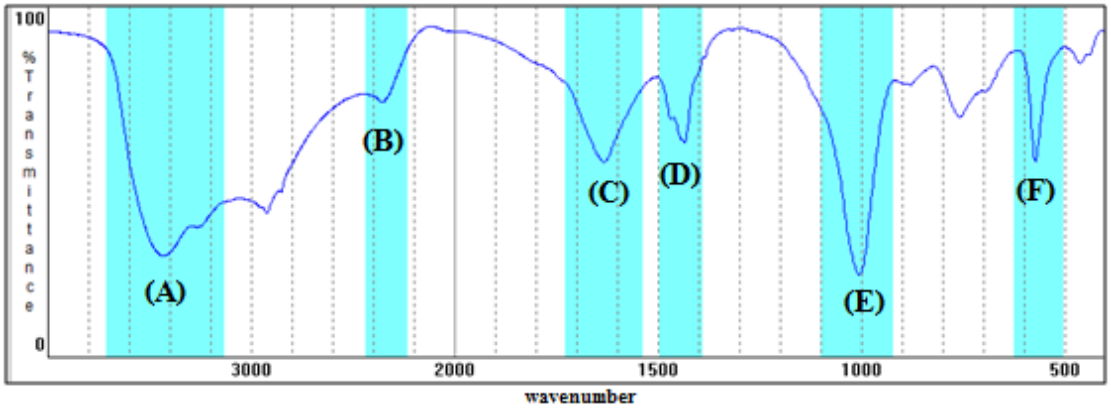
(D) ตำแหน่งความถี่ 578 และ 527 cm^{-1} เกิดจากการสั่นของหมู่ฟอสเฟส

2.5.3.2 นิ่วแมกนีเซียม แอมโมเนียมฟอสเฟต (Magnesium Ammonium phosphate Stone) หรือนิ่วสตรูไวต์ (Struvite) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $MgNH_4PO_4*6H_2O$ ดังภาพประกอบ 2-19



ภาพประกอบ 2-19 โครงสร้างทางเคมีของนิ่วสตรูไวต์

จากลักษณะโครงสร้างทางเคมี ตำแหน่งพีคที่ปรากฏของนิ่วสตรูไวต์สามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-20



ภาพประกอบ 2-20 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วสตรูไวต์

จากอินฟราเรดสเปกตรัมพบว่าตำแหน่งพีคที่ใช้ตัดสินว่าเป็นนิ่วสตรูไวท์มีดังนี้

(A) ตำแหน่งพีค 3430 และ 3266 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีค ที่เกิดจากการสั่นของพันธะ O-H และพันธะ NH

(B) ตำแหน่งพีค 2360 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ O-H

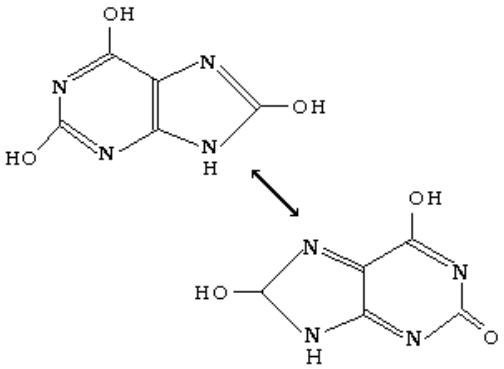
(C) ตำแหน่งพีค1634 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ OH ของน้ำ

(D) ตำแหน่งพีค 1467 และ 1435 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีค ที่เกิดจากการสั่นของแอมโมเนียมไอออน

(E) ที่ความถี่ 1005 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของกลุ่มพันธะฟอสเฟต

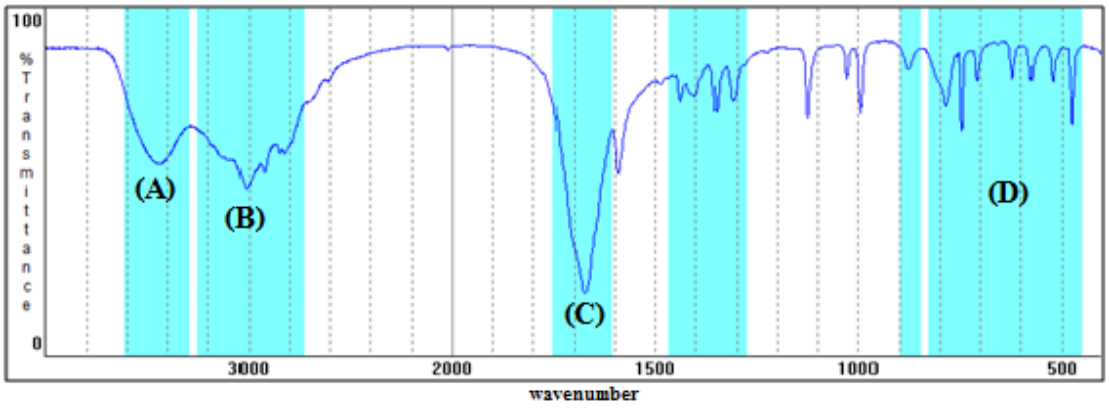
(F) ที่ความถี่ 572 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของกลุ่มพันธะฟอสเฟต

2.5.3.3 นิ่วยูริก (Uric acid Stone) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $C_5H_4N_4O_3$ มีลักษณะดังภาพประกอบ 2-21



ภาพประกอบ 2-21 โครงสร้างทางเคมีของนิ่วยูริก

โครงสร้างของนิ่วยูริกจะพบพันธะของ C=C หนึ่งตำแหน่ง พันธะ C-C หนึ่งตำแหน่ง และหมู่เอไมล์ (HNCONH) 2 ตำแหน่ง ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วยูริกแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-22



ภาพประกอบ 2-22 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วยูริก

จากอินฟราเรดสเปกตรัมพบว่าตำแหน่งพีคที่ใช้ตัดสินว่าเป็นนิ่วยูริกดังนี้

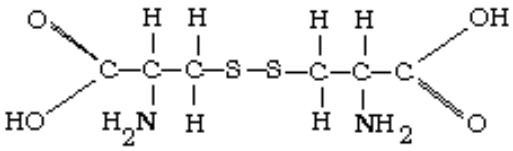
(A) ที่ความถี่ 3440 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ O-H

(B) ความถี่ 3005 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีค ที่เกิดจากการสั่นร่วมกันของพันธะ N-H, C-N-H และ C-H

(C) ที่ความถี่ 1675 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ C=O

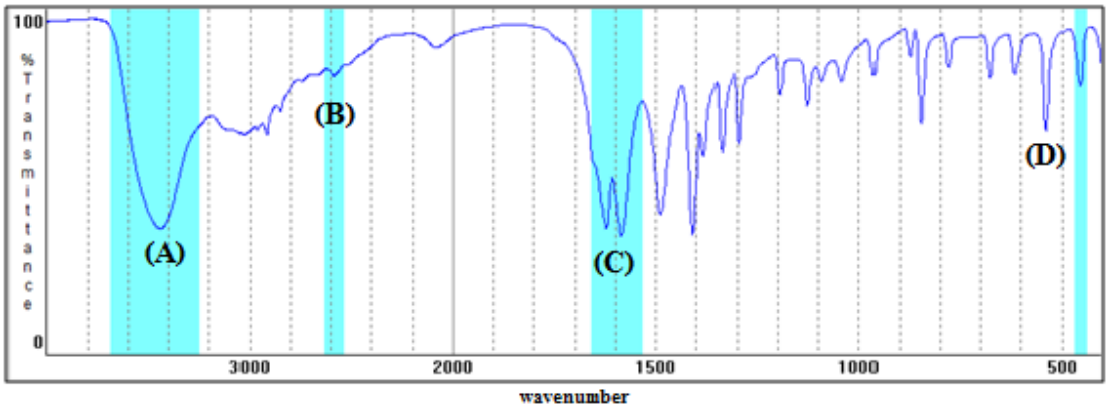
(D) บริเวณช่วงความถี่ 500 – 800 cm^{-1} เป็นบริเวณที่เห็น ตำแหน่งพีค ที่เกิดจากการสั่นของกลุ่มโมเลกุลที่มีลักษณะการจับตัวเป็นวงแหวนแบบอะโรแมติก ของหมู่ C-H-N, C=O-N-H

2.5.3.4 นิ่วซิสทีน (Cystine) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $C_3H_7ON_2S$ มีลักษณะดังภาพประกอบ 2-23



ภาพประกอบ 2-23 โครงสร้างทางเคมีของนิ่วซิสทีน

โครงสร้างของนิ่วซิสทีนจะพบพันธะที่โดดเด่นคือพันธะ S-S นอกจากนั้นก็ประกอบด้วยพันธะ COOH หนึ่งตำแหน่ง (C=O กับ OH) และพันธะ C-H 2 ตำแหน่ง ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วซิสทีนแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-24



ภาพประกอบ 2-24 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วซิสทีน

ตำแหน่งพีคที่ปรากฏบนแถบดูดกลืนความถี่ของนิ่วซิสทีนมีดังนี้

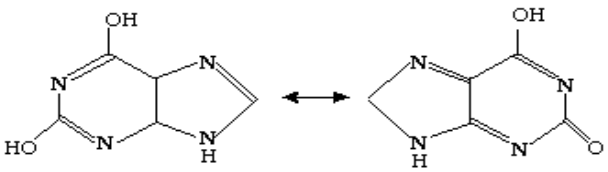
(A) ความถี่ 3454 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นร่วมกันของพันธะ O-H และ N-H

(B) ความถี่ 2587 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ S-H

(C) ความถี่ 1623 และ 1586 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นแบบไม่สมมาตรของพันธะ C=O

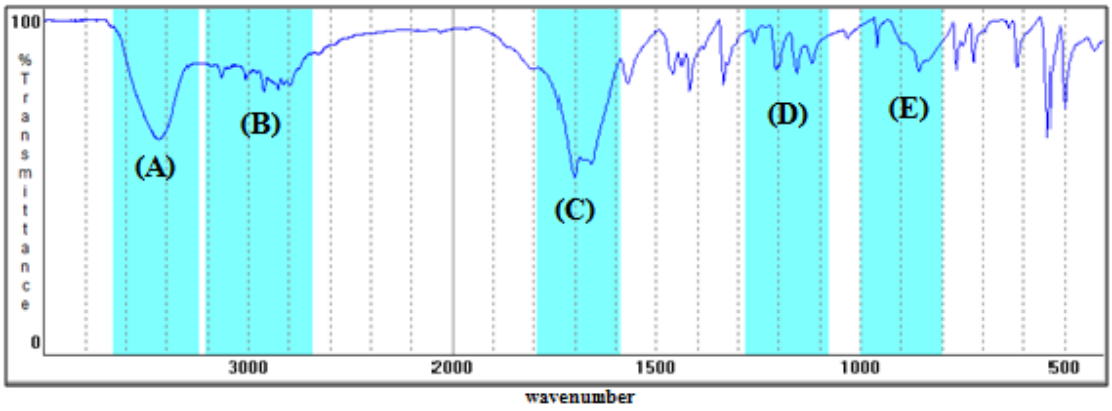
(D) ความถี่ 452 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ S-S

2.5.3.5 นิ่วแซนทีน (Xanthine) มีโครงสร้างทางเคมีคือ $C_5H_4N_4O_2$ สามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-25



ภาพประกอบ 2-25 โครงสร้างทางเคมีของนิ่วแซนทีน

โครงสร้างของนิ่วแซนทีนจะพบพันธะของเอไมด์ 1 ตำแหน่ง พันธะ C=C หนึ่งตำแหน่งนำ ดังนั้นลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมจะปรากฏแถบดูดกลืนความถี่ดังภาพประกอบ 2-26



ภาพประกอบ 2-26 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแซนทีน

(A) แถบความถี่ที่มากที่สุดอยู่บริเวณ 3444 cm^{-1} ซึ่งเป็นแถบความถี่ที่เกิดมาจากการสั่นของพันธะ OH

(B) บริเวณช่วงความถี่ 3000 cm^{-1} เป็นบริเวณที่เห็นตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของกลุ่มโมเลกุลที่เกิดการซ้อนทับกันของหมู่พันธะ O-H, N-H, C-N-H และ C-H

(C) ความถี่ 1702 และ 1662 cm^{-1} แสดงตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นแบบไม่สมมาตรของพันธะ C=O

(D) บริเวณช่วงความถี่ 1300 – 1100 cm^{-1} เป็นบริเวณที่เห็นตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของกลุ่มโมเลกุลที่เกิดการซ้อนทับกันของหมู่พันธะ C-N-H, C=O-N-H

(E) บริเวณช่วงความถี่ 1000 – 800 cm^{-1} เป็นบริเวณที่เห็นตำแหน่งพีคที่เกิดจากการสั่นของกลุ่มโมเลกุลที่เกิดการซ้อนทับกันของหมู่พันธะ C-N-H, C=O-N-H

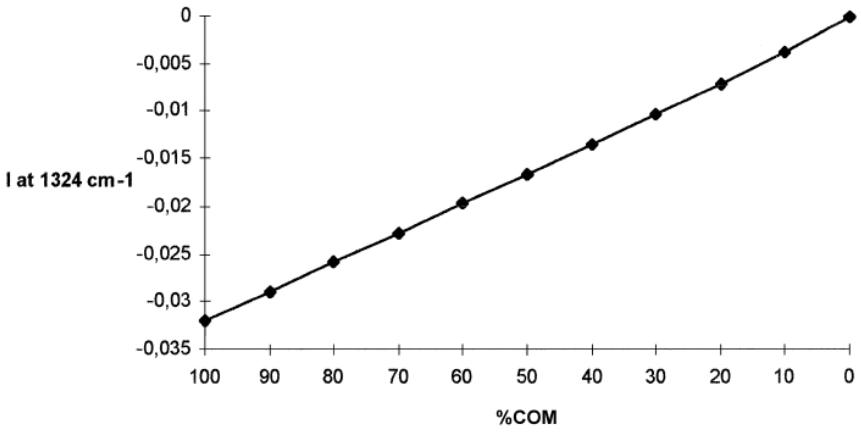
2.5.4 การแปลผลเชิงปริมาณ

การแปลผลเชิงปริมาณจะถูกนำมาใช้ในกรณีที่เป็นนิ่วชนิดผสม เพื่อระบุปริมาณของนิ่วแต่ละชนิดที่เป็นส่วนประกอบของก้อนนิ่วที่นำมาวิเคราะห์ โดยพบว่าแปลผลเชิงปริมาณของ นิ่วผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตนั้นยากมาก เนื่องจากผลการซ้อนทับกันของพีค และรูปแบบของตำแหน่งการเกิดพีคนั้นใกล้เคียงกันมาก นอกจากนั้นแล้วนิ่วผสมชนิดนี้เป็นนิ่วที่พบมากที่สุดอีกด้วย จากงานวิจัยที่ผ่านมาพบว่าเทคนิคที่มีประสิทธิภาพในการวิเคราะห์ส่วนทับซ้อนคือ วิธีการหาอนุพันธ์ ซึ่งต่อมามีการพัฒนาให้สามารถนำไปแปลผลเชิงปริมาณสำหรับสารผสม เรียกว่าวิธี zero-crossing-point first-derivative [17]

จากบทความ [17] พบว่าเมื่อนำอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตที่ทำการสังเคราะห์ขึ้น ในอัตราส่วนประกอบระหว่าง 0-100 เปอร์เซ็นมาผ่านการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่ง พบว่าค่าความเข้มข้นที่ได้จากตำแหน่งความถี่ 1324 cm^{-1} สามารถบอกอัตราส่วนประกอบของนิ่วผสมชนิดนี้ได้ ตามสมการที่ 2.9

$$I_{1324\ cm^{-1}}\ (arbitrary\ units) = f(\%COM) \qquad (2.9)$$

และผลการทดลองจากสมการที่ 2.9 สามารถนำมาสร้าง เส้นโค้งมาตรฐานเปรียบเทียบ (calibration curve) สำหรับการบอกปริมาณของส่วนประกอบของนิ่วทั้งสอง ชนิดได้ ดังแสดงในภาพประกอบ 2-27



ภาพประกอบ 2-27 เส้นโค้งมาตรฐานเปรียบเทียบ [17]

จากเส้นโค้งมาตรฐานเปรียบเทียบจะเห็นว่าเป็นกราฟบอกปริมาณส่วนผสมในรูปแบบของ %COM หรือปริมาณของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ซึ่งหากค่าความเข้มข้นมีค่าน้อยกว่า -0.032 หรือมีค่ามากกว่า 0 แสดงว่านิ่วก้อนนั้นเป็นนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตและนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตชนิดเดี่ยว ตามลำดับ

2.5.5 ตัวชี้วัดประสิทธิภาพ (performance indicator)

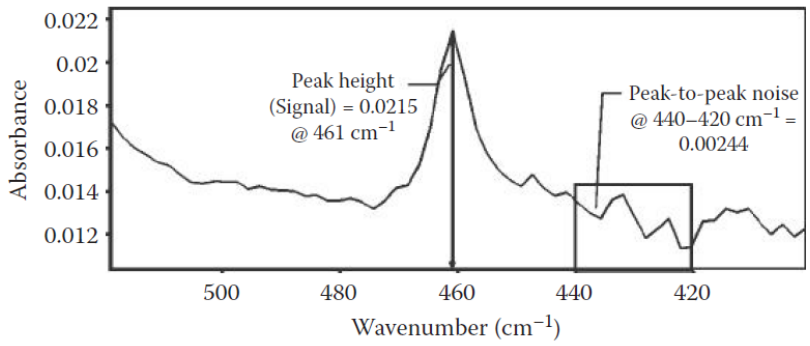
2.5.5.1 Signal-to-Noise Ratio (SNR) [25]

การทดสอบคุณภาพของอินฟราเรดสเปกตรัม โดยทั่วไปแล้วจะเป็นการวัดค่า SNR ของพีค หรือเรียกว่าการวัดค่า SNR ในช่วงสั้น (SNR for short) ดังสมการ 2.9

$$SNR = signal/noise \tag{2.9}$$

เมื่อ SNR = Signal to noise ratio

วิธีการคือการหาอัตราส่วนระหว่างขนาดของพีค (size of a peak) ต่อขนาดของขนาดของสัญญาณรบกวน (peak-to-peak, PPN) ในหน่วยของ absorbance unit ลักษณะการคำนวณค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมสามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 2-28



ภาพประกอบ 2-28 ลักษณะการคำนวณค่า SNR สำหรับอินฟราเรดสเปกตรัม [25]

2.5.5.2 Standard Error of Performance (SEP) [35]

SEP เป็นค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของค่าความแตกต่างระหว่างค่าที่วัดได้กับค่าอ้างอิง การคำนวณเป็นไปตามสมการ 2.9 ซึ่งถ้าค่า SEP มีค่าน้อยๆ แสดงว่าค่าที่วัดได้กับค่าที่อ้างอิงมีค่าที่ใกล้เคียงกันมาก

$$SEP = \left(\frac{\sum(Y-\acute{Y})^2}{N}\right)^{1/2} \tag{2.9}$$

เมื่อ Y = ค่าอ้างอิง

$\acute{Y}$ = ค่าที่วัดได้

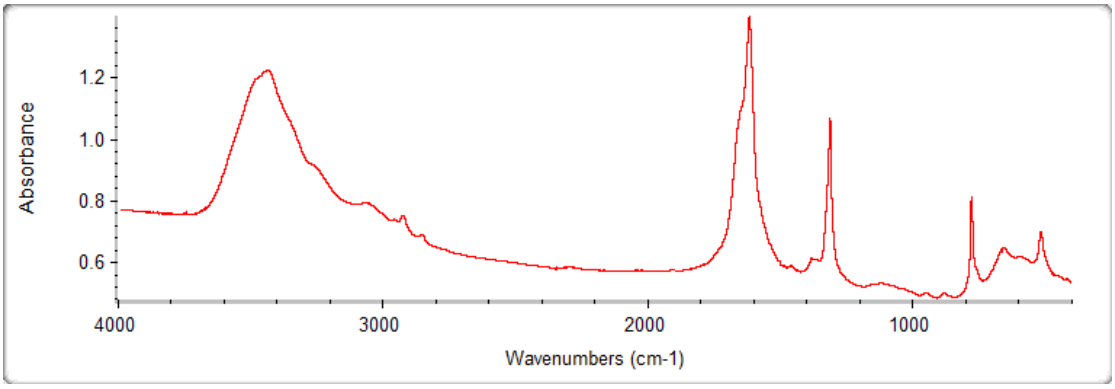
N = จำนวนของตัวอย่างทั้งหมด

บทที่ 3

การทดลอง

3.1 อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วในทางเดินปัสสาวะที่นำมาทดลอง

อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วในทางเดินปัสสาวะที่นำมาทดลองนำมาจากการบันทึกผลในโปรแกรม EZ OMNIC (NICODOM®) จากฐานข้อมูลของโรงพยาบาล เชียงใหม่ ปี พ.ศ. 2544 โปรแกรม EZ OMNIC เป็นโปรแกรมที่แพทย์เฉพาะทางใช้ช่วยในการแปลผล โปรแกรมสามารถคำนวณหาตำแหน่งแถบดูดกลืนความถี่ของสเปกตรัม แต่ไม่สามารถตัดสินใจได้ว่าเป็นนิ่วชนิดใด ข้อมูลอินฟราเรดสเปกตรัมที่นำใช้อยู่ในรูปแบบความสัมพันธ์ระหว่างการดูดกลืนแสงกับตำแหน่ งเลขคลื่น ตัวอย่างของอินฟราเรดสเปกตรัมสามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 3-1



ภาพประกอบ 3-1 หน้าต่างแสดงตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมจากโปรแกรม EZ OMNIC

3.1.1 สมมุติฐาน

ข้อมูลอินฟราเรดที่ได้รับมาเป็นตัวอย่างของนิ่วที่เกิดขึ้นเองตามธรรมชาติ จึงมีความเป็นไปได้ว่าก้อนนิ่วไม่ได้ประกอบด้วยหมู่ฟังก์ชันที่เป็นส่วนประกอบของนิ่วชนิดใดชนิดหนึ่งเพียงชนิดเดียว แต่จะมีหมู่ฟังก์ชันที่เป็นส่วนประกอบของนิ่วชนิดอื่น หรือเป็นองค์ประกอบไม่ทราบชนิด (unknown) ปะปนอยู่ด้วยก็เป็นได้ เนื่องจากหมู่ฟังก์ชันองค์ประกอบแต่ละชนิดจะให้ตำแหน่งการดูดกลืนแสงที่เลขคลื่นเฉพาะ และแต่ละตำแหน่งพีคที่ปรากฏจะมีค่าความเข้มข้นแปลผันตามปริมาณที่เป็นส่วนประกอบ จึงสามารถนำไปใช้ในการแปลผลเชิงคุณภาพและเชิงปริมาณได้

3.1.2 ตัวอย่างของนิ่วที่ใช้ในการทดลอง

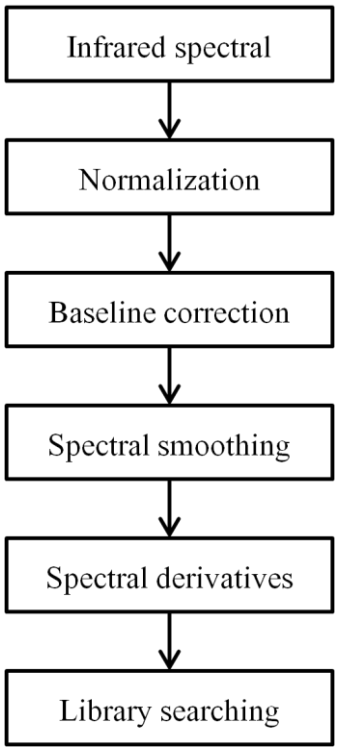
ตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วที่นำมาทดลองมีด้วยกันทั้งหมด 52 ตัวอย่าง ประกอบไปด้วยนิ่วชนิดต่างๆ ดังตารางที่ 3-1

ตารางที่ 3-1 ตัวอย่างของนิ่วที่ใช้ในการทดลอง

ประเภทของนิ่ว	จำนวนตัวอย่าง
นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต	10
นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต	7
นิ่วแมกนีเซียม แอมโมเนียมฟอสเฟต หรือนิ่วสตรูไวต์	3
นิ่วยูริก	10
นิ่วซิสทีน	3
นิ่วแซนทีน	1
นิ่วบรูไชต์	1
นิ่วชนิดผสมระหว่าง นิ่วแคลเซียมออกซาเลต โมโนไฮเดรต และ นิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรต	17

*นิ่วนิ่วแคลเซียมฟอสเฟตหรือนิ่วอะพาไทท์และนิ่ววิทล็อก ไคต์ (Whitlockite) ไม่ได้ถูกนำมาทดลอง เนื่องจากไม่มีตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัม

3.2 ระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัม



ภาพประกอบ 3-2 ระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัม

แต่ละขั้นตอนของระเบียบวิธีการจัดการอินฟราเรดสเปกตรัมในภาพประกอบ 3-2 มีคำอธิบายดังนี้

- Infrared spectral คืออินฟราเรดสเปกตรัมตัวอย่างที่นำมาใช้ในการทดลอง โดยอยู่ในรูปแบบความสัมพันธ์ระหว่างการดูดกลืนแสง (absorbance) และตำแหน่งเลขคลื่น (wavenumber)
- Normalization เป็นขั้นตอนการปรับขนาดสเกลค่าความเข้มข้นของอินฟราเรดสเปกตรัมให้อยู่ ในช่วงเดียวกันคือ 0-1 เพื่อนำไปใช้ในขั้นตอนการเปรียบเทียบสเปกตรัม
- Baseline correction เป็นขั้นตอนการกำจัดความผันแปรของเส้นพื้นฐาน (baseline slope and curvature) ออกจากสเปกตรัมตัวอย่าง

- Spectral smoothing เป็นขั้นตอนในการกำจัดสัญญาณรบกวนที่ปะปนอยู่ในสเปกตรัมตัวอย่าง
- Spectral derivatives เป็นขั้นตอนที่ถูกใช้สำหรับการหาตำแหน่งการเกิดพีค และแก้ไขส่วนของการซ้อนทับกัน (overlapped) ของตำแหน่งพีค
- Library searching เป็นขั้นตอนการเปรียบเทียบตำแหน่งการเกิดพีคที่วัดได้ ว่าตรงกับผลการดูดกลืนแสงของหมู่ฟังก์ชันชนิดใด

3.3 ขั้นตอนการทดลอง

3.3.1 บันทึกข้อมูลอินฟราเรดสเปกตรัมในรูปแบบการดูดกลืนของแสงจากโปรแกรม EZ OMNIC เป็นไฟล์ .CVS แล้วแปลงเป็นไฟล์ .txt อีกครั้ง เพื่อให้สามารถนำข้อมูลเข้าโปรแกรม LabVIEW ได้

3.3.2 นำอินฟราเรดสเปกตรัมที่ได้จากข้อ 3.3.1 เข้าสู่ขั้นตอน ปรับขนาดเส้นบรรทัดฐาน เพื่อปรับขนาดสเกลค่าความเข้มข้นของอินฟราเรดสเปกตรัมให้อยู่ในช่วงเดียวกันคือ 0-1 เพื่อนำไปใช้ในขั้นตอนการเปรียบเทียบสเปกตรัม

3.3.3 อินฟราเรดที่ผ่านขั้นตอนการปรับขนาดเส้นบรรทัดฐานแล้ว จะถูกนำมาคำนวณหาค่า SNR เพื่อวัดประสิทธิภาพของสัญญาณก่อนการนำไปประมวลผล

3.3.4 นำอินฟราเรดสเปกตรัมที่ได้จากข้อ 3.3.2 เข้าสู่ขั้นตอนการ ปรับเส้นเรียบ เพื่อกำจัดสัญญาณรบกวน จากนั้นแสดงผลเปรียบเทียบลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมทั้งก่อนและหลัง

3.3.4.1 วิธีตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์ กำหนดค่าอันดับของพหุนาม (polynomial order) เท่ากับ 2 แล้วเปลี่ยนจำนวนตำแหน่งในหน้าต่างพิจารณา (side points) ตั้งแต่ 5-11 ตำแหน่ง โดยเพิ่มขึ้นครั้งละ 2 ตำแหน่ง

3.3.4.2 วิธีวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด จะใช้รูปแบบการแปลงเวฟเล็ตแบบ Daubechies ซึ่งมีรูปแบบคล้ายกันอินฟราเรดสเปกตรัมมากที่สุดในอันดับ (order) ต่างๆ คือ db07 และ db08 และจะทดลองในระดับ (level) 1-3 ในทุกอันดับ

3.3.5 คำนวณค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมข องนิ่วแต่ละชนิด หลังผ่านขั้นตอนปรับเส้นเรียบ แล้วประเมินผลการกำจัดสัญญาณรบกวน ที่เหมาะสมที่สุดที่ได้จากวิธี ตัวกรองของซาวิสกี้-โกเลย์ และวิธีวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด พร้อมกับเปรียบเทียบผล SNR ของก่อนและหลังการปรับเส้นเรียบ

3.3.6 นำอินฟราเรดสเปกตรัมเข้าสู่ขั้นตอนกำจัดเส้นแนวโน้ม โดยใช้อนุพันธ์อันดับหนึ่ง

3.3.7 นำอินฟราเรดสเปกตรัมเข้าสู่ขั้นตอนการระบุตำแหน่งพีคจาก การทำอนุพันธ์อันดับสอง และประเมินผลการระบุตำแหน่งพีคที่ถูกต้อง

3.3.8 การแปลผลเชิงปริมาณในกรณีนิ่วชนิดผสม (นิ่วผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลต ไดไฮเดรต) จะนำผลอินฟราเรดสเปกตรัมที่ได้จากข้อ 3.3.6 ซึ่งเป็นผลจากการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่งไปประเมินผลเชิงปริมาณโดยวิธี zero-crossing first-derivative เปรียบเทียบค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่งแถบดูดกลืนความถี่สำคัญนิ่วองค์ประกอบกับเส้นโค้งมาตรฐานเปรียบเทียบ (calibration curve) จากเอกสารอ้างอิง [17]

3.3.9 ประเมินค่าความคลาดเคลื่อนของผลการทดลองในข้อ 3.3.8 ด้วยวิธี Standard Error of Performance (SEP)

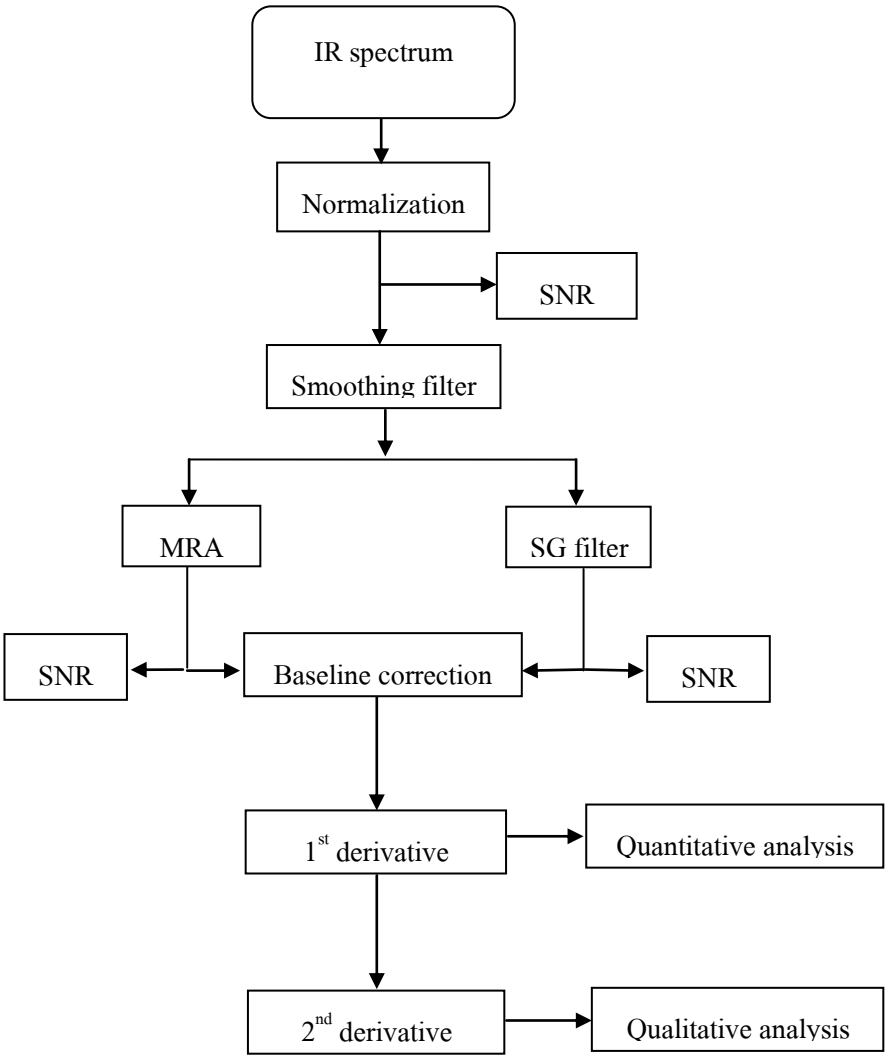
3.4 เครื่องมือและการกำหนดค่าพารามิเตอร์ของเครื่องมือที่ใช้ในโปรแกรม LabVIEW

เครื่องมือ (tools) ภายในโปรแกรม LabVIEW ที่ถูกนำมาใช้และการกำหนดค่าพารามิเตอร์ในแต่ละขั้นตอนมีดังนี้

3.4.1 Peak detector.vi เป็นเครื่องมือที่ใช้สำหรับการหาตำแหน่งการเกิดพีคของสเปกตรัม กำหนดค่าความเข้มข้นที่มากที่สุด (Threshold) สำหรับตรวจจับตำแหน่งพีค

3.4.2 ตำแหน่งแถบดูดกลืนที่ตรวจจับได้ทั้งหมดจะถูกนำเข้าสู่เงื่อนไขการตัดสินใจว่าตรงกับตำแหน่งแถบดูดกลืนความถี่ของนิ่วชนิดใด เงื่อนไขการตัดสินใจนี้ เขียนขึ้นโดยใช้ภาษาซี (C language) บนเครื่องมือ MathScript Node โดยได้กำหนดช่วงที่เกิดตำแหน่งแถบดูดกลืนความถี่ แต่ละตำแหน่งแบ่งตามชนิดของนิ่ว

3.5 แผนภูมิแสดงขั้นตอนการทดลอง



ภาพประกอบ 3-3 แผนภูมิแสดงขั้นตอนการทดลอง

บทที่ 4

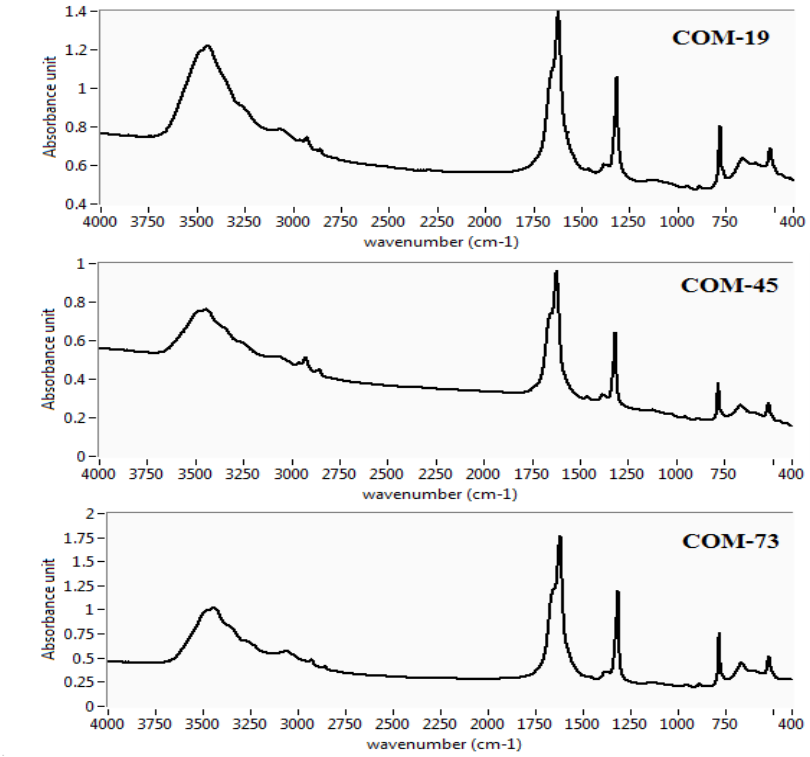
ผลการทดลอง

เนื้อหาในบทนี้จะเป็นผลการทดลองโดยแบ่งออกเป็นส่วนของการประมวลสัญญาณขั้นต้น การแปลผลเชิงคุณภาพ และการแปลผลเชิงปริมาณ ตามลำดับ

4.1 ขั้นตอนประมวลผลสัญญาณขั้นต้น

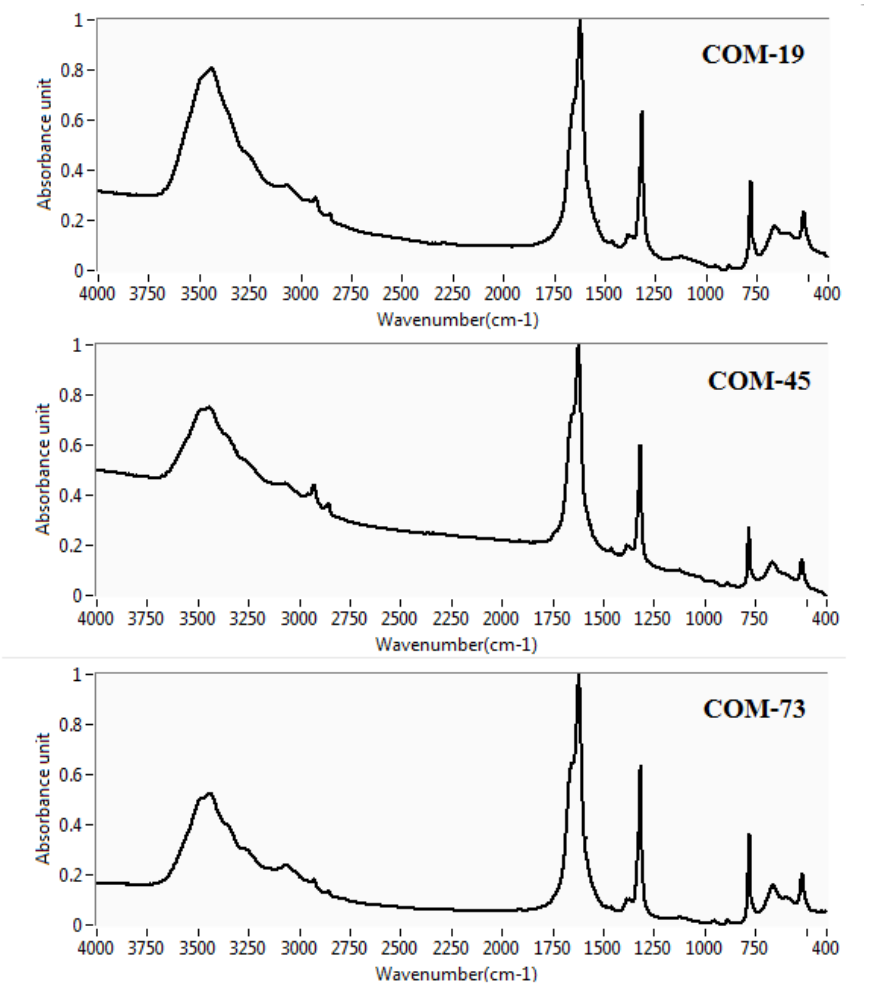
4.1.1 การปรับขนาดสัญญาณบรรทัดฐาน (normalization)

ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วตัวอย่าง ซึ่งเป็นนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต (Whewellite, COM) จำนวน 3 ตัวอย่าง ได้แก่ตัวอย่างที่ 19, 75 และตัวอย่างที่ 73 แสดงดังภาพประกอบ 4-1



ภาพประกอบ 4-1 ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมตัวอย่างเมื่อแสดงผลโดยโปรแกรม LabVIEW

จากภาพประกอบ 4-1 จะเห็นว่าในส่วนของแกน y หรือค่าความเข้มข้นของการดูดกลืนสารนั้น มีขนาดแตกต่างกันในแต่ละตัวอย่าง ซึ่งจะส่งผลเมื่อมีการ เปรียบเทียบลักษณะสเปกตรัม ดังนั้นจึงมีการปรับขนาดสัญญาณบรรทัดฐาน หรือการทำ normalization เพื่อปรับขนาดอินฟราเรดสเปกตรัมให้อยู่ในช่วงเดียวกัน ให้ผลการปรับขนาดดังภาพประกอบ 4-2

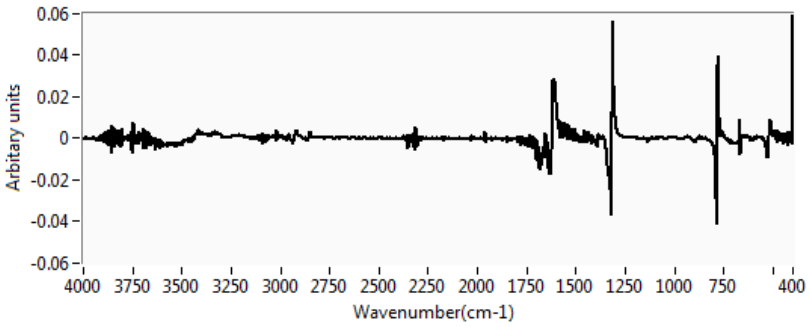


ภาพประกอบ 4-2 อินฟราเรดสเปกตรัมหลังการทำ Normalization

จากภาพประกอบ 4-2 จะเห็นว่าอินฟราเรดสเปกตรัมหลังการปรับเส้นบรรทัดฐานแต่ละตัวอย่างจะมีค่าความเข้มข้นในการดูดกลืนแสง อยู่ในช่วง 0-1 absorbance unit ทั้งหมด จากนั้นในขั้นตอนต่อไปเป็นการกำจัดเส้นแนวโน้มของอินฟราเรดสเปกตรัมออกไป โดยวิธีการที่ง่ายและมีประโยชน์ต่อการแปลผลเชิงปริมาณคือการกำจัดเส้นแนวโน้มโดยวิธีการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่ง

4.1.2 ขั้นตอนการกำจัดเส้นแนวโน้มพื้นฐาน (baseline correction)

ในขั้นตอนนี้ ใช้เทคนิคการทำอนุพันธ์เพื่อกำจัดเส้นแนวโน้ม ซึ่งเป็นวิธีทางคณิตศาสตร์ที่ไม่ยุ่งยากซับซ้อน พร้อมกันนั้นยังสามารถนำผลจากส่วนนี้ไปแปลผลเชิงปริมาณได้อีกด้วย โดยตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมหลังการทำอนุพันธ์ มีลักษณะดังภาพประกอบ 4-3



ภาพประกอบ 4-3 อินฟราเรดสเปกตรัมเมื่อผ่านการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่ง

จากภาพประกอบ 4-3 จะเห็นว่าเส้นแนวโน้มของอินฟราเรดสเปกตรัมถูกกำจัดออกไปและวางอยู่บนเส้นศูนย์ แต่จะสังเกตได้ว่า มีหลายช่วงความถี่ ที่ปรากฏ artifact peaks ซึ่งจะมีผลต่อการแปลผลในขั้นตอนต่อไป ดังนั้นขั้นตอนต่อไปก่อนการแปลผลคือการกำจัดสัญญาณรบกวน

4.1.3 การปรับเส้นเรียบสเปกตรัม (spectral smoothing)

การปรับเส้นเรียบหรือการกำจัดสัญญาณรบกวน จะถูกนำมาใช้ในกรณีที่ไม่สามารถระบุตำแหน่งพีคได้ เนื่องจากมีสัญญาณรบกวนปะปนอยู่ หรือเมื่ออินฟราเรดสเปกตรัมมีค่า SNR ค่อนข้างต่ำ จากข้างต้นจะเห็นว่าอินฟราเรดสเปกตรัมมีสัญญาณรบกวนแทรกอยู่ ดังนั้นจึงได้ทำการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมจำนวน 10 ตัวอย่าง เพื่อประเมินว่าอินฟราเรดส เปกตรัมสามารถนำไปแปลผลได้หรือไม่

4.1.3.1 ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้น

ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมจำนวน 10 ตัวอย่าง แสดงดังตารางที่ 4-1

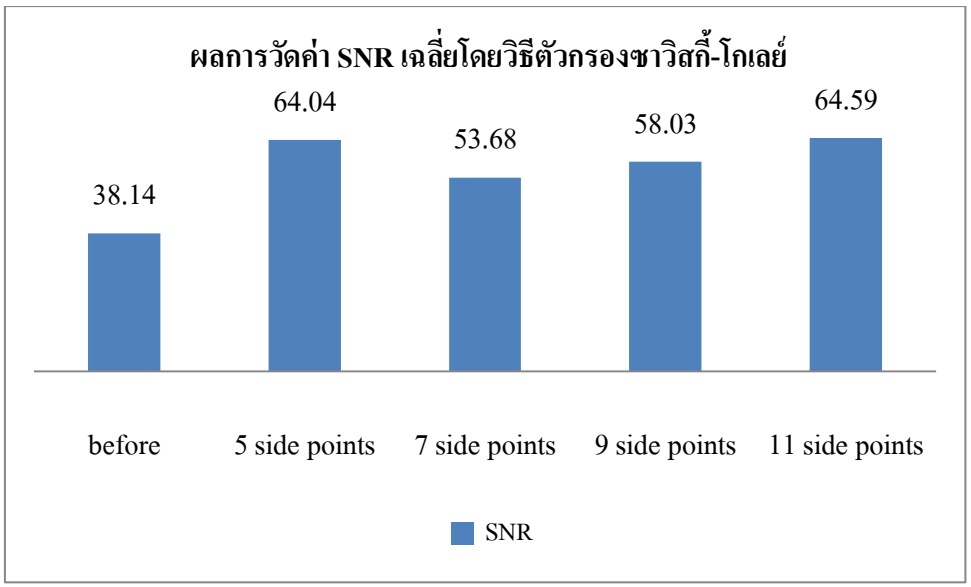
ตารางที่ 4.1 ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้น

อินฟราเรดสเปกตรัมตัวอย่างที่	ค่า SNR ที่วัดได้
19	36.23
45	51.75
73	27.90
74	29.83
80	37.47
83	43.64
110	43.67
119	46.43
150	18.20
206	46.37
ค่าเฉลี่ย	38.14

จากตารางที่ 4-1 จะเห็นว่าค่าเฉลี่ย SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัม ตัวอย่างอยู่ที่ 38.14 ซึ่งเป็นค่าที่อยู่ในช่วงที่ไม่สูงมาก และยังปรากฏ artifact peak จำนวนมากบนสเปกตรัมอีกด้วย ดังนั้นจึงต้องนำอินฟราเรดสเปกตรัมไปผ่านขั้นตอนการปรับเส้นเรียบด้วยวิธีตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์และวิธีวิเคราะห์แบบหลายระดับความละเอียด เพื่อกำจัดสัญญาณรบกวน จากนั้นจึง วัดค่า SNR เพื่อเปรียบเทียบกับค่า SNR ที่วัดได้ก่อนหน้าการปรับเส้นเรียบ

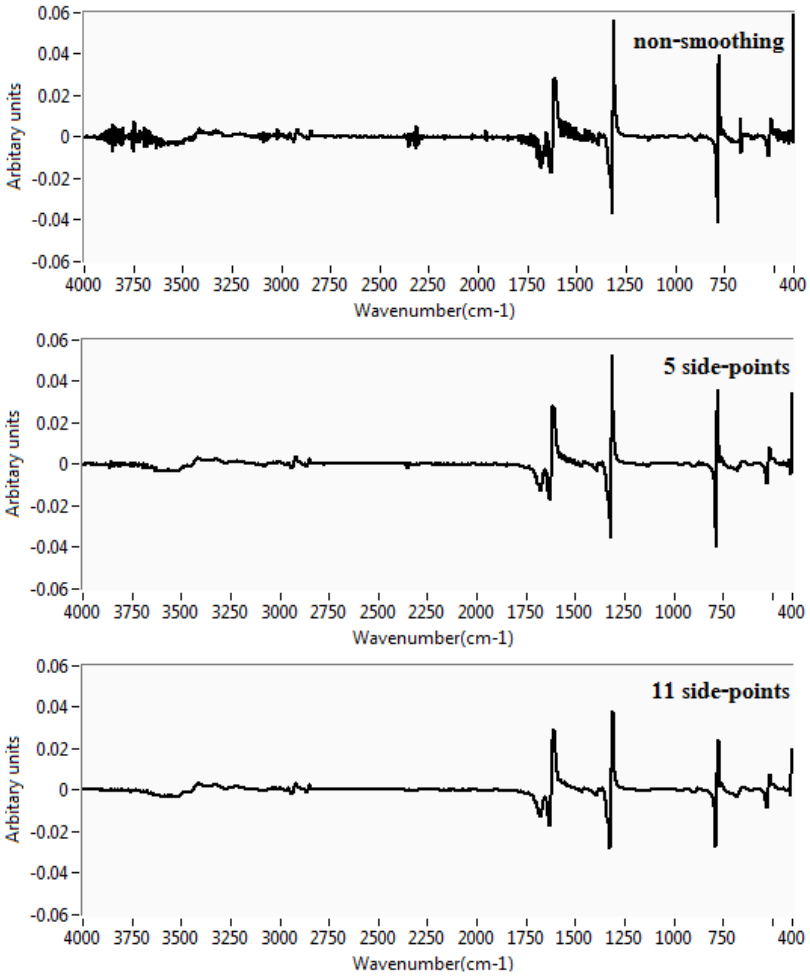
4.1.3.2 ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์

ในการกำจัดสัญญาณรบกวนด้วยตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์นั้น จะกำหนดค่าพหุนามดีกรี 2 แล้วทดลองเปลี่ยนจำนวนตำแหน่งภายในหน้าต่างการพิจารณาตั้งแต่ 5-11 ตำแหน่ง โดยเพิ่มขึ้นครั้งละ 2 ตำแหน่ง ผลการวัดค่า SNR ของนิ่วทั้ง 10 ตัวอย่าง เปรียบเทียบกับค่า SNR ก่อนการปรับเส้นเรียบ สามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 4-4

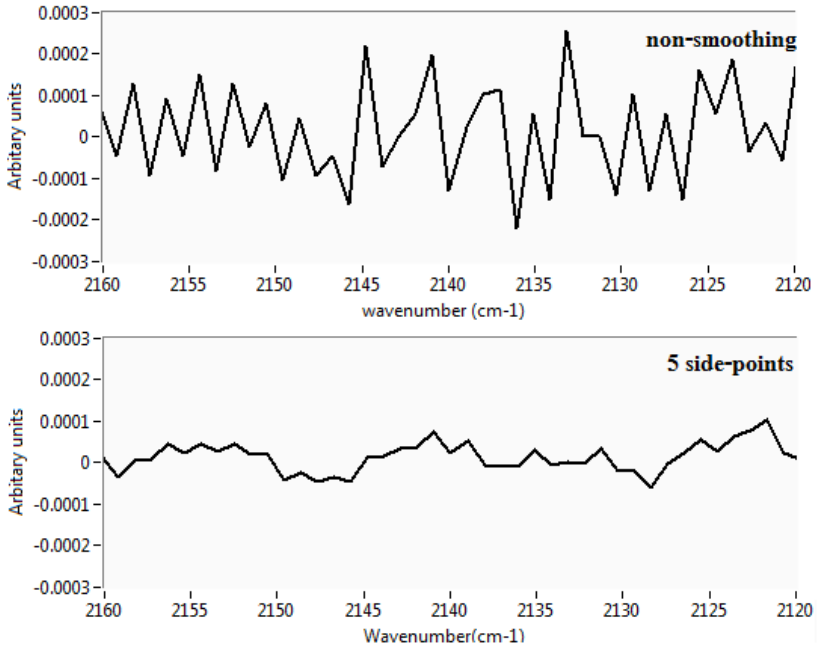


ภาพประกอบ 4-4 ค่า SNR เฉลี่ยของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์

จากภาพประกอบ 4-4 จะเห็นว่าการปรับเส้นเรียบโดยวิธีตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์ มีค่า SNR ที่สูงขึ้น โดยมีค่า SNR มากที่สุดเมื่อมีขนาดหน้าต่างการพิจารณาที่ 5 และ 11 ตำแหน่ง ซึ่งมีค่า 64.04 และ 64.59 ตามลำดับ จากผลตรงนี้แสดงว่าหน้าต่างการพิจารณาที่ 11 ตำแหน่ง ให้ค่า SNR สูงที่สุด และเมื่อพิจารณาลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัมในช่วงกว้าง คือในช่วงความถี่ตั้งแต่ 4000-400 cm^{-1} ดังภาพประกอบ 4-5 พบว่าตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์ที่หน้าต่างการพิจารณา ทั้งสองค่า ช่วยกำจัดสัญญาณรบกวนออกไปได้ แต่จะเห็นว่าตัวกรองที่หน้าต่างพิจารณาเท่ากับ 11 ตำแหน่ง ทำให้พีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} มีขนาดลดลง ในขณะที่หน้าต่างการพิจารณา 5 ตำแหน่ง ไม่ทำให้ขนาดของพีคเปลี่ยนแปลง ดังนั้นตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์ที่หน้าต่างการพิจาร ณาเท่ากับ 5 ตำแหน่งจึงเหมาะสมที่สุดสำหรับการกรองสัญญาณ และผลการเปรียบเทียบ ลักษณะสเปกตรัมก่อนและหลังการ ปรับเส้นเรียบ ที่ความถี่ 2160-2120 cm^{-1} ซึ่งเป็นช่วงที่ไม่ปรากฏตำแหน่งพีค แสดงได้ดังภาพประกอบ 4-6



ภาพประกอบ 4-5 ผลการเปรียบเทียบขนาดพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังการปรับเส้นเรียบด้วยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ที่หน้าต่างการพิจารณาเท่ากับ 5 และ 11 ตำแหน่ง

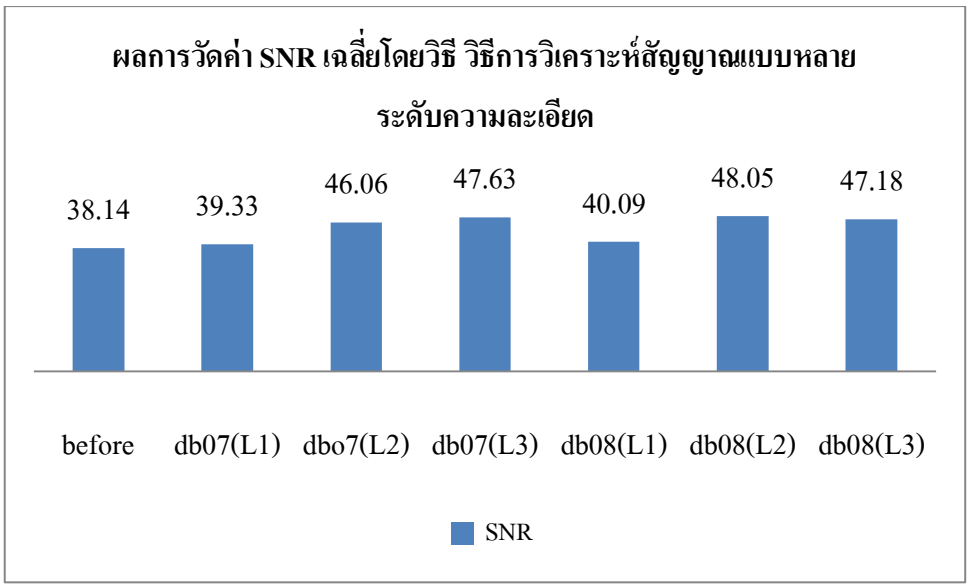


ภาพประกอบ 4-6 ผลการเปรียบเทียบลักษณะสเปกตรัมก่อนและหลังการปรับเส้นเรียบโดยวิธีตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ ที่หน้าต่างพิจารณาเท่ากับ 5 ตำแหน่ง

4.1.3.3 ผลการวัดค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด

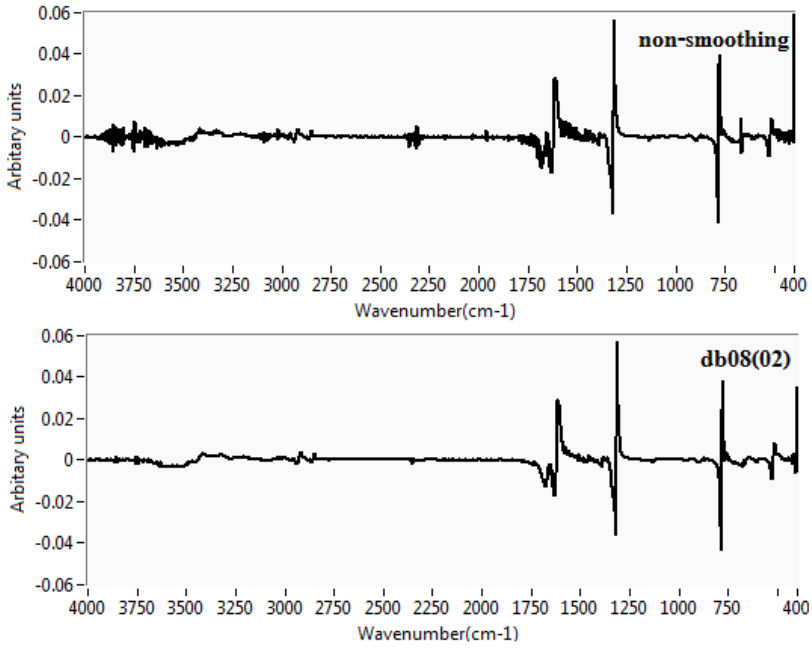
จากที่กล่าวไว้ข้างต้นว่า วิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด เป็นการวิเคราะห์สัญญาณทางความถี่ ซึ่งแบ่งออกเป็น 2 องค์ประกอบทางความถี่ คือองค์ประกอบความถี่สูง (Detail, D) และองค์ประกอบความถี่ต่ำ (Approximate, A) โดยในการทดลองนี้เป็นขั้นตอนการกำจัดสัญญาณรบกวน โดยการกำจัดองค์ประกอบความถี่สูงออกไป

การทดลองในส่วนของวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียดจะใช้รูปแบบการแปลงเวฟเล็ตแบบ Duabechies 07 และ 08 ซึ่งเป็นรูปแบบเวฟเล็ตที่คล้ายกับลักษณะโครงสร้างของอินฟราเรดสเปกตรัม นอกจากนั้นยังพบว่ารูปแบบเวฟเล็ตทั้งสองให้ผลการทดลองที่ผิดพลาดน้อยที่สุด และทดลองที่ระดับความละเอียดตั้งแต่ระดับ 01 ถึงระดับ 03 ในทั้งสองรูปแบบ จากนั้นจึงหาค่า SNR และผลการกรองความถี่ที่ดีที่สุดเช่นเดียวกับตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ ผลการวัดค่า SNR ของนิ่วทั้ง 10 ตัวอย่าง เปรียบเทียบกับค่า SNR ก่อนการปรับเส้นเรียบ สามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 4-7

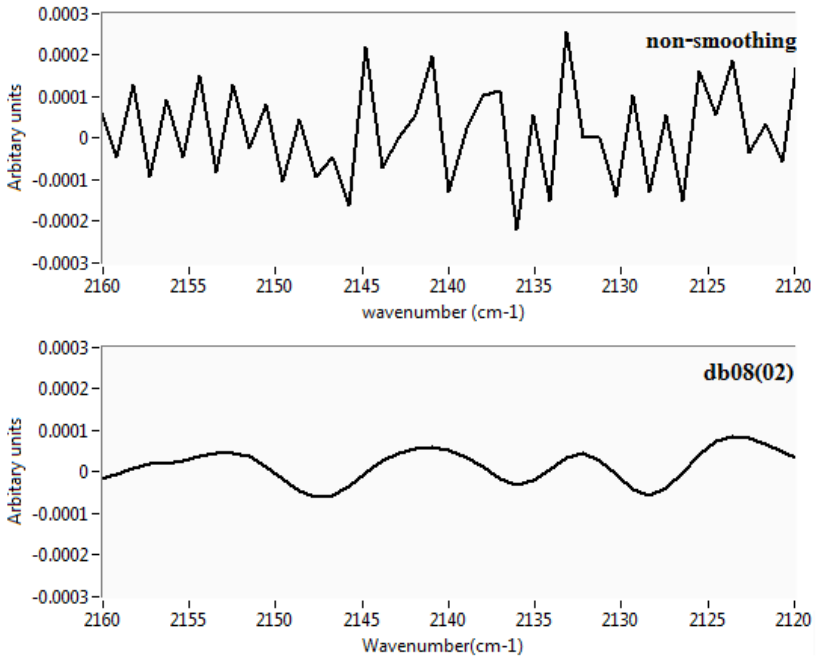


ภาพประกอบ 4-7 ค่า SNR เฉลี่ยของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังผ่านการกรองสัญญาณโดยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด

จากภาพประกอบ 4-7 จะเห็นว่าการปรับเส้นเรียบ ทำให้ค่า SNR ของอินฟราเรดสเปกตรัมมีค่าเพิ่มขึ้น โดยการแปลงเวฟเล็ตรูปแบบ db08(L2) ให้ผลค่า SNR ที่มากที่สุด เท่ากับ 48.05 และพบว่าการปรับเส้นเรียบ ด้วยวิธีนี้ไม่ทำให้ขนาดพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมเปลี่ยนไป ดังแสดงได้ดังภาพประกอบ 4-8 และได้แสดงผลการเปรียบเทียบลักษณะสเปกตรัมก่อนและหลัง การปรับเส้นเรียบ ในช่วงความถี่ 2160-2120 cm^{-1} ซึ่งเป็นช่วงที่ไม่ปรากฏตำแหน่งพีคดังภาพประกอบ 4-9



ภาพประกอบ 4-8 ผลการเปรียบเทียบขนาดพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมหลังการปรับเส้นเรียบด้วยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด (db08(L2))



ภาพประกอบ 4-9 ผลการเปรียบเทียบลักษณะสเปกตรัมก่อนและหลังการปรับเส้นเรียบด้วยวิธีการวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด (db08(L2))

4.2 การแปลผลเชิงคุณภาพ (Qualitative analysis)

ในการแปลผลเชิงคุณภาพ จะทำการทดลองเปรียบเทียบการระบุตำแหน่งการเกิดพีคจากกรณีที่อินฟราเรดสเปกตรัมไม่ได้ผ่านการประมวลผล สัญญาณขั้นต้น กับกรณีที่อินฟราเรดสเปกตรัมผ่านการประมวลผล สัญญาณ ขั้นต้น ทั้งสองวิธีและการหาอนุพันธ์อันดับสอง ซึ่งมีประสิทธิภาพในการจำแนกพีคที่เกิดการซ้อนทับกัน โดยจะทดลองในนิ่วที่เป็นนิ่วชนิดเดี่ยวจำนวน 7 ชนิด และนิ่วชนิดผสมจำนวน 1 ชนิด

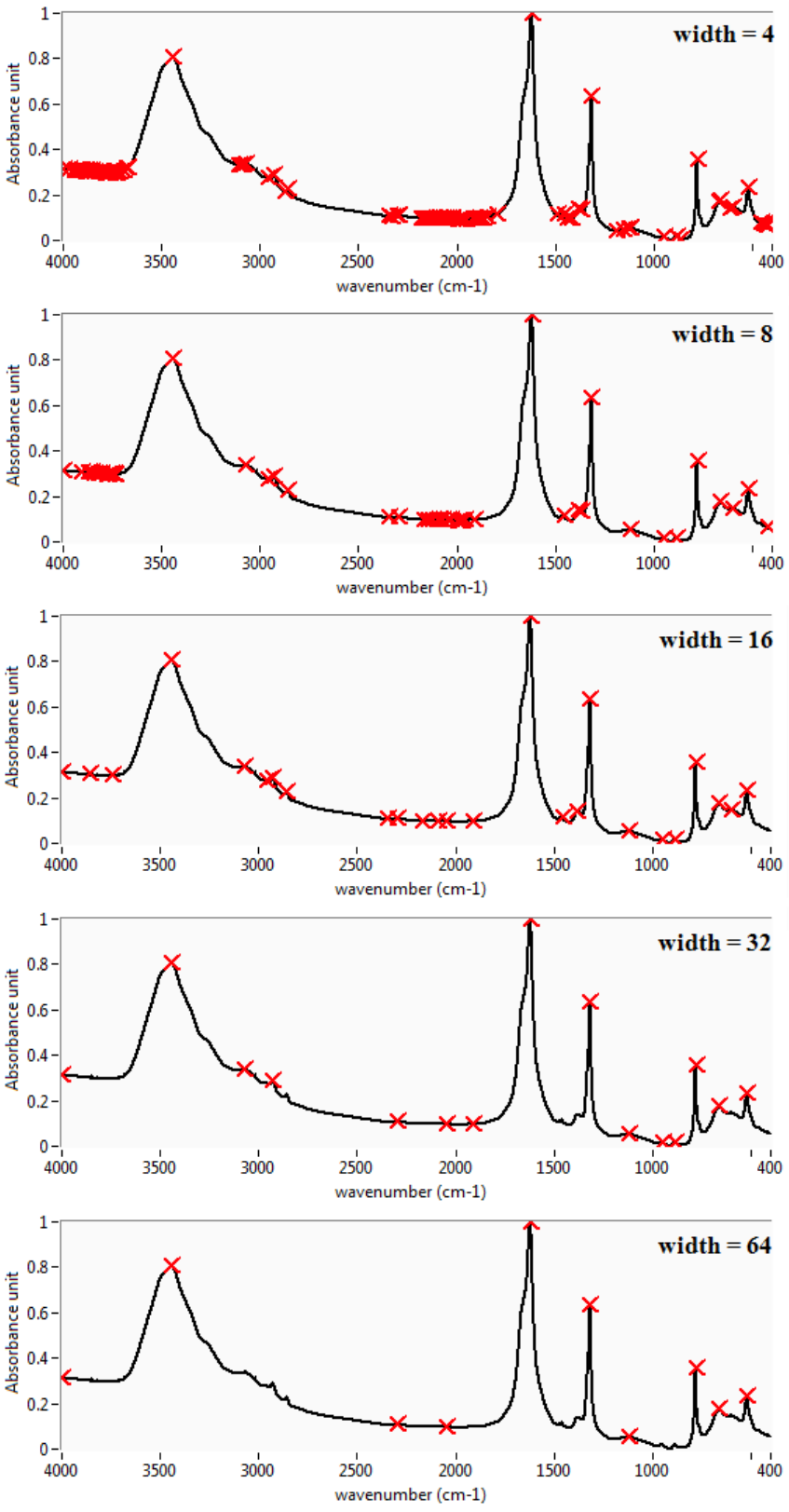
4.2.1 การกำหนดค่าเครื่องมือในโปรแกรม LabVIEW เพื่อระบุตำแหน่งพีค

4.2.1.1 กรณีอินฟราเรดสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น

การระบุตำแหน่งพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมที่ไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้นนั้น ลักษณะสเปกตรัมจะยังคงเดิมเหมือนที่บันทึกมาจากโปรแกรม EZ OMNIC ซึ่งอยู่ในรูปแบบสเปกตรัมของการดูดกลืนแสง โดยได้ใช้เครื่องมือ WA Multiscale Peak Detection VI ในโปรแกรม LabVIEW เป็นเครื่องมือช่วยในการระบุตำแหน่งพีค ซึ่งจะต้องมีการกำหนดขนาดความกว้างของหน้าต่างในการพิจารณา (width) และค่าต่ำสุดในการพิจารณา (threshold) ให้กับเครื่องมือ โดยเงื่อนไขของทั้งสองตัวแปรมีดังนี้

- Width ค่าที่จะกำหนดเป็นค่า width จะถูกบังคับให้เป็นค่าที่หารด้วย 2^n ลงตัว เมื่อ n เป็นจำนวนเต็ม
- Threshold ถ้าใช้เครื่องมือนี้สำหรับการระบุตำแหน่งพีค ตำแหน่งพีคใดมีขนาดน้อยกว่าค่า threshold จะถูกละทิ้ง แต่หากใช้สำหรับการระบุตำแหน่งท้องคลื่นสัญญาณ (valley) เครื่องมือนี้จะไม่สนใจค่าที่มากกว่าค่า threshold ที่กำหนดไว้

จากข้อกำหนดเบื้องต้น จึงได้ทำการทดลองเพื่อหาค่า width และ threshold ที่เหมาะสมกับการระบุตำแหน่งพีคสำหรับอินฟราเรดสเปกตรัมของตัวอย่างนิ่ว เนื่องจากรูปแบบอินฟราเรดสเปกตรัมอยู่ในรูปการดูดกลืนแสงค่า threshold จึงมีค่ามากกว่า 0 ผลการระบุตำแหน่งพีคจากการกำหนดค่า width ที่ค่าต่างๆ แสดงดังภาพประกอบ 4-10

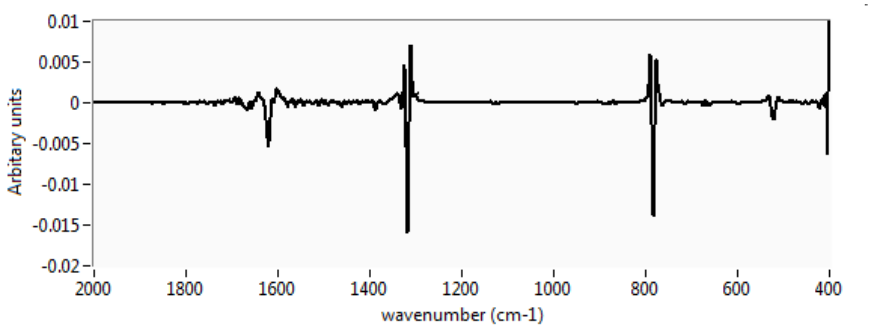


ภาพประกอบ 4-10 ผลการระบุตำแหน่งจากการกำหนดค่า width ค่าต่างๆ

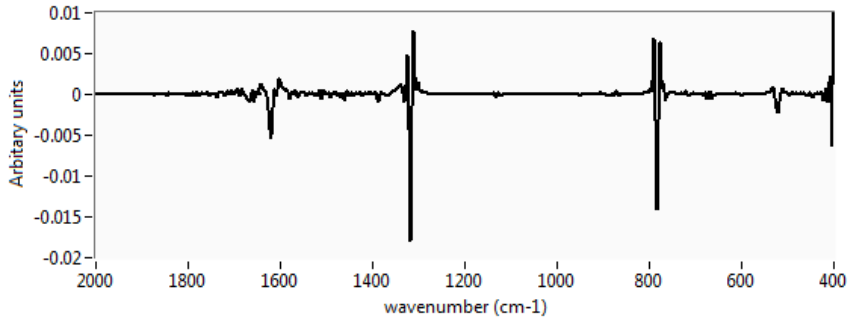
ภาพประกอบ 4-10 เป็นตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตตัวอย่างที่ 19 ซึ่งเครื่องหมาย X แสดงตำแหน่งพีคที่สามารถระบุได้จากการกำหนดค่า width ค่าต่างๆ เมื่อนำผลที่ได้มาเปรียบเทียบกับตำแหน่งพีคสำคัญของนิ่วชนิดนี้พบว่า ขนาดหน้าต่างพิจารณาเท่ากับ 32 ให้ผลการระบุตำแหน่งที่ดีที่สุด โดยสามารถระบุตำแหน่งพีคสำคัญได้ครบทุกตำแหน่งเมื่อมีจำนวนพีคที่ นับได้โดยเครื่องมือระบุตำแหน่ง น้อยที่สุด จากนั้นจึงปรับค่า threshold เป็นค่าต่างๆ ตั้งแต่ 0.1 Absorbance unit เป็นต้นไป เพื่อหาว่าค่า threshold ที่เหมาะสมควรเป็นค่าใด ซึ่งพบว่าเมื่อปรับค่า threshold ไปที่ 0.1 Absorbance unit แล้ว ไม่สามารถระบุตำแหน่งพีคได้ 2 ตำแหน่ง เนื่องจากเป็นตำแหน่งพีคที่ มีค่าความเข้มข้นน้อยมากๆ (weak peak) ได้แก่ตำแหน่ง 886 และ 950 cm^{-1} จากการทดลองนี้จึงได้กำหนดค่า threshold เท่ากับศูนย์ และกำหนดค่า width เท่ากับ 32 สำหรับทดลองในนิ่วชนิดอื่นๆต่อไป

4.2.1.2 กรณีอินฟราเรดสเปกตรัมที่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น และผ่านการทำอนุพันธ์อันดับสอง

การทำอนุพันธ์อันดับสองจะทำให้จุดพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมอยู่ใต้เส้น ค่าความเข้มข้นเท่ากับศูนย์ และจากการประมวลผลสัญญาณขั้นต้นของอินฟราเรดสเปกตรัมในขั้นตอนการปรับเส้นเรียบโดยเทคนิคที่แตกต่างกันจำนวน 2 วิธีการ ลักษณะอินฟราเรดสเปกตรัม จากการใช้เทคนิคตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์และการใช้เทคนิควิเคราะห์หลายระดับความละเอียดแสดง ดังภาพประกอบ 4-11 และภาพประกอบ 4-12 ตามลำดับโดยแสดงในช่วงความถี่ 2000-400 cm^{-1}



ภาพประกอบ 4-11 อินฟราเรดสเปกตรัมที่ใช้เทคนิคตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์และผ่านการทำอนุพันธ์อันดับสอง



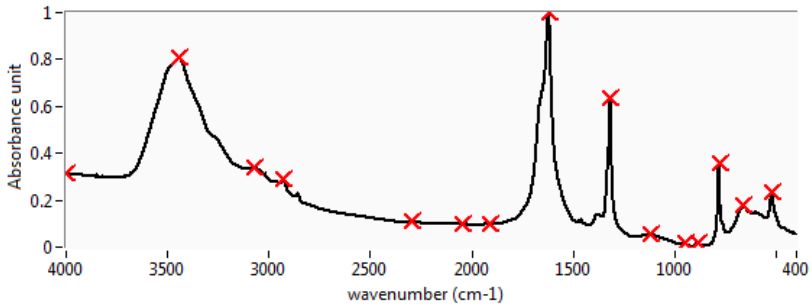
ภาพประกอบ 4-12 อินฟราเรดสเปกตรัมที่ใช้เทคนิควิเคราะห์หลายระดับความละเอียดและผ่านการทำอนุพันธ์อันดับสอง

จากภาพประกอบ 4-11 และ 4-12 จะเห็นได้อย่างชัดเจนว่าพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมอยู่ในฝั่งค่าลบและขนาดของพีคมีค่าน้อยมาก เมื่อเทียบกับขนาดเดิม อันเนื่องมาจากการทำอนุพันธ์สองครั้ง ดังนั้น จึงกำหนด ค่า threshold เป็นค่าที่น้อยกว่าศูนย์ และกำหนด ค่า width เช่นเดียวกับกรณีอินฟราเรดสเปกตรัมไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น ผลการทดลองพบว่าค่า threshold มากที่สุดที่สามารถระบุตำแหน่งพีคได้ถูกต้องเท่ากับ -0.0001 Absorbance unit

4.2.2 การแปลผลเชิงคุณภาพของอินฟราเรดสเปกตรัมกรณีไม่ผ่านการประมวลผลขั้นต้น

4.2.2.1 นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต

นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตมีตำแหน่งพีคที่ใช้บ่งบอกว่าเป็นนิ่วชนิดนี้อยู่ที่บริเวณความถี่ 518, 662, 780, 885, 951, 1316, 1615 และ 3442 cm^{-1} โดยทำการทดลองกับ ตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมทั้งหมด 10 ตัวอย่าง

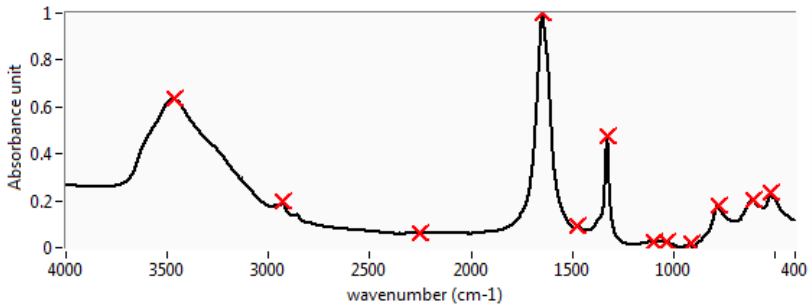


ภาพประกอบ 4-13 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต

ภาพประกอบ 4-13 เป็นตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของ นิ่วแคลเซียมออกซ าเลตโมโนไฮเดรต ตัวอย่างที่ 19 โดยเครื่องหมาย X แสดงผลการหาตำแหน่งพีค ที่ได้ และสามารถระบุตำแหน่งพีคสำคัญได้ถูกต้องทั้ง 8 ตำแหน่งความถี่ ได้แก่ตำแหน่ง 519.59, 662.34, 780.97, 885.14, 951.69, 1316.28, 1620.09 และ 3442.03 cm^{-1}

4.2.2.2 นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต

นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตมีตำแหน่งพีคที่ใช้บ่งบอกว่าเป็นนิ่วชนิดนี้อยู่ที่ความถี่ 518, 610, 777, 915, 1326, 1472, 1646 และ 3436 cm^{-1} โดยทำการทดลองกับ ตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมทั้งหมด 7 ตัวอย่าง

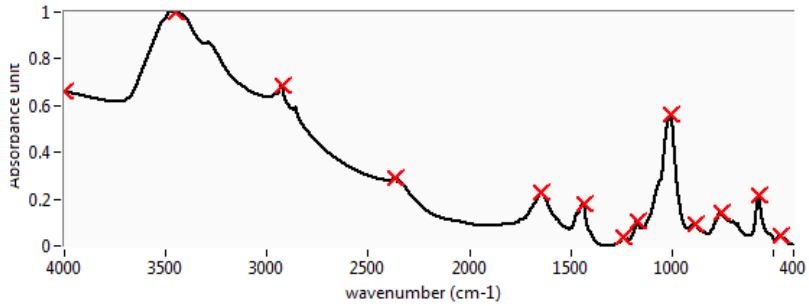


ภาพประกอบ 4-14 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต

จากตำแหน่งพีคที่ได้ใน ภาพประกอบ 4-14 สามารถระบุตำแหน่งการเกิดพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตได้ ครบทั้ง 8 ตำแหน่ง ได้แก่ 518.63, 608.33, 780.01, 916.08, 1326.88, 1475.42, 1647.10 และ 3468.07 cm^{-1} โดยเป็นตัวอย่างของสเปกตรัมนิ่วแคลเซียมออกซลาเลตไดไฮเดรตตัวอย่างที่ 26

4.2.2.3 นิ่วสตูไวท์

ตำแหน่งความถี่ที่บ่งบอกว่าเป็นนิ่วสตูไวท์คือ 572, 770, 872, 1005, 1435, 1467, 1634 และ 2360 cm^{-1} ตัวอย่างหน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งการเกิดพีคของนิ่วชนิดนี้แสดงดังภาพประกอบ 4-15

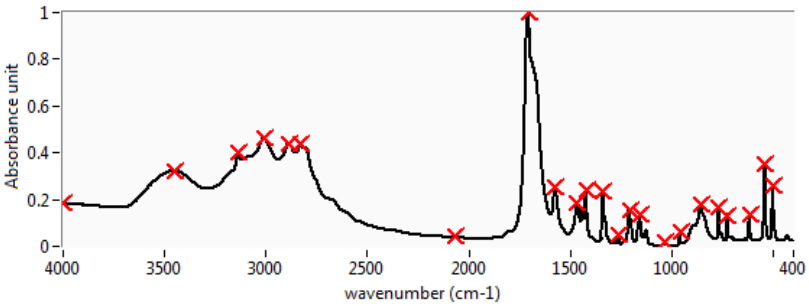


ภาพประกอบ 4-15 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วสตูไวท์

จากภาพประกอบ 4-15 ปรากฏว่าสามารถระบุตำแหน่งการเกิดพีคของนิ่วสตูไวท์ 7 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่ที่ความถี่ 572.64, 758.79, 886.10, 1006.67, 1435.87, 1647.1 และ 2364.69 cm^{-1} โดยตัวอย่างสเปกตรัมที่แสดงเป็นของนิ่วตัวอย่างที่ 8 และทำการทดลองกับตัวอย่างนิ่วสตูไวท์อีก 2 ตัวอย่างเช่นเดียวกัน

4.2.2.4 นิ่วแซนทีน

ตำแหน่งพีคที่ใช้ระบุว่าเป็นนิ่วแซนทีนมีด้วยกันทั้งหมด 8 ตำแหน่ง ได้แก่ตำแหน่งความถี่ 855, 959, 1120, 1155, 1208, 1261,1706 และ 3009 cm^{-1} สเปกตรัมของนิ่วแซนทีนมีเพียงตัวอย่างเดียวคือตัวอย่างที่ 210 ผลการระบุตำแหน่งแสดงในภาพประกอบ 4-16

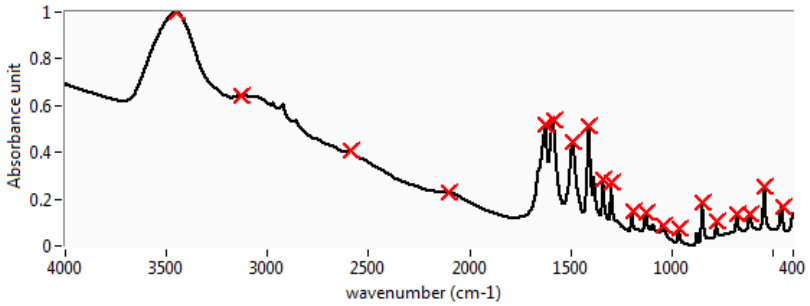


ภาพประกอบ 4-16 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแซนทีน

จากภาพประกอบ 4-16 จะเห็นว่ามีพีคจำนวนมากปรากฏอยู่ที่ช่วงความถี่ 2000-400 cm^{-1} ผลที่ได้จากการหาตำแหน่งพีค ของนิ่วชนิดนี้ ได้ทั้งหมด 7 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่ตำแหน่งความถี่ 855.24, 959.41, 1155.2, 1208.25, 1261.3, 1706.9 และ 3009.94 cm^{-1}

4.2.2.5 นิ่วซิสทีน

นิ่วซีสทีนมีโครงสร้างที่โดดเด่นคือพันธะ S-S ซึ่งจะปรากฏอยู่ที่ความถี่ 454 cm^{-1} นอกจากนั้นก็มีพีคที่เกิดจากพันธะอื่นๆ ที่ความถี่ 1580, 1617, 2587 และ 3406 cm^{-1} อีกด้วย ผลการระบุตำแหน่งการเกิดพีคแสดงได้ดังภาพประกอบ 4-17

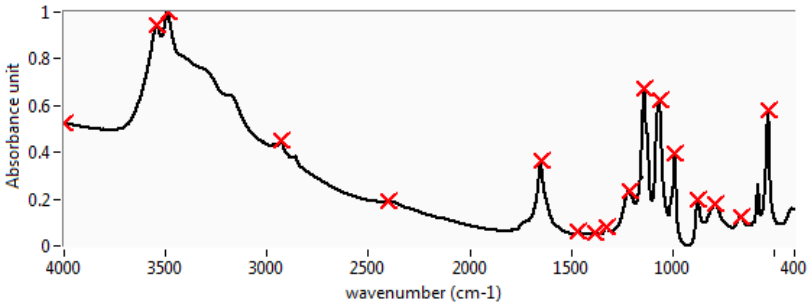


ภาพประกอบ 4-17 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วซิสทีน

แม้จะมีพีคปรากฏอยู่เป็นจำนวนมากที่ช่วงความถี่ 2000-400 cm^{-1} แต่ตำแหน่งพีคที่บ่งชี้ว่าเป็นนิ่วซิสทีนมีเพียง 5 ตำแหน่งข้างต้น นอกจากนั้นจะปรากฏพีคจำนวนมากในช่วง ความถี่ 1500-400 cm^{-1} ซึ่งเป็นย่านรอยนิ้วมือและย่านอะโรแมติก จากผลการทดลองพบว่า มีเพียงตำแหน่งพีคที่ความถี่ 3406 cm^{-1} เท่านั้นที่ไม่สามารถตรวจจับได้ เนื่องจากมีการเลื่อนตำแหน่งออกไปอยู่ที่ความถี่ 3450 cm^{-1} และเกิดกรณีเช่นเดียวกันนี้กับตัวอย่างของนิ่วชนิดนี้ทั้ง 3 ตัวอย่าง

4.2.2.6 นิ่วบรูไชต์

นิ่วบรูไชต์ มีโครงสร้างทางเคมีคือ $CaHPO_4*2H_2O$ ดังนั้นพีค หลักๆ ที่ปรากฏบนสเปกตรัมจะมาจากการสั่นของหมู่ฟอสเฟต (PO_4) ได้แก่ที่ความถี่ 527 กับ 577 cm^{-1} อันเกิดจากการสั่นแบบ deformation ส่วนการสั่นแบบยืดจะปรากฏอยู่ที่บริเวณความถี่สูง โดยจะแบ่งออกเป็น 4 พีคได้แก่บริเวณ 1000 cm^{-1} ที่ความถี่ 985, 871 และ 655 cm^{-1} ซึ่งพีคตำแหน่งสุดท้ายอาจจะปรากฏไม่ชัดเจน นอกจากนั้นก็เป็นพีคที่เกิดจากการสั่นของพันธะ OH ที่ความถี่ 1648, 3480 และ 3531 cm^{-1} หน้าต่างแสดงผลจากการระบุตำแหน่งพีคแสดงดังภาพประกอบ 4-18

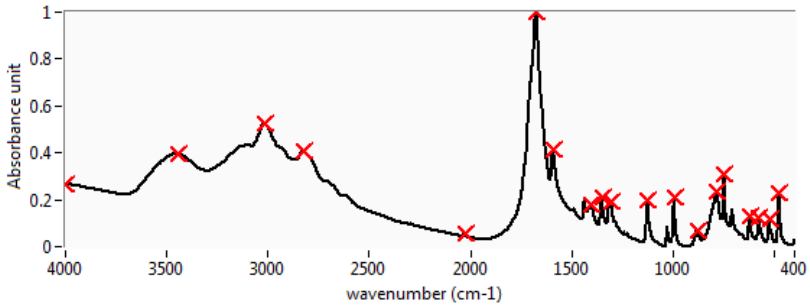


ภาพประกอบ 4-18 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วบรูไชต์

จากภาพประกอบ 4-18 นั้นพบว่ามีตำแหน่งการเกิดพีคทั้งหมด 17 ตำแหน่ง โดยสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วบูไชต์ได้ 7 จาก 8 ตำแหน่ง ตำแหน่งที่ไม่สามารถตรวจจับได้มีเพียงที่ความถี่ 577 cm^{-1} เท่านั้น

4.2.2.7 นิ่วยูริก

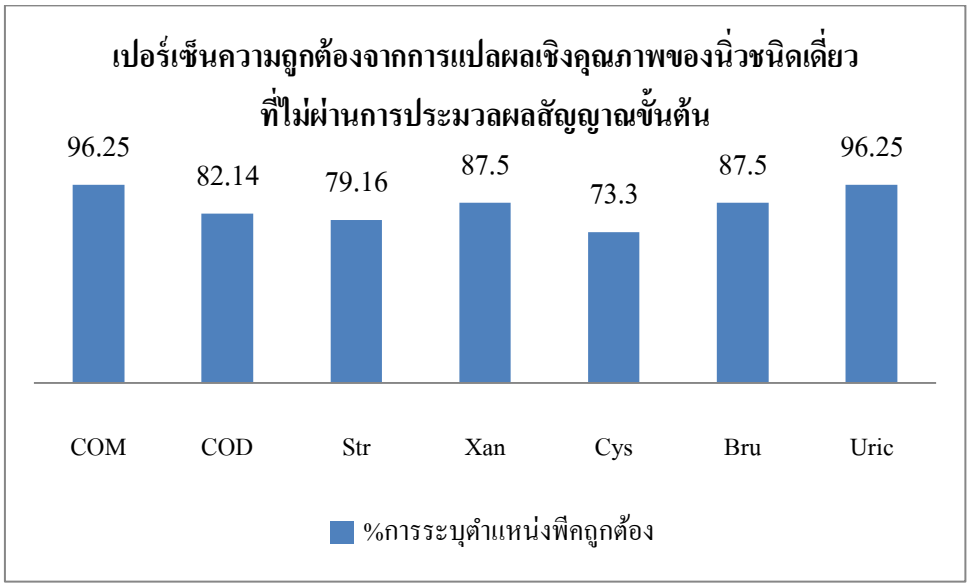
นิ่วยูริกเป็นนิ่วที่มีโครงสร้างแบบ วงแหวน ดังนั้นจะปรากฏพีคจำนวนมากบริเวณย่านอะโรแมติก หรือที่ช่วงความถี่ 1000-400 cm^{-1} นอกจากนั้นตำแหน่งพีคสำคัญในการระบุว่าเป็นนิ่วยูริกคือตำแหน่ง 1666 cm^{-1} ซึ่งเป็นพีคที่เกิดจากหมู่เอไมด์ (Amide I band) จากผลการทดลองพบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วยูริกได้ 8 จาก 9 ตำแหน่ง หน้าต่างแสดงผลเป็นดังภาพประกอบ 4-19 ตัวอย่างของนิ่วยูริกมีทั้งหมด 10 ตัวอย่าง



ภาพประกอบ 4-19 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วยูริก

จากผลการทดลองข้างต้นสามารถนำมาคำนวณค่าเปอร์เซ็นการระบุตำแหน่งที่ถูกต้องของนิ่วชนิดเดี่ยวแต่ละชนิด โดยคำนวนจากตำแหน่งพีคที่สามารถระบุได้เปรียบเทียบกับตำแหน่งพีคสำคัญทั้งหมดของนิ่วแต่ละชนิด ผลการคำนวนแสดงดังภาพประกอบ 4-20 ซึ่งจะเห็นว่าผลการระบุตำแหน่งในนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตและนิ่วยูริคมีค่ามากถึงร้อยละ 96.25 ในขณะที่นิ่วชนิด

แคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต นิ่วแซนทีน และนิ่วบรูไชต์ มีความถูกต้องมากกว่า ร้อยละ 80 ในขณะที่นิ่วสตรูไวท์ และนิ่วซีสทีนสามารถระบุตำแหน่งพีคถูกต้องอยู่ในช่วงร้อยละ 70

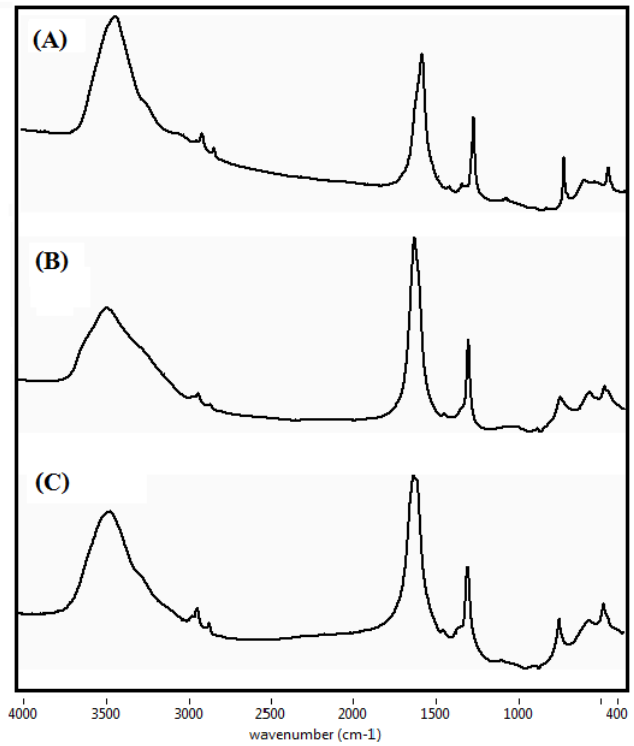


ภาพประกอบ 4-20 เปอร์เซ็นความถูกต้องในการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวที่ไม่ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น

4.2.2.8 นิ่วผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต

โดยทั่วไปการแปลผลเชิงคุณภาพของนิ่วชนิดต่างๆ จะต้องสามารถระบุตำแหน่งพีคสำคัญของนิ่วชนิดนั้นๆได้ แต่ในกรณีนิ่วผสมชนิดแคลเซียมจะมีตำ แหน่งพีคที่เหมือนกันบางตำแหน่งซึ่งเป็นผลมาจากองค์ประกอบทางเคมี ของนิ่วทั้งสองชนิดที่มีโครงสร้างทางเคมีคล้ายกัน จากภาพประกอบ 4-21 จะเห็นว่าลักษณะสเปกตรัมของนิ่วทั้งสามชนิดแทบจะไม่แตกต่างกัน โดยตำแหน่งพีคที่มองเห็นได้ชัดเจนได้แก่ที่ความถี่ 517, 780, 1319(COM)/1324(COD) และที่ความถี่ 1619(COM)/1624(COD) cm^{-1} โดยเกิดจากการสั่นแบบยืดของพันธะ Ca-O การสั่นแบบงอของพันธะ O-C=O การสั่นแบบยืดสมมาตรของพันธะ C=O และการสั่นแบบยืดไม่สมมาตรของพันธะ C=O ตามลำดับ พันธะเหล่านี้ล้วนเป็นพันธะที่อยู่ในหมู่ออกซาเลตทั้งสิ้น นอกจากนั้นนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตจะมีพีคที่ปรากฏ(ไม่ชัดเจน) จำนวน 4 ตำแหน่งบริเวณ ช่วงความถี่ 3600-3000 cm^{-1} ในขณะที่นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตปรากฏเพียงพีคเดียวในช่วงความถี่เดียวกัน

นอกจากนั้นนิ่วแคลเซียมออกซาเ ลตโมโนไฮเดรตจะปรากฏพีคอีกสองตำแหน่งคือที่ความถี่ 850 และ 950 cm^{-1} ซึ่งไม่ปรากฏในนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต



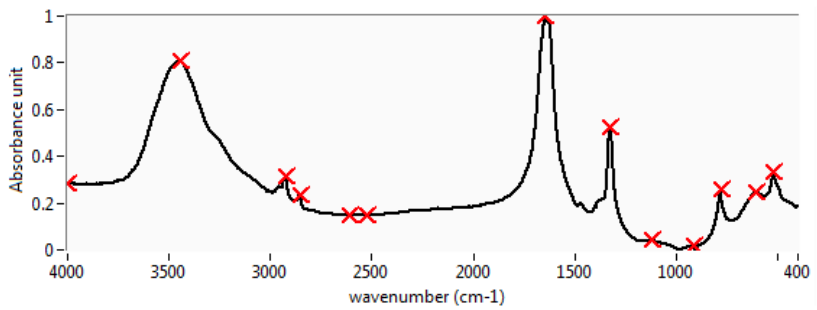
ภาพประกอบ 4-21 (A) อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วออกซาเลตโมโนไฮเดรต (COM) (B) อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วออกซาเลตไดไฮเดรต (COD) (C) อินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วผสมระหว่างนิ่วออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วออกซาเลตไดไฮเดรต (COM+COD)

ตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วชนิดผสมที่นำมาทำการทดลองมีทั้งหมด 17 ตัวอย่าง จากการทดสอบด้วยโปรแกรม kidney stone 1.3 ร่วมกับโปรแกรม EZ OMNIC พบว่าแต่ละตัวอย่างจะมีปริมาณองค์ประกอบในขนาดที่แตกต่างกัน ดังตารางที่ 4.2

ตาราง 4.2 อัตราส่วนร้อยละของปริมาณอ งค์ประกอบ นิ่วชนิดผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต และส่วนประกอบไม่ทราบชนิด

ตัวอย่างนิ่วที่	%(COM/COD)	ส่วนประกอบไม่ทราบชนิด (Unknown)
13	72/22	6
22	10/81	9
34	10/80	10
62	20/70	10
77	12/82	6
79	84/12	4
90	10/84	6
93	10/81	9
98	84/10	6
100	10/80	10
101	10/80	9
104	84/12	4
105	84/12	4
106	14/80	6
107	31/63	6
161	73/21	6
167	62/29	9

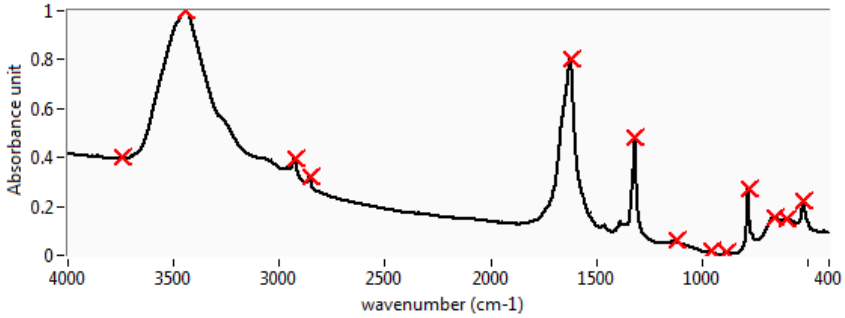
จากสเปกตรัมตัวอย่างที่ 107 ซึ่งมีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตเท่ากับ 31/63 ผลการระบุตำแหน่งพีคสามารถ แสดง ดังภาพประกอบ 4-22



ภาพประกอบ 4-22 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมนิ่วชนิดผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ตัวอย่างที่ 107

จากภาพประกอบ 4-22 พบว่าผลการทดลองที่ได้ระบุ ตำแหน่งพีคในนิ่วทั้งสองชนิด โดยสามารถระบุตำแหน่งพีคของ นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ได้จำนวน 6 ตำแหน่ง ที่ความถี่ 517, 603, 780, 914, 1324 และ 1644 cm^{-1} และแสดงอยู่ในส่วนของ นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต 3 ตำแหน่ง ได้แก่ที่ความถี่ 517, 780 และ 3444 cm^{-1} โดยตำแหน่งพีคที่มีเหมือนกันคือ 517 และ 780 cm^{-1} เป็นตำแหน่งพีคที่บ่งบอกความเป็นออกซาเลตของสารตัวอย่าง ดังนั้นตำแหน่งพีคที่ได้ จึงไม่สามารถบอกได้ว่ามีส่วนประกอบของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้อย่างแน่ชัด เนื่องจากปรากฏความเป็นโมโนไฮเดรตเพียง 1 ตำแหน่งเท่านั้น

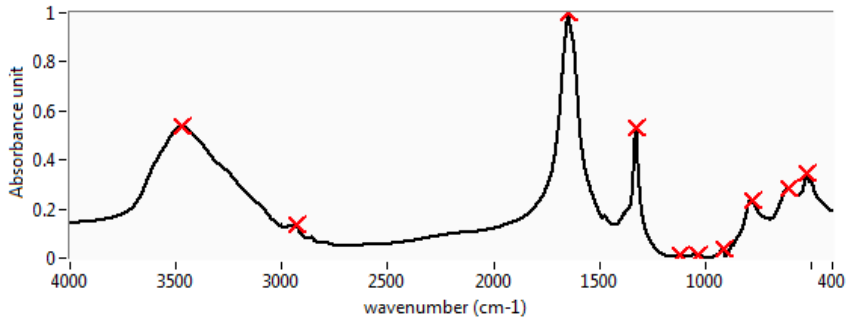
ทำการทดลองอีกครั้งด้วยนิ่วชนิดผสมชนิดนี้ตัวอย่างที่ 79 โดยมีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 84/12 และ 4% เป็นสารที่ไม่ทราบชนิด ผลการระบุตำแหน่งพีคแสดงดังภาพประกอบ 4-23



ภาพประกอบ 4-23 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมนิ่วชนิดผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ตัวอย่างที่ 79

ผลจากการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดผสมตัวอย่างที่ 79 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซี ยมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้ 7 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่พีคที่ความถี่ 518.63, 780.97, 887.07, 954.58, 1316.28, 1622.02 และ 3441.07 cm^{-1} แต่ในส่วนของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตนั้น ปรากฏตำแหน่งพีคแค่เพียง 2 ตำแหน่ง คือพีคที่ความถี่ 518.63 และ 780.97 cm^{-1} เท่านั้น ซึ่งตำแหน่งพีคทั้งสองนี้ก็เป็นพีคที่เกิดจากหมู่ออกซาเลต ไม่สาม ารถระบุความเป็นไดไฮเดรตของนิ่วได้

จากนั้นทำการทดลองกับนิ่วชนิดผสมตัวอย่างที่ 101 ที่มีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 10/81 และ 9% เป็นสารที่ไม่ทราบชนิด ผลการระบุตำแหน่งพีคแสดงดังภาพประกอบ 4-24



ภาพประกอบ 4-24 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของอินฟราเรดสเปกตรัมนิ่วชนิดผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ตัวอย่างที่ 101

จากภาพประกอบ 4-24 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้เพียง 2 ตำแหน่งคือความถี่ 517.66 และความถี่ 780.01 cm^{-1} แต่สามารถระบุพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตได้ ถึง 7 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่ ความถี่ 517.66, 606.40, 780.01, 915.04, 1325.92, 1645.17 และ 3473.86 cm^{-1} จากตำแหน่งพีคดังกล่าวไม่สามารถระบุความเป็นนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้

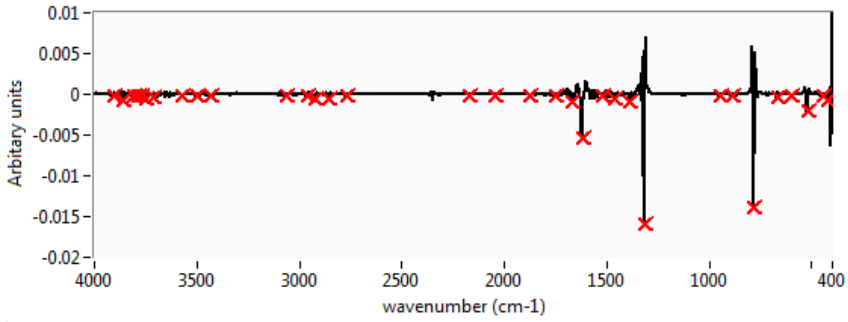
จากผลการทดลองข้างต้นจะเห็นว่าการแปลผลเชิงคุณภาพในกรณีนิ่วชนิดเดี่ยวจากอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้นนั้น ไม่สามารถทำได้ เนื่องจากการซ้อนทับของตำแหน่งพีค พบว่าหากส่วนประกอบของนิ่วชนิดใดมีปริมาณมากกว่า ก็จะทำให้ผลการแปลผลบ่งชี้ว่ามีเพียงนิ่วชนิดนั้นเท่านั้น

4.2.3 การแปลผลเชิงคุณภาพของอินฟราเรดสเปกตรัม หลังผ่านการ ประมวลผลสัญญาณขั้นต้นและการทำอนุพันธ์อันดับสอง

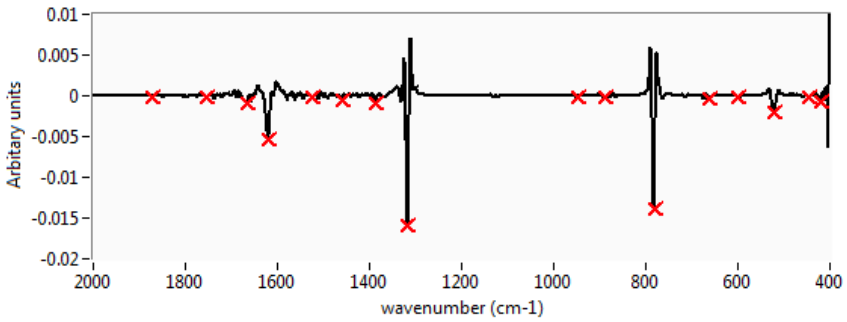
การระบุตำแหน่งพีคจากอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วในทางเ ดินปัสสาวะแต่ละชนิด เมื่อผ่านขั้นตอนการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น และการทำอนุพันธ์อันดับสองมีรูปแบบเดียวกันกับการระบุตำแหน่งพีคกรณีที่อินฟราเรดสเปกตรัมไม่ได้ผ่านการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น โดยได้ทำการทดลองทั้งจากกรณีที่มีการกรองสัญญาณโดยตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์และวิ ธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียด

4.2.3.1 กรณีใช้ตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์

ตัวอย่างหน้าต่างแสดงผลการทดลองเป็นอินฟราเรดสเปกตรัมของ นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตตัวอย่างที่ 19 ในช่วงความถี่ 4000-400 cm^{-1} แสดงดังภาพประกอบ 4-25 จะเห็นว่าไม่สามารถมองเห็นตำแหน่งพีคได้ชัดเจน โดยเฉพาะในช่วงความถี่ตั้งแต่ 4000-2000 cm^{-1} เนื่องจากขนาดของพีคมีขนาดเล็กมากซึ่งเป็นผลมาจากการทำอนุพันธ์อันดับสอง แต่สามารถเห็นการระบุตำแหน่งพีคที่ชัดเจน และแสดงตำแหน่งพีคสำคัญ จากหน้าต่างแสดงผลในช่วงความถี่ 2000- 400 cm^{-1} ดังภาพประกอบ 4-26 โดยผลการระบุตำแหน่งพีคพบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคได้ครบทั้งหมดทั้ง 8 ตำแหน่ง และทำการทดลองจากตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วชนิดนี้จำนวน 10 ตัวอย่าง

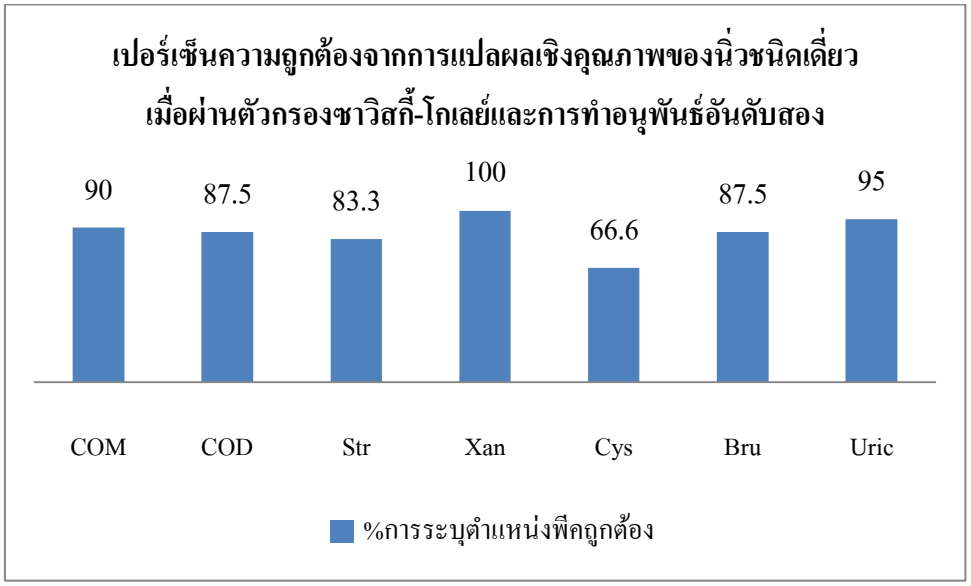


ภาพประกอบ 4-25 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตในช่วงความถี่ 4000-400 cm^{-1}



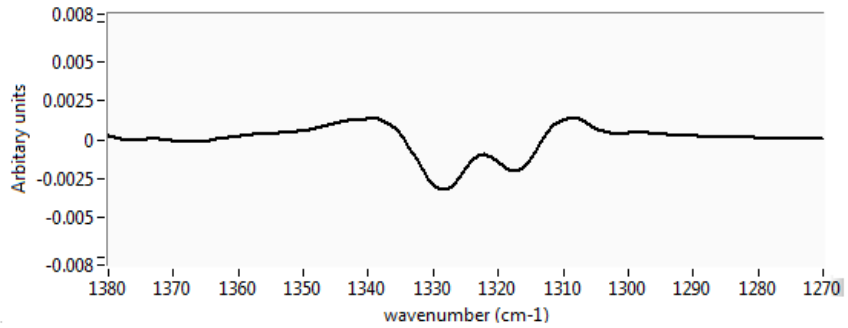
ภาพประกอบ 4-26 หน้าต่างแสดงผลการหาตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ในช่วงความถี่ 2000-400 cm^{-1}

จากนั้นทำการทดลองโดยใช้ตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วชนิด อื่นๆ ได้แก่ นิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต (7 ตัวอย่าง), นิ่วสตรูไวต์ (3 ตัวอย่าง), นิ่วแซนทีน (1 ตัวอย่าง), นิ่วซิสทีน (3 ตัวอย่าง), นิ่วบรูไชต์ (1 ตัวอย่าง) และนิ่วยูริก (10 ตัวอย่าง) ผลการทดลองการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวเมื่อผ่านตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์และการทำอนุพันธ์อันดับสองแสดงดังภาพประกอบ 4-27



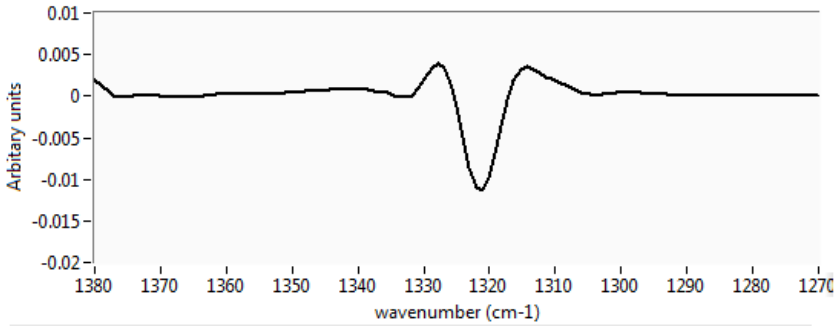
ภาพประกอบ 4-27 เปอร์เซ็นความถูกต้องในการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวที่ผ่านตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์และการทำอนุพันธ์อันดับสอง

ในกรณีของนิ่วชนิดผสมนั้นได้ ทำการทดลองกับนิ่วชนิดผสมตัวอย่างที่ 107 ซึ่งมีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 31/63 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้ถึง 6 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่ความถี่ 516.70, 668.13, 780.01, 888.03, 1617.2 และ 3432.39 cm^{-1} และสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตได้ถึง 7 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่ 516.70, 617.97, 780.01, 911.18, 1326.88, 1473.49 และ 1645.17 cm^{-1} สิ่งที่สามารถสังเกตได้อย่างหนึ่งคือลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} จะแสดงพีคจำนวนสองพีคคือความถี่ 1315 cm^{-1} ที่เป็นตำแหน่งพีคที่ปรากฏในนิ่วชนิดโมโนไฮเดรต และที่ความถี่ 1326 cm^{-1} สำหรับนิ่วชนิดไดไฮเดรต ดังภาพประกอบ 4-28



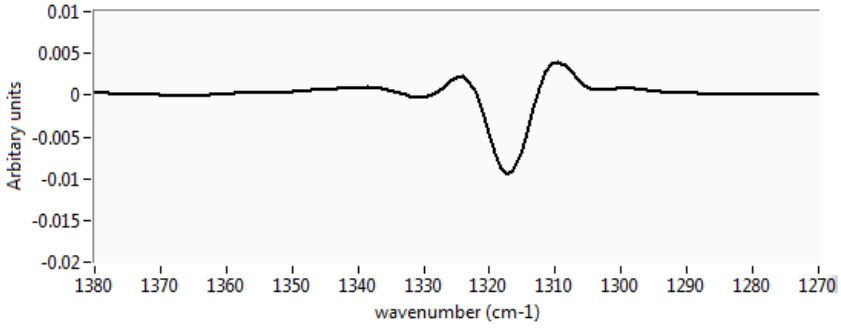
ภาพประกอบ 4-28 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 107

จากนั้นทำการทดลองกับนิ่วผสมตัวอย่างที่ 167 ที่มีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 62/29 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้ทั้ง 7 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่ความถี่ 518.63, 660.41, 784.83, 888.03, 947.83, 1624.91 และ 3428.53 cm^{-1} และสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตได้ 6 จาก 8 ตำแหน่งได้แก่ 518.63, 784.83, 1321.1, 1474.45 และ 1645.13 cm^{-1} ซึ่งจะเห็นว่าตำแหน่ง พีคที่ปรากฏในช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} เป็นพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตเท่านั้น ดังภาพประกอบ 4-29



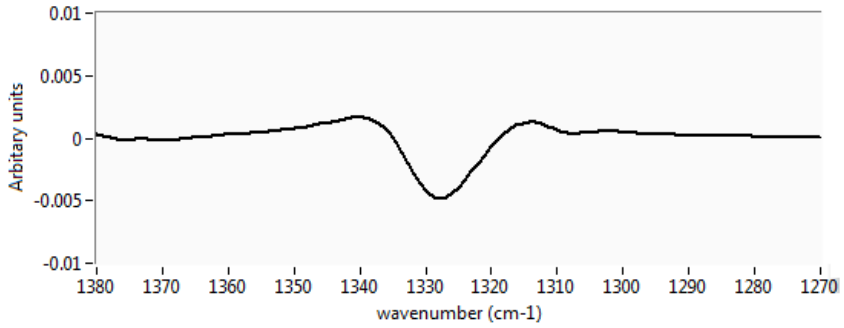
ภาพประกอบ 4-29 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 167

ทำการทดลองกับนิ่วผสมตัวอย่างที่ 79 ที่มีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 84/12 สามารถระบุตำแหน่งพีคในส่วนของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตครบทั้ง 8 ตำแหน่ง และสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตได้ 7 จาก 8 ตำแหน่ง แต่ลักษณะพีคที่ความถี่ 1300 cm^{-1} ปรากฏเฉพาะพีคของนิ่วชนิดโมโนไฮเดรตที่ความถี่ 1317.24 cm^{-1} เท่านั้น ดังภาพประกอบ 4-30



ภาพประกอบ 4-30 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 79

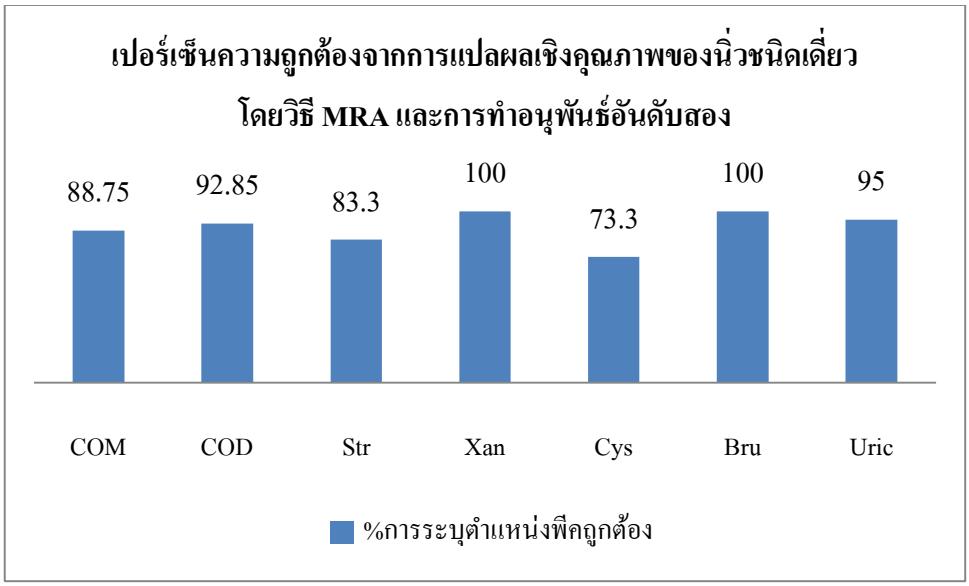
ทดลองเช่นเดียวกับข้างต้นกับตัวอย่างสเปกตรัมของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 101 โดยมีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 10/81 ปรากฏว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้เพียง 3 ตำแหน่ง ได้แก่พีคที่ความถี่ 517.66, 778.08 และ 1620.09 cm^{-1} ในขณะที่สามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดไดไฮเดรตได้ครบทั้ง 8 ตำแหน่ง ดังนั้นพีคที่ปรากฏอยู่ในช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} จึงเป็นพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตที่ความถี่ 1327.85 cm^{-1} ดังภาพประกอบ 4-31



ภาพประกอบ 4-31 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 101

4.2.3.2 กรณีใช้วิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียด

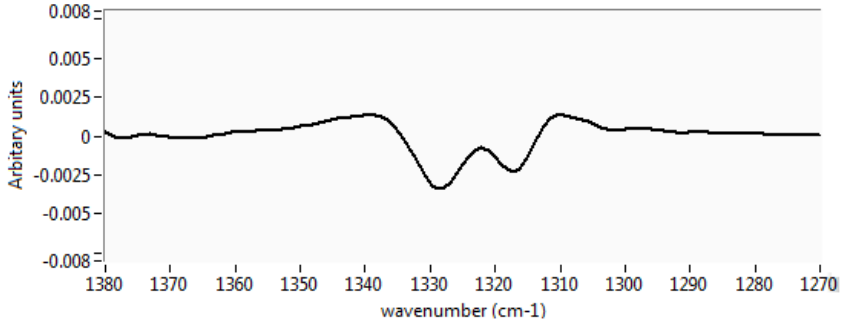
ในการทดลองนี้จะใช้ตัวอย่างและวิธีการแบบเดียวกับกรณีใช้ตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์ในการกรองสัญญาณ โดย ผล การ ระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวสามารถแสดงได้ดังภาพประกอบ 4-32



ภาพประกอบ 4-32 เปอร์เซ็นความถูกต้องในการระบุตำแหน่งพีคของนิ่วชนิดเดี่ยวโดยใช้วิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียดและการทำอนุพันธ์อันดับสอง

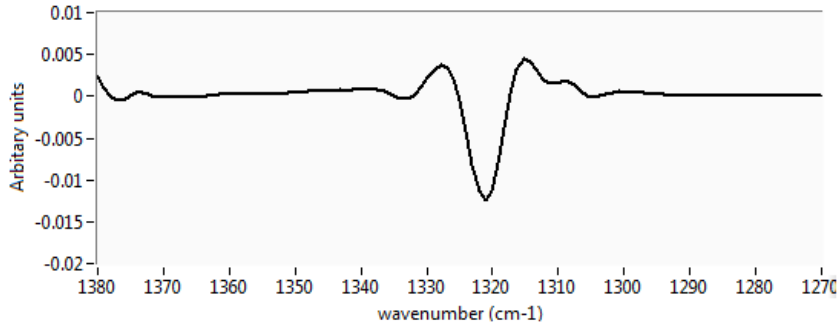
ในส่วนของการระบุตำแหน่งพีค กรณี นิ่วชนิดผสม นั้น ตัวอย่างการทดลองแรกคือตัวอย่างที่ 107 มีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตเท่ากับ 31/63 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต

ได้ 7 จาก 8 ตำแหน่ง และระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ได้ทั้ง 8 ตำแหน่ง นอกจากนั้นยังสามารถจำแนกพีคที่ตำแหน่งความถี่ 1300 cm^{-1} โดยปรากฏที่ความถี่ 1317.4 และ 1328.6 cm^{-1} สำหรับนิ่วชนิดโมโนไฮเดรต และนิ่วชนิดไดไฮเดรต ตามลำดับ ดังภาพประกอบ 4-33



ภาพประกอบ 4-33 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 107

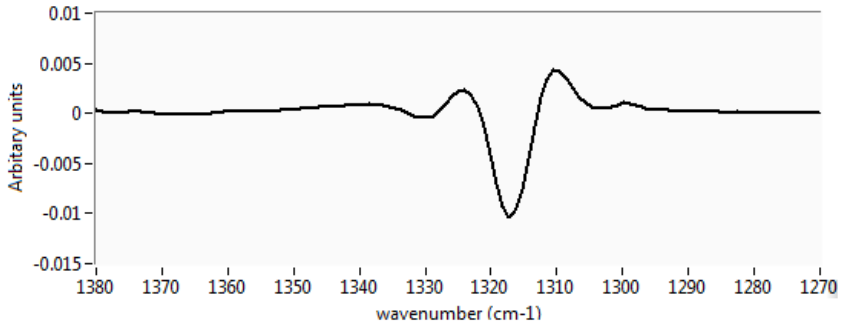
ทำการทดลองกับนิ่วตัวอย่างที่ 167 ที่มีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 62/29 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้ 7 จาก 8 ตำแหน่ง โดยไม่สามารถระบุตำแหน่งที่ความถี่ 1300 cm^{-1} ในขณะที่สามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตได้ 5 จาก 8 ตำแหน่ง ได้แก่ที่ความถี่ 518.63, 784.83, 1321.1, 1467.7 และ 1647.1 cm^{-1} ซึ่งจะเห็นได้ว่าพีคในช่วงความถี่ 1300 cm-1 ปรากฏเป็นพีคของนิ่วชนิดไดไฮเดรต ดังภาพประกอบ 4-34



ภาพประกอบ 4-34 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 167

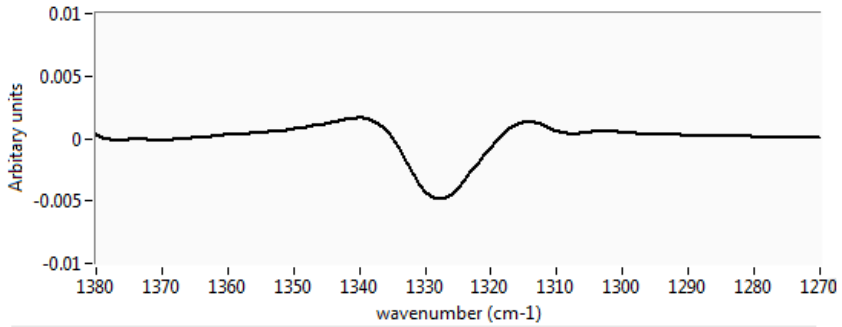
ทำการทดลองกับนิ่วผสมตัวอย่างที่ 79 ซึ่งมีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 84/12 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้ครบทั้ง 8 ตำแหน่ง และสามารถระบุตำแหน่งพีคของ

นิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตตดได้ 6 จาก 8 ตำแหน่ง โดยไม่ปรากฏตำแหน่งพีค ที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ดังภาพประกอบ 4-35



ภาพประกอบ 4-35 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 79

ทำการทดลองกับนิ่วผสมตัวอย่างที่ 101 ที่มีอัตราส่วนปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 10/81 พบว่าสามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตได้เพียง 3 ตำแหน่ง ได้แก่ความถี่ 517.66 778.08 และ1618.16 cm^{-1} ตำแหน่ง ซึ่งไม่ปรากฏตำแหน่งพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} แต่สามารถระบุตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตตดได้ครบทั้ง 8 ตำแหน่ง ดังนั้นพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ก็แสดงเฉพาะพีคของแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตตดเท่านั้น ดังภาพประกอบ 4-36 ตามลำดับ



ภาพประกอบ 4-36 ลักษณะพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ของนิ่วผสมตัวอย่างที่ 101

จากการแปลผลเชิงคุณภาพเบื้องต้นจากนิ่วชนิดผสมพบว่าการระบุตำแหน่งพีคจะทำได้ยากเมื่อปริมาณของนิ่วชนิดใดชนิดหนึ่งมีค่าน้อยมาก(น้อยกว่า 20% ต่อน้ำหนักทั้งหมด) และเนื่องจากตำแหน่งพีคสำคัญของนิ่วทั้งสองชนิดข้างต้นอยู่ที่ตำแหน่งใกล้กันมาก ทำให้เมื่อมีปริมาณของนิ่วชนิดใดมากกว่า ก็จะทำให้พีคของนิ่วชนิดนั้นบดบังพีคของนิ่วอีกชนิดไป

ในการวิเคราะห์นิ่วผสมนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตและนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต นั้น พบว่าเมื่อนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตมากกว่าในปริมาณมากๆ นั้น ตำแหน่งความถี่ที่ช่วง 1300 cm^{-1} จะมีค่าตั้งแต่ความถี่ 1317 cm^{-1} ลงไป ซึ่งความถี่ดังกล่าวเป็นความถี่ที่อยู่ในช่วงของนิ่วชนิดโมโนไฮเดรต แต่สามารถยืนยันการมีอยู่ของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตได้จากตำแหน่ง 912 cm^{-1} ในทางกลับกันหากนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตมีปริมาณมากกว่าจะปรากฏตำแหน่งพีคที่ช่วงความถี่ตั้งแต่ 1322 cm^{-1} ขึ้นไป ซึ่งเป็นช่วงความถี่ของนิ่วชนิดไดไฮเดรต โดยสามารถยืนยันการมีอยู่ของนิ่วชนิดโมโนไฮเดรตได้จากความถี่ 948 cm^{-1} นอกจากนั้นจะเห็นว่าเมื่อปริมาณของนิ่วทั้งสองชนิดมีปริมาณใกล้เคียงกัน จะปรากฏตำแหน่งพีคของนิ่วทั้งสองชนิดที่ความถี่ 1300 cm^{-1} ซึ่งสามารถใช้ยืนยันว่าเป็นนิ่วชนิดผสมได้ นอกจากนั้นพีคที่ความถี่นี้ยัง มีค่าความเข้มข้นสูงและปรากฏให้เห็นอย่างเด่นชัดในนิ่วทั้งสองชนิด จึงเหมาะสมสำหรับการนำมาพิจารณาการแปลผลเชิงปริมาณของนิ่วชนิดผสมสองชนิดข้างต้นได้อีกด้วย

4.3 ผลการแปลผลเชิงปริมาณ

ในการทดลองนี้เป็นการหาอัตราส่วนของนิ่วชนิดผสมระหว่างนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตกับนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต จากค่าความเข้มข้น ที่ความถี่ 1300 cm^{-1} และวิธี zero-crossing point first-derivative จากการทดลองในบทความ [17] พบว่าการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่งสำหรับนิ่วชนิดเดี่ยวและนิ่วชนิดผสมที่สังเคราะห์ขึ้นนั้น สามารถใช้ค่าความเข้มข้นที่ความถี่ 1324 cm^{-1} มาใช้ในการบอกปริมาณของนิ่วชนิดผสมได้ โดยในนิ่วชนิดผสมนั้น พีคที่ความถี่ 1324 cm^{-1} เป็นพีคที่ใช้บอกปริมาณของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต เนื่องจากในนิ่ว ชนิดแคลเซียมออกซาเลตไ ดไฮเดรต ชนิดเดี่ยวนั้น ค่าความเข้มข้นที่ความถี่ ที่ตำแหน่ง นี้จะมีค่าเ ท่ากับศูนย์ จากนั้นได้มีการ สร้างเส้นโค้งเปรียบเทียบ (calibration curve) สำหรับบอกปริมาณของนิ่วชนิดผสมนี้อีกด้วย ดังภาพประกอบ 2-27

ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงได้ใช้วิธีการ ทดลองเช่น เดียวกัน กับบทความข้างต้น เพื่อทดสอบว่าผลที่ได้จากตัวอย่างนิ่วที่เกิดขึ้นเองโดยธรรมชาตินั้น สามารถใช้เส้นโค้งเปรียบเทียบในการระบุปริมาณของนิ่วชนิดผสมได้หรือไม่

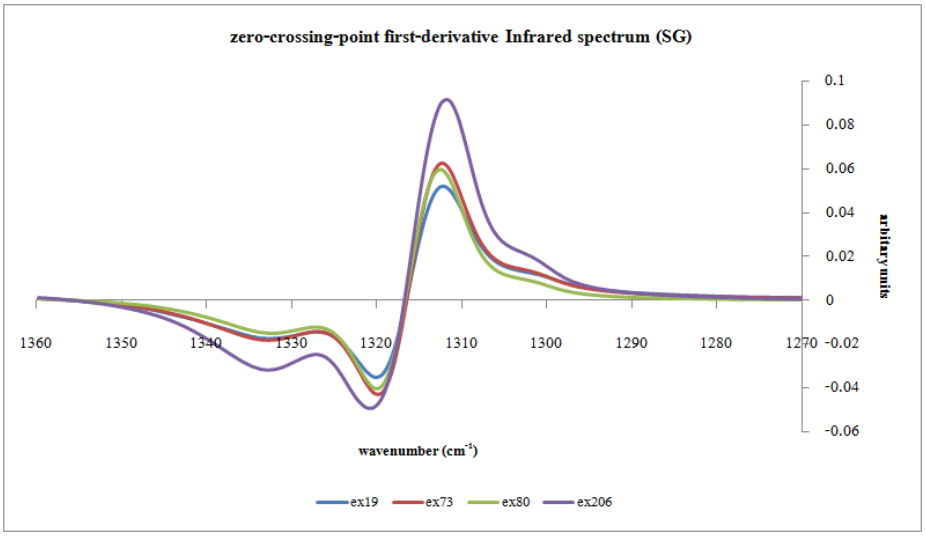
ในขั้นแรกใช้วิธีการ ทดลอง ข้างต้น กับชนิดเดี่ยวที่มีปริมาณ นิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตมากกว่าร้อยละ 85 ของปริมาณนิ่วส่วนประกอบทั้งหมด เพื่อทดสอบว่าค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่งแถบดูดกลืน 1324 cm^{-1} สอดคล้องกับค่าความเข้มข้นจากเส้นโค้งเปรียบเทียบหรือไม่ โดยผลการหาความเข้มข้นสามารถแสดงได้ดังตารางที่ 4.3

ตารางที่ 4.3 ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่งแถบดูดกลืน 1324 cm^{-1} ของนิ่วเดี่ยวชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต (COM)

ตัวอย่างนิ่วที่	%(COM/Unknown*)	ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง 1324 cm^{-1} ที่ได้จากการคำนวณ	ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง 1324 cm^{-1}	
			SG filter	MRA
19	96/4	-0.0307	-0.0281	-0.0281
45	94/6	-0.0300	-0.0308	-0.0308
73	96/4	-0.0307	-0.0319	-0.0319
74	94/6	-0.0300	-0.0278	-0.0290
80	96/4	-0.0307	-0.0303	-0.0287
83	95/5	-0.0304	-0.0363	-0.0346
110	88/12	-0.0281	-0.0409	-0.0409
119	96/4	-0.0307	-0.0340	-0.0340
150	89/11	-0.0284	-0.0110	-0.0094
206	96/4	-0.0307	-0.0458	-0.0458

*Unknown คือส่วนผสมที่ไม่ทราบชนิด

จากตารางที่ 4.3 จะสังเกตได้ว่าตัวอย่างที่ 110 150 และ 206 มีค่าที่ได้จากการวัด ต่างจากค่าที่มาจากเส้นโค้งอ้างอิงมากกว่าตัวอย่างอื่นๆ และได้ผลเหมือนกันจากการใช้ตัวกรองทั้งสองวิธี โดยเมื่อทดลองนำตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมที่มีอัตราส่วนประกอบเท่ากัน ได้แก่ตัวอย่างที่ 19 73 80 และ 206 ไปวาดกราฟปรากฏว่าสเปกตรัมที่ได้จากตัวอย่างที่ 206 แตกต่างจากสเปกตรัมของตัวอย่างอื่นๆ ที่มีลักษณะคล้ายกัน ดังภาพประกอบ 4-37



ภาพประกอบ 4-37 zero-crossing-point first-derivative Infrared spectrum (SG)(COM)

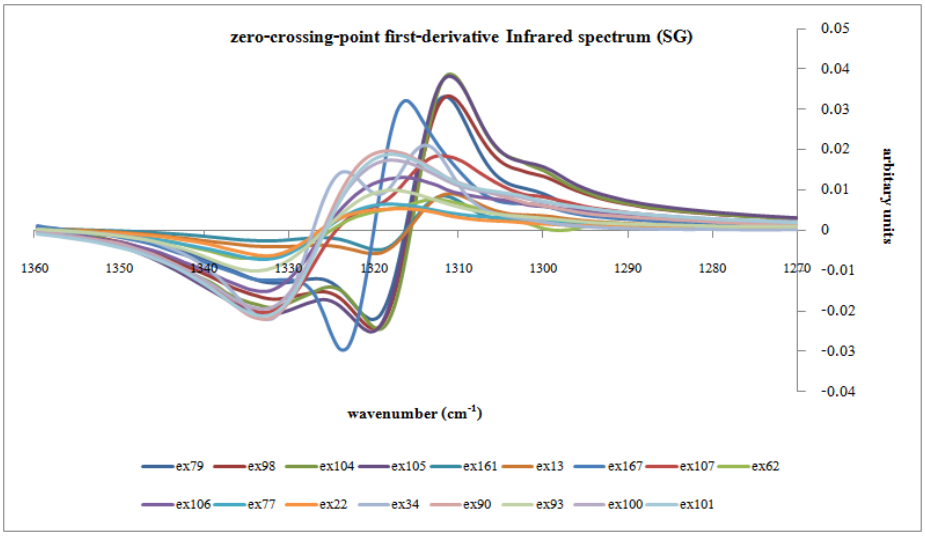
เมื่อนำผลจากตารางที่ 4.3 ไปประเมินค่า SEP พบว่าผลจากตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์มีค่า SEP เท่ากับ 0.0086 ในขณะที่ผลจากวิธี วิเคราะห์หลายระดับความละเอียดมี ค่า SEP เท่ากับ 0.0088 จะเห็นว่าทั้งสองวิธีมีค่าความคลาดเคลื่อนใกล้เคียงกันมาก เนื่องจากความคลาดเคลื่อนเกิดจากตัวอย่างนิ่วเดียวกัน โดยเป็นผลมาจากลักษณะของอินฟราเรดสเปกตรัมเอง จากนั้นทำการทดลองกับอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วชนิดผสมทั้ง 17 ตัวอย่างที่มีอัตราส่วนประกอบแตกต่างกันไปดังตารางที่ 4.2 มาหาตำแหน่งจุดตัดผ่านศูนย์จาก วิธีตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์และ วิธีวิเคราะห์สัญญาณแบบหลายระดับความละเอียด เมื่อเปรียบเทียบค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่งความถี่ 1324 cm^{-1} ของตัวอย่างนิ่วทั้ง 17 ข้อมูลกับค่าที่ได้จากการคำนวณค่าตามเส้นโค้งเปรียบเทียบ สามารถแสดงได้ดังตารางที่ 4.4 โดยเรียงลำดับจากตัวอย่างนิ่วที่มีส่วนผสมของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตในอัตราร้อยละจากมากไปหาน้อย

ตารางที่ 4.4 ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง 1324 cm^{-1} ของนิ่วผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต (COM) และนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต (COD)

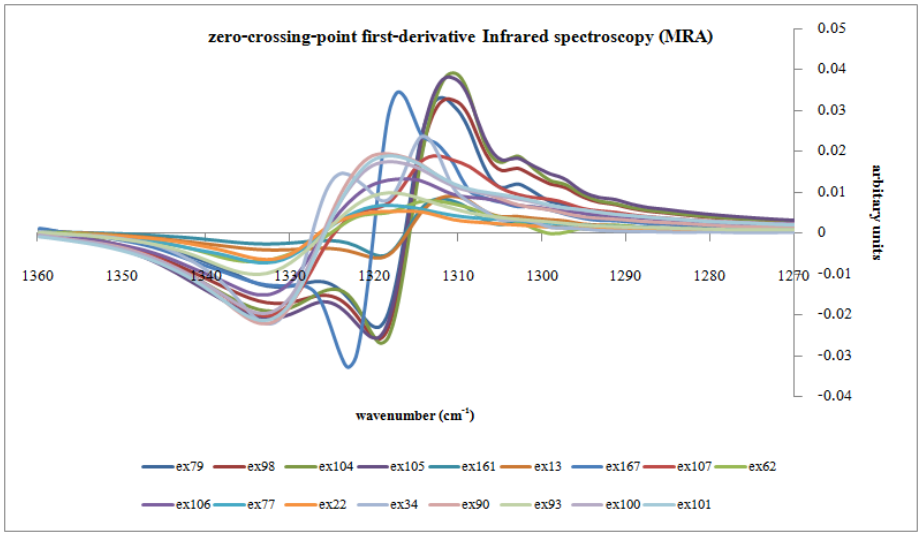
ตัวอย่างนิ่วที่	%(COM/COD)	ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง 1324 cm^{-1} ที่ได้จากการคำนวณ	ค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง 1324 cm^{-1}	
			SG filter	MRA
79	84/12	-0.0268	-0.0144	-0.0138
98	84/10	-0.0268	-0.0168	-0.0161
104	84/12	-0.0268	-0.0147	-0.0138
105	84/12	-0.0268	-0.0187	-0.0181
161	73/21	-0.0233	-0.0022	-0.0020
13	72/22	-0.0230	-0.0040	-0.0039
167	62/29	-0.0198	-0.0294	-0.0291
107	31/63	-0.0099	0.0011	0.0014
62	20/70	-0.0064	0.0014	0.0015
106	14/80	-0.0044	0.0049	0.0050
77	12/82	-0.0038	0.0029	0.0029
22	10/81	-0.0032	0.0030	0.0031
34	10/80	-0.0032	0.0141	0.0145
90	10/84	-0.0032	0.0090	0.0091
93	10/84	-0.0032	0.0036	0.0037
100	10/80	-0.0032	0.0073	0.0073
101	10/81	-0.0032	0.0073	0.0074

เมื่อนำผลที่ได้จากตารางที่ 4.4 ไปประเมินค่าความผิดพลาดที่เกิดขึ้น พบว่าผลจากตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์มีค่า SEP เท่ากับ 0.0129 ในขณะที่ผลจากวิธี วิเคราะห์หลายระดับความละเอียดมี ค่า SEP เท่ากับ 0.0127 จะเห็นว่าผลการทดลองจากทั้งสองวิธีให้ผลการประเมินค่าความผิดพลาดที่ใกล้เคียงกันมาก เหมือนกับผลการทดลองในนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตที่เป็นนิ่วชนิดเดี่ยว และจะสังเกตเห็นว่าตัวอย่างนิ่วที่มีปริมาณของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตสูงกว่า จะมีค่าความเข้มข้นที่ความถี่ 1324 cm^{-1} เป็นค่าบวก เนื่องมาจากตำแหน่งที่ตัดผ่านศูนย์เป็นตำแหน่งที่สูง

กว่าความถี่ 1324 cm^{-1} ดังแสดงในภาพประกอบ 4-38 และภาพประกอบ 4-39 ซึ่งมักเกิดขึ้นได้เนื่องจากปริมาณองค์ประกอบที่ต่างกันของนิ่วชนิดผสม ตัวอย่างเช่น ตำแหน่งความถี่ 1316 cm^{-1} ของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรตสามารถเลื่อนอยู่ในช่วงความถี่ตั้งแต่ 1314-1320 cm^{-1} ได้ ในขณะที่ตำแหน่งพีคที่ความถี่ 1324 cm^{-1} ของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต ก็สามารถเลื่อนอยู่ในช่วงความถี่ 1326 cm^{-1} ขึ้นไปได้เช่นกัน [17] ดังนั้นเป็นไปได้ว่าการวัดค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง 1324 cm^{-1} อาจจะไม่ใช่ตำแหน่งพีคที่แท้จริงที่ใช้ในการวัดค่าความเข้มข้นของนิ่ว



ภาพประกอบ 4-38 zero-crossing-point first-derivative Infrared spectrum (SG)



ภาพประกอบ 4-39 zero-crossing-point first-derivative Infrared spectrum (MRA)

จากผลการทดลองเรื่องการแปลผลเชิงคุณภาพของนิ่วชนิดผสมนั้น พบว่าตัวอย่างนิ่วที่ 107 ที่มีปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 62/29 ปรากฏพีคจำนวนสองพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} ได้แก่ที่ความถี่ 1318 และ 1327.5 cm^{-1} ดังภาพประกอบ 4-28 เมื่อทดลองใช้ตำแหน่งพีคที่ที่ความถี่ 1327.5 cm^{-1} ในการวัดค่าความเข้มข้นของนิ่วตัวอย่างนี้ ผลปรากฏว่ามีค่าเท่ากับ -0.0110 absorbance unit ซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากเส้นโค้งเปรียบเทียบมากกว่าการวัดค่าความเข้มข้นจากตำแหน่ง 1324 cm^{-1} โดยให้ผลเช่นเดียว กันจากทั้งสองวิธีตัวกรองสัญญาณรบกวน อีกหนึ่งตัวอย่างคือนิ่วตัวอย่างที่ 62 ซึ่งมีปริมาณนิ่วแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต ต่อนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เท่ากับ 20/70 ก็แสดงพีคที่ช่วงความถี่ 1300 cm^{-1} จำนวน 2 พีคได้แก่ที่ความถี่ 1318 และ 1328.83 cm^{-1} เมื่อวัดค่าความเข้มข้นตรงตำแหน่งความถี่ 1328.83 cm^{-1} พบว่าตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์วัดค่าความเข้มข้น ได้เท่ากับ -0.0040 absorbance unit ในขณะที่การกรองด้วยวิธีหลายระดับความละเอียดวัดค่าความเข้มข้น ได้เท่ากับ -0.0048 absorbance unit ซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากเส้นโค้งเปรียบเทียบอ้างอิง

บทที่ 5

สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ

จากการศึกษาข้างต้นสามารถสรุปผลการทดลองตามหัวข้อดังนี้

5.1 การวิเคราะห์และสรุปผลการทดลอง

5.1.1 ผลการประมวลผลสัญญาณขั้นต้น

ลักษณะของตัวอย่างอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้นที่นำมาใช้ในการทดลองนั้นมีลักษณะของการยกตัวของเส้นแนวโน้ม เมื่อนำอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้นไปหาค่า SNR พบว่ามีค่าเท่ากับ 38.14 ซึ่งเป็นค่าที่ไม่ได้สูงหรือต่ำจนมากนัก แต่เมื่อนำอินฟราเรดสเปกตรัมเข้าสู่ขั้นตอนการกำจัดเส้นแนวโน้มด้วยวิธีการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่ง พบว่าสเปกตรัมที่ผ่านการทำอนุพันธ์แล้วจะมี artifact peaks เกิดขึ้นจำนวนมาก ซึ่งผลจากขั้นตอนการทำอนุพันธ์นี้จะนำไปใช้ในการแปลผลเชิงคุณภาพและปริมาณ ดังนั้นการมี artifact peaks ปรากฏอยู่บนสเปกตรัมจะทำให้การแปลผลนั้นยากและเกิดความผิดพลาดได้ จึงได้มีการกำจัดสัญญาณรบกวน ในขั้นตอน ของการปรับเส้นเรีย บ ในขั้นตอนนี้ได้นำวิธีการกรองสัญญาณ 2 วิธีมาทำการเปรียบเทียบเพื่อดูว่าวิธีการใดให้ผลการกำจัดสัญญาณรบกวนได้ดีกว่ากัน วิธีที่ใช้ได้แก่ วิธีตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์ และวิธีวิเคราะห์หล ายระดับความละเอียดซึ่งเป็นการวิเคราะห์ความถี่ของสัญญาณ จากผลการทดลอง พบว่าตัวกรองซาวิสกี้-โกเลย์ พหุนามดีกรี 2 และขนาดหน้าต่างพิจารณาเท่ากับ 5 ตำแหน่งนั้นให้ผลการวัดค่า SNR มากที่สุด ในขณะที่การวิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียดนั้นให้ผลการวัดค่า SNR ดีที่สุดเมื่อใช้เวฟเล็ต Duabechies08(L2) โดยที่ขนาดของพีคของสเปกตรัมไม่มีการเปลี่ยนแปลง

5.1.2 ผลการแปลผลเชิงคุณภาพ

การแปลผลเชิงคุณภาพ ในกรณีของนิ่วชนิดเดี่ยว พบว่า ผลการระบุตำแหน่งพีคที่ได้จากอินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้น มีเปอร์เซ็นต์การ ระบุตำแหน่งพีค ของนิ่วแต่ละชนิดได้ถูกต้องมากกว่า การระบุตำแหน่งพีคจาก อินฟราเรดสเปกตรัมเมื่อผ่าน การทำอนุพันธ์อันดับสองแล้ว เนื่องจากในบางตำแหน่งพีคที่มีค่าความเข้มข้นต่ำๆ การทำอนุพันธ์จะทำให้ค่าความเข้มข้นลดลงจนเกือบเท่าศูนย์ ทำให้เครื่องมือในการระบุตำแหน่งพีคไม่สามารถจับตำแหน่งดังกล่าวได้

กลับกันกับกรณีของนิ่วชนิดผสม พบว่า การระบุตำแหน่งพีคจาก อินฟราเรดสเปกตรัมตั้งต้นไม่สามารถชี้ชัดได้ว่าเป็นนิ่วผสมชนิดใด เนื่องจากตำแหน่งพีคที่สามารถระบุได้ เป็นตำแหน่งพีคที่เกิดจากนิ่วชนิดที่มีปริมาณมากกว่า นอกจากนั้นก็ไม่สามารถระบุตำแหน่งพีคที่ซ้อนทับกัน อยู่ได้ แต่เมื่อแปลผลจากอินฟราเรดสเปกตรัมที่ผ่านการทำอนุพันธ์อันดับสองแล้วพบว่า สามารถระบุตำแหน่งพีคสำคัญของนิ่วส่วนประกอบทั้งสองชนิดได้ ดังนั้นจึงสามารถระบุได้ว่าเป็นอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วผสมชนิดใด

5.1.3 ผลการการแปลผลเชิงปริมาณจากจากวิธี zero-crossing first-derivative และการประเมินค่า Standard Error of Performance (SEP)

ในการทดลองนี้เป็นการหาค่าความเข้มข้นที่ได้จากตำแหน่งความถี่ที่ 1324 cm^{-1} จากขั้นตอนการทำอนุพันธ์อันดับหนึ่ง เพื่อหาอัตราส่วนประกอบระหว่างนิ่วผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตโมโนไฮเดรต และนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรต เนื่องจากตำแหน่งดังกล่าวเป็นตำแหน่งที่ใช้ยืนยันว่าเป็นนิ่วชนิดแคลเซียมและยังเป็นตำแหน่งที่ปรากฏให้เห็นอย่างเด่นชัดในทุกๆ ตัวอย่างการทดลอง ไม่ว่าในสเปกตรัมของนิ่วชนิดเดี่ยว หรือในสเปกตรัมของนิ่วชนิดผสม โดยค่าที่ได้จากการทดลองจะถูกนำไปเปรียบเทียบกับค่าที่ได้จาก เส้นโค้งเปรียบเทียบ ในบทความอ้างอิง [17] ซึ่งเป็นผลของการทดลองจากอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วชนิดผสมที่เกิดจากการสังเคราะห์ในอัตราส่วนที่ต่างกัน ในขั้นตอนแรกได้ใช้ตัวอย่างของนิ่วชนิดเดี่ยว ชนิดแคลเซียมออก ซาเลตโมโนไฮเดรตพบว่าผลจากวิธีตัวกรองซาวิสกี้- โกเลย์มีค่า SEP เท่ากับ 0.0086 ในขณะที่ผลจากวิธีวิเคราะห์หลายระดับความละเอียดมีค่า SEP เท่ากับ 0.0088 ซึ่งทั้งสองวิธีให้ค่า SEP ที่น้อยมากแสดงว่าค่าความเข้มข้นที่ได้จากการวัด และค่าที่ได้จากเส้นโค้งเปรียบเทียบมี ค่าใกล้เคียงกัน จากนั้นทำการทดลองในกรณีของนิ่วชนิดผสมพบว่า มีค่า SEP สูงกว่า 80% ซึ่งมากกว่าในกรณีที่เปรียบเทียบโดยนิ่วชนิดเดี่ยวมาก เนื่องจากนิ่วชนิดผสม ที่มีปริมาณส่วนประกอบไม่เท่ากัน จะทำให้พีคมีตำแหน่งแตกต่างกันออกไป ทำให้ตำแหน่งพีค 1324 cm^{-1} ที่เป็นพีคของนิ่วชนิดแคลเซียมออกซาเลตไดไฮเดรตไม่ใช่ตำแหน่งแท้จริงที่ใช้ในการวัด

แต่จากการทดลองเรื่องการแปลผลเชิงคุณภาพ จากการทำอนุพันธ์อันดับสอง พบว่าในตัวอย่างที่ 107 และ 62 ซึ่งปรากฏพีคจำนวน 2 พีคและเป็นตำแหน่งพีคที่แสดงถึง นิ่วชนิดโมโนไฮเดรต และไดไฮเดรต เมื่อวัดค่าความเข้มข้นที่ตรงกับตำแหน่งพีคของนิ่วแคลเซียมออกซาเลตไดไฮ

เดรต ผลปรากฏว่าค่าที่ได้สอดคล้องกับค่าจากเส้นโค้งเปรียบเทียบอ้างอิงมากกว่า นอกจากนั้นจากการทดลองขั้นต้นพบว่า สเปกตรัมจะแสดง พีค 2 พีคที่ความถี่ 1300 cm^{-1} ก็ต่อเมื่อมีปริมาณขององค์ประกอบของนิ่วแต่ละชนิดมากกว่า 20% ต่อน้ำหนัก

5.2 ปัญหาและข้อเสนอแนะ

5.2.1 ปัญหา

ตัวอย่างข้อมูลอินฟราเรดสเปกตรัมที่จะนำมาใช้ในการวิเคราะห์มีจำนวนน้อย จึงทำให้การทดลองไม่ครอบคลุมทั้งหมด นอกจากนั้นยังพบว่าการบอกตำแหน่งความถี่ที่เกิดพีคของนิ่วแต่ละชนิดจากอ้างอิงนั้น จะอยู่ในรูปของความถี่ ช่วงกว้าง ทำให้การกำหนดช่วงความถี่เพื่อให้ระบุตำแหน่งการเกิดพีคเพียงชนิดใดชนิดหนึ่งอย่างชัดเจนนั้นทำได้ยาก เนื่องจากหมู่ฟังก์ชันที่ต่างชนิดกันอาจมีบางช่วงความถี่ที่ซ้อนทับกัน ทำให้การแปลผลผิดพลาดได้ ดังนั้นจึงต้องใช้การอ้างอิงจากหลายแหล่ง เพื่อให้ได้ตำแหน่งการเกิดพีคในช่วงที่ถูกต้องที่สุด นอกจากนั้นการแปลผลเชิงปริมาณในช่วงที่ผ่านมาเป็นการทดลองจากอินฟราเรดสเปกตรัมของนิ่วที่เกิดจากการสังเคราะห์ขึ้นเองโดยผู้ทดลอง ตัวแปรที่เกิดขึ้นจึงมีจำนวนน้อยกว่าการทดลองกับนิ่วที่เป็นนิ่วที่เกิดโดยธรรมชาติ เช่น นิ่วชนิดผสมที่ถูกสร้างขึ้นจากนิ่วชนิดเดี่ยวสองชนิดนั้น ก็จะให้ผลของอินฟราเรดสเปกตรัมที่เกิดจากนิ่วสองชนิดนั้นเท่านั้น แต่สำหรับนิ่วผสมที่เกิดขึ้นในธรรมชาตินั้น จะมีส่วนประกอบของนิ่วที่มากกว่าสองชนิดปะปนอยู่ ทำให้การแปลผลนั้นยุ่งยากและซับซ้อนกว่ามาก

5.2.2 ข้อเสนอแนะ

จากการทำงานวิจัยที่ผ่านมาพบว่า ควรมีตัวอย่าง อินฟราเรดสเปกตรัมที่ใช้ ในการทดลองปริมาณที่มากพอและหลากหลาย เพื่อให้ผลการทดลองครอบคลุมและแม่นยำมากกว่า โดยเฉพาะในกรณีของนิ่วชนิดผสม นอกจากนั้นในปัจจุบันยังไม่มีการวิจัยเกี่ยวกับนิ่วชนิดผสมตัวอื่นๆ ซึ่งโดยส่วนมากเป็นการจำแนกนิ่วชนิดผสมในกรณีนิ่วออกซาเลตโมโนไฮเดรตและไดไฮเดรตเท่านั้น แต่ในปัจจุบันนิ่วผสมชนิดแคลเซียมออกซาเลตกับนิ่วอะพาไทท์ ก็มีจำนวนมากขึ้น ดังนั้ นอาจใช้แนวทางในการวิจัยของนิ่วผสมชนิดแคลเซียมเพื่อศึกษานิ่วชนิดผสมอื่นๆ ต่อไป

บรรณานุกรม

[1] จำนวนและอัตราผู้ป่วยนอกตามกลุ่มสาเหตุ . (Online). Available: http://bps.ops.moph.go.th/healthinformation/index2.html [Apr, 2011]

[2] พัชรินทร์ ชนะพาห์, "ปัจจัยเสี่ยงของโรคนิ่วในไต: ประเด็นของสารแคลเซียมและออกซาเลต ," *สงขลานครินทร์เวชสาร.,* vol. 29, no. 6, 2011

[3] มณฑิรา มฤคทัต , นิ่วในทางเดินปัสสาวะ, ประเทศไทย : คณะแพทยศาสตร์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์, หน้า 7 – 61, 2545

[4] G. S. Popescu, I. Ionescu, R. Grecu, and A. Preda, "The use of infrared spectroscopy in the investigation of urolithiasis," *REV ROMANA MED LAB*., vol. 18, 2010

[5] Jose R. G. and Jorge A. G.. "Infrared and Raman studies on renal stones: the use of second derivative infrared spectra," *Urol Res*., vol. 38, pp. 383-390, 2010

[6] ศูนย์เครื่องมือวิทยาศาสตร์ : อัตราค่าบริการวิชาก ารของศูนย์เครื่องมือวิทยาศาสตร์ . (Online) Available: http://www.sec.psu.ac.th/index2.php [Feb, 2011]

[7] พิมพ์จิต ดามพวรรณ และวัชรินทร์ รุกขไชยศิริกุล , สเปกโทรส โกปีของสารอิ นทรีย์, ประเทศไทย: ภาควิชาเคมี คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์, 2550

[8] T. Lan, Y. Fang, W. Xiong, and C. Kong, "Automatic baseline correction of infrared spectra," *CHIN OPT LETT*., vol. 5, no. 10, 2007

[9] G. Schulze, A. Jirasek, M. M. Yu, A. Lim, R. F. Turner, and M. W. Blades, "Investigation of selected baseline removal techniques as candidates for automated implementation," *Appl Spectrosc*., vol. 59, no. 5, pp. 545-74, 2005

[10] W. Boyong, and G. W. Small, "Wavelet analysis used for spectral background removal in the determination of glucose from near-infrared single-beam spectra," *Anal Chim Acta*., vol. 681, pp. 1-2, 2011

[11] E. Izaskun, A.E. Jose and Jose Luis R. Arrondo, "Removal of spectral noise in the quantitation of protein structure through infrared band decomposition". Biospet., Vol. 3, pp. 469-475, 1997

[12] M. Bos and J.A.M. Vrielink, “The wavelet transform for pre-processing IR spectra in the identification of mono- and di-substituted benenes”. Chem. And ILS., Vol. 23, pp. 115-122, 1994

[13] R. Davis, and L. J. Mauer, “Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy: A rapid tool for detection and analysis of foodborne pathogenic bacteria,” *FORMATEX*., pp. 1582-1594, 2010

[14] S. Sankaran, “Mid-infrared spectroscopy for detection of Huanglongbing(greening) in citrus leaves,” *Talanta*., vol. 83, pp. 574-581, 2010

[15] M. Kokalj, R. Metka, and S. Kreft, “Commonly applied smoothing of IR spectra showed unappropriate for the identification of plant leaf samples,” *CHEMOMETR INTELL LAB*., vol. 108, pp154-161, 2011

[16] L.G. Jose, O. Emma, G. N. Jose, and P. H. Valentin, “Moving Average and Savitzki-Golay Smoothing Filters Using Mathcad,” *ICEE*., 2007

[17] M. E. Laurence, P. Levillain, B. Lacour, and M. Daudon, “Advantage of zero-crossing-point first-derivative spectrophotometry for the quantification of calcium oxalate crustalline phases by infrared spectrophotometry,” *Clinica Chimica Acta*., vol. 298, pp. 1-11, 2000

[18] M. Volver, B.G. Wolthers, H.J. Meeting, T. H. Y. de Haan, P. M. J. Coenegrach, and W. vander Slik, “Artificial neural network predictions of urinary calculus compositions analyzed with infrared spectroscopy,” *Clin Chem*., vol. 40, no. 9, pp. 1692–1697, 1994

[19] A. Taulier, P. Levillain, and A. Lemonnier, “Determining Methemoglobin in Blood by Zero-Crossing-Point First-Derivative Spectrophotometry,” *Clin Chem*., vol. 33/10, pp. 1767-1770, 1987

[20] How to Cure Kidney Stones at home**.** (Online) Available: http://www.curemanual.com/diseases-and-tweaks/how-to-cure-kidney-stones-at-home [Jul, 2011]

[21] Analysis of Urinary calculi using infrared spectroscopic imaging. (Online) Available: http://kb.osu.edu/dspace/handle/1811/38030?show=full [Jul, 2011]

[22] Clinical Laboratory Diagnostics of the future about non-invasive tool to diagnosis endometriosis. (Online) Available: http://clin-lab.blogspot.com [Jul, 2011]

[23] Infrared spectroscopy (FTIR). (Online) Available: http://www.andersonmaterials.com/ftir.html [Feb, 2010]

[24] P. Cochat, V. Pichault, J. Bacchetta, L. Dubourg, J. F. Sabot, C. Saban, M. Daudon, and A. Liutkus, "Nephrolithiasis related to inborn metabolic diseases," *Pediatr Nephral.*, vol. 25(3), pp.415-424, 2010

[25] B.C. Smitch, "Fundamentals of fourier transform infrared spectroscopy (second edition)," *Taylor and Francis Group*., 2010

[26] S. Barbara, Infrared spectroscopy: fundamentals and applications, Analytical Techniques in the Sciences, 2004

[27] ไวยากรณ์ แสนสุข, การตรวจจับฟอลต์ชนิดอิมพิแดนซ์สูงด้วยไมโครคอนโทรลเลอร์โดยใช้การแปลงเวฟเล็ตและการแปลงฟูริเยร์ช่วงสั้น , ประเทศไทย : ภาควิชาวิศวกรรมคอมพิวเตอร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่, 2552

[28] M. Bos, and J. A. M. Vrielink, "The wavelet transform for pre-processing IR spectra in the identification of mono- and di-substituted benzenes," *Chemometrics and Intelligent Laboratory System*, vol. 23, pp. 115-122, 1994

[29] H. Shen, J. Wang, Y. Liang, K. Pettersson, J. G. Mats, L. F. Johan, "Chemical rank estimation by multiresolution analysis for two-way data in the presence of background," *CHEMOMETR INTELL LAB*., vol. 37, pp. 261-269, 1997

[30] LabVIEW: wavelet analysis tools user manual, USA, 2008

[31] Numerical recipes in fortran 77: The art of scientific computing. (Online) Available: www.wire.tu-bs.de/OLDWEB/mameyer/cmr/savgol.pdf [Jul, 2014]

[32] Advanced preprocessing: noise, offset, and baseline filtering. (Online) Available: http://wiki.eigenvector.com [Sep, 2012]

[33] M. Howard, and Jr. Jerome Workman, "Derivative in spectroscopy," *Spectroscopy*., Vol. 18, no. 4, 2003

[34] A. Hesse, and G. Sanders, “Atlas of Infrared spectra for the Analysis of Urinary Concrement,” *Georg Thieme Verlag Stuttgart*., 1988

[35] ณรงพันธุ์ รัตนปนัดดา, “การใช้เทคนิค Near Infrared Spectroscopy (NIRS) ในการหาความชื้นและโปรตีนของแป้งสาลี,” *SDU Res J.,* vol. 2(1), pp. 1-14, 2009

ภาคผนวก

Automated Expert System for Urolithiasis Classification from Infrared Spectrogram

Jiaranai Ponnui* Sawit Tanthanuch [1] Pornchai Phukpattaranont [2] Booncharoen Wongkittisuksa[3]
[1,2,3] Department of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, Prince of Songkla University,
Hat Yai, Songkhla 90112
E-mail: pnnui.j@gmail.com*

Abstract
This paper proposes a study of wavelet transform analysis for the urolithiasis classification. Calcium oxalate monohydrate (whewellite) stone and calcium oxalate dihydrate (weddellite) stone are used for the classification processing. Two methods are applied to indicating the differentiation of infrared spectrum, which are used the Daubechies wavelets transform with a difference order (db04, db07 and db08). The first method is multiresolution analysis (MRA). This method is the powerful tool to decompose high and low frequency components of spectrum. The second method is detrend analysis. The results show that Daubechies wavelet with order 4 (trend level = 0.125) in detrend analysis is more accurate and correct than MRA. Detrend analysis method achieves to identify peak positions of frequency correctly 6 from 7 positions in both of whewellite and weddellite while only 5 positions in whewellite infrared spectrum and 6 positions in weddellite infrared spectrum are obtained from MRA method.
Keywords: Urinary stones, Infrared spectroscopy, Wavelet transform, Detrend analysis, Multiresolution analysis (MRA)

1. Introduction
Urinary tract stone disease is the most frequently found in Thai people, and tends to increase every year. Especially, the number of the disease in North West of Thailand is increased to 10-16% every year [1]. The treatment of urinary stone has 2 purposes. The first purpose is to remove a stone out. The second purpose is important step in treatment that prevents recurrent urinary stone attacks. The knowledge of chemical component of urinary stones is very important for recurrent prevention because the recurrence rate is more than 50% [2]. Each stone is different in shape, textures, size and the rate of increase. Currently, the urinary stone analysis techniques that has been accepted and used for diagnosis reference are X-ray diffraction technique and infrared spectroscopy technique. The widely used technique is infrared spectroscopy. It is requires minimal sample volume for analysis [2] and uses lower cost than X-ray diffraction technique in the equal weight index [3]. Types of stone are composed of same major component form an absorption band in the same frequency position such as calcium stone. The interpretation for identifying the component used a specialist. Therefore, this paper provides the automated expert system for urolithiasis classification from infrared spectrogram. Initially this system approach to identify types of calcium stone in qualitative analysis by using the wavelet transforms.

2. Theory
2.1 Infrared Spectroscopy
Infrared spectroscopy is one of techniques to be used for identification of the substance by specifying a structure or quantity of a compound. Infrared spectroscopy is a measurement technique that relies on light absorption at various frequencies of molecule and then converted to energy for stimulating bonds to vibratory [4]. The energy of an electron in the molecule is distributed throughout the molecules. It is according to the Planck's equation,

$$E = h\nu, \quad (1)$$

where 'E' is the energy (J), 'v' is the fundamental vibration frequency and 'h' is Planck's constant (6.626×10^{-34} J-s), respectively [5]. The phenomenon is recorded as infrared spectrum. The characteristic of infrared spectrum is more complex and superimpose because the vibration energy component is a higher energy term and corresponds to the absorption of energy by molecules.

Interpretation of infrared spectrum includes of qualitative and quantitative analysis. Qualitative analysis is used to identify types of molecules from the peak positions and the mass of each of molecular functionin the stone explained by quantitative measurement.

2.2 Calcium Stone
Most stones are composed of calcium or a combination of calcium and oxalate. There are 2 categories similarly infrared spectrum. The first category is calcium oxalate monohydrate whose chemical structure is CaC_2O_4 H_2O. The second category is calcium oxalate dehydrate in which the chemical structure is CaC_2O_4 $2H_2O$ [6]. Molecules of both substances have two carbon atoms and one calcium atom. The only difference is that calcium oxalate dehydrate is independently associated with two water molecules, whereas the monohydrate is

associated with one water molecule [7]. The important of peak frequency positions were compared with urinary stone reference as shown in table1.

Table 1 Characteristics and peak positions of urinary's infrared spectrum.

characteristics band	peak positions (cm^{-1})	
	whewellite	weddellite
O-H stretching vibration	3438	3448
C=O group stretching vibration	1619	1638
symmetrical stretching vibration of C=O group	1315	1326
weak absorption band vibrations of O-H group	886	915
C=O group	780	777
vibration of O-H group	660	610
vibration of C=O group	518	518

This is peak frequency position reference from EZ OMNIC program

2.3 Wavelet transform

The wavelet is a tool that is useful in feature extraction applications. It is representation by wavelets that have different scales and translation [8]. Function of wavelet transform developed from Fourier transform basis is

$$\Psi_{a,b}(t) = \frac{1}{\sqrt{a}}\Psi\left(\frac{t-b}{a}\right), \quad (2)$$

where the parameter 'a' is the scaling vector and 'b' is the translation factor, consequently. Wavelet analysis method provided to multiresolution analysis (MRA) is used to analyze signals containing both low frequency components and high frequency components [9]. Low frequencies component is called 'Approximation' and high frequencies component is called 'Detail'. MRA also removed unwanted component in the signal like a filter [10].

The second method for removing base line of the signals is a detrend analysis. An internal parameter called trend level is required for baseline removal [11]. The trend level is calculated as follows

$$LEVEL_{(trend)} = \left[\frac{log_2 2t}{log_2 N}\right], \quad (2)$$

where 't' is the sampling duration and 'N' is the number of sampling points in t time [12]. As well as MRA, detrend analysis method were applied filtering method to decompose low and high frequency components. Low frequency component is called 'trend' and high frequency component is called 'detrend' [13].

Since 1989, the wavelet transform-based techniques have been applied to the chemical signal processing [14]-[15] because wavelets are localized in both the time and frequency domain. Hence, wavelet signal processing is suitable for nonstationary signals whose spectral content changes over the time. Wavelets were employed in the various fields of analytical chemistry, especially to the infrared spectrum [16]-[17], the spectral data in the wavelength domain instead of the frequency domain [15]. Each family in the wavelet transform has a different in shape. Hence, selecting wavelets family, which matches the signal to be processed, is very important in the wavelet applications.

3. Material and Methods

This paper used LabVIEW version 8.6 (Advanced signal processing toolkit) for implementation. Multiresolution and detrend analysis tools are used to decompose high and low frequency component as shown in figure 1.

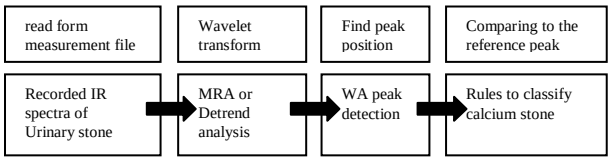


Figure 1. System block diagram

Sample infrared spectrum data were collected from Songklanagarind hospital on EZ OMNIC program in 2004. This program was used for interpreting urinary spectral components. Stone analysis was performed in 12 data. Urinary infrared spectrums are used as the input of this system. These inputs are read using Read from Measure File.VI in .txt format.

The Daubechies wavelet family is similar in shape to infrared spectral [16]. The Duabechies function order 4, 7 and 8 is suitable for infrared spectral analysis because the error occurred less than other orders in the Duabechies function [18]. The Daubechies wavelet was obtained using the order 4, 7 and 8 for both of methods. The trend level is 0.125. Then, the wavelet analysis peak detection VI is used to detect peak points by specifying proper width and threshold. Width specifies the width in number of samples. This VI coerces the value to a power of 2. The proper width in this method is 64 (trial and error method). Threshold specifies the value to reject peaks or valleys of a particular size. For the methods that look for valleys of spectra, threshold value was obtained from highest value according to %Transmittion on y axis. Hence, the threshold value is 100. Otherwise, for the methods that look for peaks, the threshold value is 1. Width and threshold values are the same for all test data.

4. Experimental results

4.1 Multiresolution analysis

Figure 2 and figure 3 show the result of approximation coefficient and detail with level 4 of whewellite and weddellite, respectively. According to a figure 2 and figure 3, 'X' marker is the peak

frequency positions that the wavelet analysis peak detector can be detected. These results are correct and accurate in approximation coefficient level 4 but peak positions in detail are nearly position because of a characteristic of the Daubechies wavelets. Hence, the wavelet analysis detector cannot specify only correct peak of spectrum.

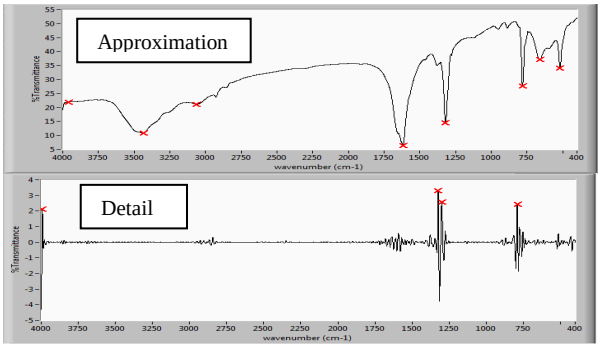


Figure 2. Results of MRA from Whewellite

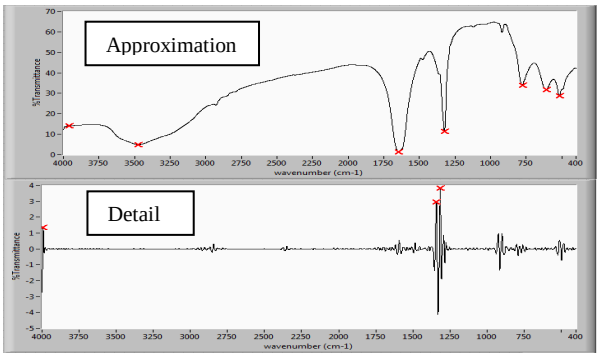


Figure 3. Results of MRA from weddellite

4.2 Detrend analysis

Figure 4 and figure 5 show detrend analysis results in whewellite and weddellite, respectively. Each figure shows the trend signal and detrend signal. Peak positions from detrend signal have been used to compare to the reference peak positions from EZ OMNIC program.

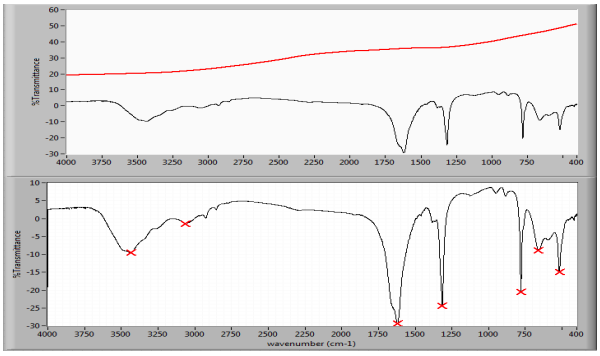


Figure 4. Results of detrend analysis from whewellite

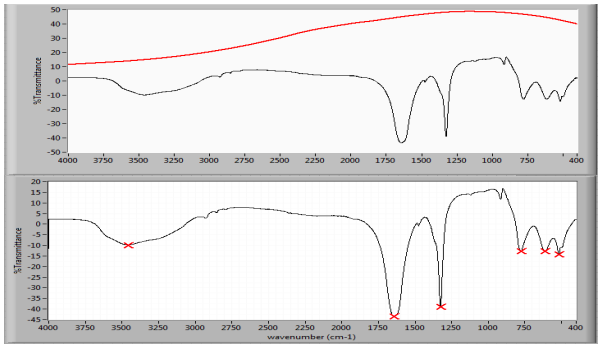


Figure 5. Results of detrend analysis from Weddellite

4.3 Validation of output

The validation of the result is done by comparing the peak position of frequency with reference from EZ OMNIC program and kidney stone 1.3. They are spectral database. For example spectrum, in figure 6 is the results from whewellite. The multiresolution analysis with order 4 (level4) can identify 6 from 7 positions as same as the results from detrend analysis. Figure 7 is the results in weddellite. The result of detrend analysis can indicate 6 from 7 positions while only 5 from 7 positions from mutiresolution analysis method.

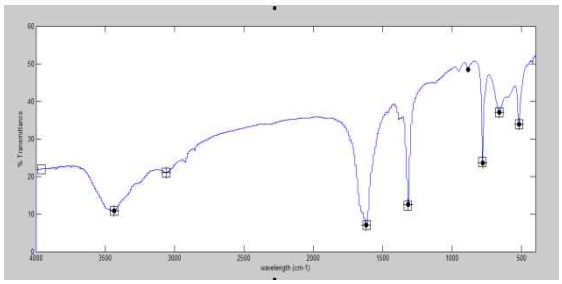


Figure 6. result for whewellite

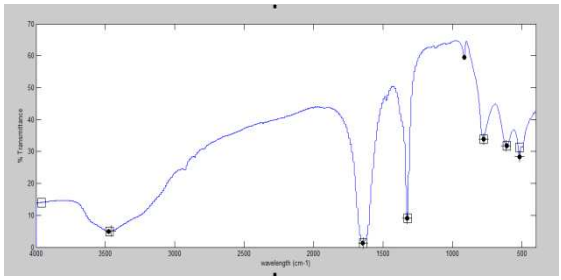


Figure 7. result for weddellite

4.4 Experimental Error

The relative standard deviations (RSD) were used to calculate the analytical errors (6 spectra per sample) [19]. Results are shown in table. II. From the results of whewellite, RSD from both of analysis method was less than 0.5%. Excepting only the weak absorption band of O-H group at 886 cm^{-1}, both of

method could not indicate this peak. In the part of results from weddellite, RSD values from MRA method was less than 0.5%. It could not indicate a small band at 913 cm^{-1} in contrast to detrend analysis method that could do. It has RSD values at a small peak =0.96% while it has RSD less than 0.5% in other peaks.

5. Conclusion

Detrend analysis method using Daubechies wavelets functions order 4 level 4 can indicate peak frequency position for calcium stone's infrared spectrum with a few errors. It has %RSD in maximum range less than multiresolutions analysis method and this implementation will be the guideline for further interpreting infrared spectrum for other urinary stone.

Acknowledgments

The author would like to acknowledge the Department of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, Prince of Songkla University for providing the facilities to carry out this work.

References

[1] Montira Maraukatud, "Urinary Stone," vol.5, Bangkok: O.S. printing house, 2002, pp. 7-61.

[2] Zhang Jing, Wang GuoZeng, Jiang Ning, Yang JiaWei, Gu Yan, and Yang Fang, "Analysis of urinary calculi composition by infrared spectroscopy: a prospective study of 625 patients in eastern China," *Urol Res*, vol. 38, pp. 111-115, 2010.

[3] Scientific equipment center. (2011, Feb, 14). *Rate of service*. [Online]. Available: http://www.sec.psu.ac.th/index2.php.

[4] P. Darmpawan and W. Rukachaisirikul, "Infrared Spectroscopy," in *Spectroscopy of Organic substance*, vol. 6, Songkla: Chemical Department, Prince of Songkla University, 2007, pp.208-270.

[5] John Coates, "Interpretation of Infrared Spectra, A Practial Approach," *Encyclopedia of Analytical Chemistry*, R.A. Meyers, Ed. Chichester: Jonh Wiley & Sons Ltd, pp. 10815-10837, 2000.

[6] Saurin R.Shah, Manhar D.Desai, and Lalite Panchal. "Identification of Content Descriptive Parameters for Classification of Renal Calculi," *International Journal of Signal and Image Processing*, vol.1, no.4, pp. 255-259, 2010.

[7] Shelly Morgan. (2011, Jul, 29). *Difference between calcium oxalate monohydrate & calcium oxalate dehydrate*. [Online]. Available: http://www.livestrong.com/article/504734-difference-between-calcium-oxalate-monohydrate-calcium-oxalate-dihydrate/

[8] Channappa Bhyri, Kalpana. V, S.T.Hamde, and L.M. Waghmare, "Estimation of ECG features using LabVIEW," *TECHNIA*, vol. 2, No. 1, pp. 320-324, July 2009.

[9] *LabVIEW: Advanced Signal Processing Toolkit*, National Instrument, USA. June, 2008.

[10] T E Ayoob Khan, and P Vijayakumar. "Separating Heart Sound from Lung Sound Using LabVIEW," *International Journal of Computer and electrical Engineering*, vol. 2, no. 3, pp. 1793-8163, June, 2010.

[11] LabVIEW for ECG Signal processing, *http://Zone.ni.com/devzone/cda/tut/p/id/6349*.

[12] Miad Faezipour, Tarun M. Tiwari, Adnan Saeed, Mehrdad Nourani, and Lakshman S. Tamil, "Wavelet-Based Denoiseing and Beat Detection of ECG Signal," *2009 IEEE/NIH Life Science Systems and Applications Workshop (LiSSA 2009)*, pp. 100-103, 2009.

[13] Kwang Eun Jang, Sungho Tak, Jinwook Jung, and Jeaduck Jang, "Wavelet minimum description length detrending for near-infrared spectroscopy," *Journal of Biomedical Optics*, vol. 14, no. 3(034004), May/June 2009.

[14] Alexander Kai-man Leung, Foo-tim Chau, and Jun-bin Gao, "A review on applications of wavelet transform techniques in chemical analysis: 1989 – 1997," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 43, pp.165-184, 1998.

[15] Xue-Guang Shao, Alexander Kai-man Leung, and Foo-tim Chau, "Wavelet: A New Trend in Chemistry," *Acc Chem. Res. 2003*, vol. 36, pp. 276-283, 2003.

[16] Hailin Shen, Jihong Wang, Yizeng Liang, Karin Pettersson, Mats Josefson, Johan Gottfries, and Frank Lee, "Chemical rank estimation by multiresolution analysis for two-way data in the presence of background," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 37, pp. 261-269, Jan. 1997.

[17] Daqi Zhan and Suqin Sun, "Application of Wavelet Transform in Improving Resolution of Two-Dimentional Infrared Correlation Spectroscopy," China: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, ICIC 2005, Part II, LNCS 3645, pp. 356-365, 2005.

[18] M. Bos and J.A.M. Vrielink, *Chemometrics and Intelligent Laboratory System*, vol. 23, pp. 115-122, 1994.

[19] Abigail Matteson and Michael M. Herron, "Quantitative mineral analysis by Fourier transform Infrared spectroscopy," *SCA Conference*, no. 9308.

Table 2 Analytical Errors.

Characteristics band	peak positions (cm^{-1})*	whewellite						peak positions (cm^{-1})*	weddellite					
		MRA			detrend				MRA			detrend		
		mean	SD	RSD (%)	mean	SD	RSD (%)		mean	SD	RSD (%)	mean	SD	RSD (%)
O-H stretching vibration	3438	3440.49	5.82	0.16	3439.37	4.93	0.14	3436	3462.40	8.75	0.25	3456.93	10.03	0.29
C=O group stretching vibration	1619	1617.54	2.40	0.14	1619.79	0.75	0.04	1638	1644.63	3.33	0.20	1645.42	1.03	0.06
symmetrical stretching vibration of C=O group	1315	1320.81	5.25	0.39	1315.79	0.38	0.02	1326	1323.28	1.62	0.12	1326.18	0.20	0.01
weak absorption band vibrations of O-H group	886	-	-	-	-	-	-	915	-	-	-	-	-	-
C=O group	780	781.18	0.40	0.05	780.86	0.48	0.06	777	777.53	2.39	0.30	777.69	2.57	0.33
vibration of O-H group	660	662.96	2.87	0.43	663.44	2.21	0.33	610	-	-	-	610.55	5.88	0.96
vibration of C=O group	517	519.38	0.76	0.14	519.60	0.81	0.15	517	517.60	0.49	0.09	517.6	0.49	0.09

*This is peak frequency position reference from EZ OMNIC program