

Thesis Title Application of Chemometrics to Signal Evaluation in Chemical Analysis

Author Miss Karuna Jainontee

Degree Doctor of Philosophy (Chemistry)

Thesis Advisory Committee

Prof. Dr. Kate Grudpan	Advisor
Assoc. Dr. Jaroon Jakmunee	Co-adviser
Asst. Prof. Dr. Dr. Vannajan Sanghiran Lee	Co-adviser
Asst. Prof. Dr. Sukon Prasitwattanaseree	Co-adviser

ABSTRACT

Chemometrics processes were applied for signal evaluation in chemical analysis. Three cases were studied: the first one was clustering analysis with unbiased methods (*k*-means clustering analysis and hierarchical clustering analysis (HCA)) to differentiate cervix cancer patients and ovarian cancer patients from normal persons using protein contents of specific proteoglycan obtained from a flow injection system. The second study involved the treatment of signals obtained from a flow system for Osmotic Fragility Test (OFT) for blood test in screening for thalassemia employing clustering with unbiased methods (*k*-means clustering analysis, HCA and Linear Discriminant Analysis (LDA)) were performed. The third one was the application of chemometrics to simultaneous assay of each substance in ternary mixture of food colorants via spectrophotometric spectra. The techniques involved multivariate calibrations, namely, Principal Component Regression (PCR), Partial Least Square-I (PLS-I) and Partial Least Square-II (PLS-II).

ชื่อเรื่องวิทยานิพนธ์ การประยุกต์เคโมเมตริกส์เพื่อการประมวลสัญญาณในการวิเคราะห์ทางเคมี

ผู้เขียน นางสาวกรรณา ใจนนท์

ปริญญา วิทยาศาสตรดุษฎีบัณฑิต (เคมี)

คณะกรรมการที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์

ศาสตราจารย์ ดร. เกตุ กรุดพันธ์

อาจารย์ที่ปรึกษาหลัก

รองศาสตราจารย์ ดร. จรูญ จักรมณี

อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วรณจันท์ แสงหิรัญ ติ อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุคนธ์ ประสิทธิ์วัฒนเสรี อาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

บทคัดย่อ

กระบวนการทางเคโมเมตริกส์ถูกนำมาใช้ในการวิเคราะห์สัญญาณในการวิเคราะห์ทางเคมีได้ศึกษา 3 กรณี กรณีแรกเป็นการแบ่งกลุ่มโดยวิธีปราศจากอคติ(เค-มินส์ คลัสเตอร์ิง อะนาลิซิส และ อีราซิคอล คลัสเตอร์ิง อะนาลิซิส (เอชซีเอ)) เพื่อจำแนกคนป่วยมะเร็งปากมดลูกและผู้ป่วยมะเร็งรังไข่จากคนปกติ โดยใช้ปริมาณโปรตีนของโปรตีนโอไกล-แคนจำเพาะที่ได้รับจากระบบโพลีอินเจกชัน กรณีที่สองเกี่ยวกับการจัดการกับสัญญาณจากระบบการวิเคราะห์แบบการไหล สำหรับ ออสโมติก แฟรงจิลด์ เทสต์ (โอเอฟที) ในการคัดกรองโรคธาลัสซีเมียด้วยการแบ่งกลุ่มแบบปราศจากอคติ (เค-มินส์ คลัสเตอร์ิง อะนาลิซิส, เอชซีเอ และ ลิเนียร์ ดิสคริมิแนนท์ อะนาลิซิส (แอลดีเอ)) ส่วนในกรณีที่สามนั้นเป็นการใช้เคโมเมตริกส์สำหรับการวิเคราะห์สารองค์ประกอบแต่ละชนิดอย่างพร้อมกัน จากสัญญาณของสเปกโตรโฟโตเมตริกสเปกตรัมในสารผสมแบบสามองค์ประกอบของสีผสมอาหาร โดยเทคนิคที่เกี่ยวข้องกับ มัลติแวลูเอท คาลิเบรชัน ได้แก่ ฟรินชิปอล คอมโพเนนท์ รีเกรสชัน (พีซีอาร์) และพาสเซียส ลีสต แควร์-II (พีแอลเอส-II)