

บทที่ 3

ระบบจำลองระดับยาในเลือด

3.1 การใช้งานแบบจำลองทางเภสัชจลนศาสตร์ทางคลินิก

ในปัจจุบันเท่าที่ผู้วิจัยได้ค้นข้อมูลจากแหล่งต่างๆแล้ว ยังไม่พบว่ามีการพัฒนาซอฟต์แวร์ที่มีวัตถุประสงค์หลักในการจำลองระดับยาในเลือดเพื่อใช้ทางคลินิก แต่ในการทำงานทางคลินิกนั้นสามารถนำซอฟต์แวร์ที่มีอยู่มาปรับใช้ในการทำงานได้ โดยระบบที่มีอยู่ในปัจจุบันนั้น ส่วนใหญ่ใช้เพื่อหาแบบจำลองของยา อาจเป็นยาใหม่ หรือเป็นยาที่มีอยู่แล้วแต่ทำรูปแบบในการใช้ใหม่ โดยยาแต่ละรายการ(item) จะมีชนิดของแบบจำลองที่แน่นอน ยกตัวอย่างเช่นยาที่มีแบบจำลองเป็นคอมพาร์ทเมนต์เดียว ก็จะเป็นคอมพาร์ทเมนต์เดียวไม่ว่าจะเปลี่ยนรูปแบบไปอย่างไร แต่ลักษณะของแบบจำลองของยานั้นเปลี่ยนแปลงได้ หมายความว่าแบบจำลองหนึ่งคอมพาร์ทเมนต์ อาจมีส่วนที่ต่อยื่นขยายออกไปได้เช่น มีส่วนที่มีปัจจัยการดูดซึมเข้ามาเกี่ยวข้อง หรืออาจมีส่วนของการแตกตัวภายนอกเข้ามาเกี่ยวข้องเป็นต้น ลักษณะที่เปลี่ยนแปลงนี้อาจเกิดจากการเปลี่ยนรูปแบบของยา เช่นยา A อาจมีรูปแบบ เม็ด แผ่นแปะ หรือ ยาสอด ซึ่งสิ่งเหล่านี้จะเกี่ยวข้องกับการดูดซึมของยา โดยรูปแบบที่เปลี่ยนไปอาจทำให้ลักษณะการดูดซึมเปลี่ยนแปลงไป และการสลายของยาเปลี่ยนไปด้วย ดังนั้นเนื่องจากยารายการหนึ่งมีชนิดของแบบจำลองที่แน่นอน ตัวแปรที่ใช้ในแบบจำลองนั้นก็ต้องเป็นตัวแปรที่แน่นอนตามไปด้วย การหาแบบจำลอง และตัวแปรของแบบจำลองสามารถหาได้จากขั้นตอนดังต่อไปนี้

3.1.1 การทำงานเพื่อหาระดับยาในเลือดเพื่อนำไประบุชนิดของแบบจำลอง

ในหัวข้อนี้จะอธิบายการหาชนิดของแบบจำลองสำหรับยา ว่าสามารถหาชนิดของแบบจำลองออกมาได้อย่างไร และมีขั้นตอนในการทำงานอย่างไรบ้าง ซึ่งรายละเอียดและขั้นตอนในการทำงานต่าง ๆ จำแนกออกเป็นหัวข้อต่างๆได้ดังนี้

- 1) ขั้นการเตรียมกราฟมาตรฐานสำหรับเปรียบเทียบหาความเข้มข้นโดยการใช้ความเข้มข้นต่างๆซึ่งเป็นลำดับความเข้มข้นที่แน่นอนของยาที่ต้องการหาแบบจำลอง ซึ่งยาตัวอย่างที่ใช้ อาจเป็นการใช้ยาเดี่ยว หรือยาที่ผสมกับตัวอ้างอิง (Reference Substance) แล้วนำไปวิ่งบนคอลัมน์โครมาโตกราฟี (Column Chromato graphy) หรือสเปคโตรมิเตอร์ (Spectrometer) เพื่อใช้ในการเปรียบเทียบในขั้นตอน การหาความเข้มข้นของยาจากตัวอย่างเลือด

2) หาความเข้มข้นของยาจากตัวอย่างเลือด ณ เวลาต่างๆ โดยการนำตัวอย่างเลือดที่ได้ไปวิ่งบนคอลัมน์โครมาโตกราฟี เพื่อหาว่า ณ เวลาที่ต้องการนั้นระดับยามีความเข้มข้นเท่าใด โดยเปรียบเทียบกับ กราฟมาตรฐานที่ได้ทำไว้ในขั้นตอนการเตรียมกราฟมาตรฐาน

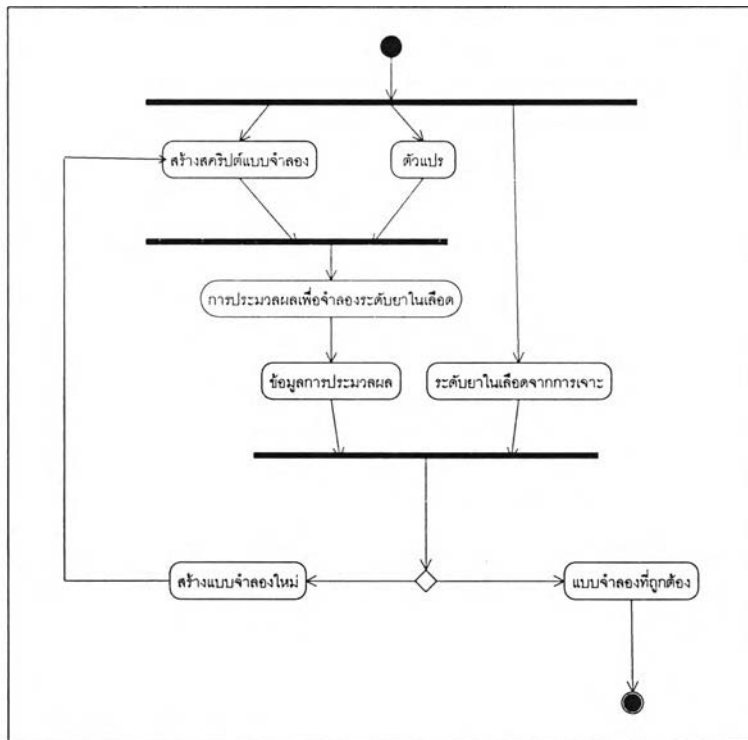
3) ระดับความเข้มข้นของยาในเลือดถูกนำไปสร้างเป็นกราฟความเข้มข้น จากข้อมูลที่ได้นี้จะถูกนำไปสร้างแบบจำลอง โดยแบบจำลองที่ได้อาจเป็นไปได้ทั้งแบบจำลองที่ถูกต้อง หรืออาจไม่เป็นแบบจำลองที่ไม่ถูกต้อง จากแบบจำลองที่ได้สามารถหาค่าตัวแปรต่างๆ สำหรับแบบจำลองออกมาได้ ในการทดสอบแบบจำลองที่ได้ว่าถูกต้องหรือไม่ทำได้โดยใช้ซอฟต์แวร์เข้ามาช่วยในการปรับ ซึ่งลักษณะการทำงานของซอฟต์แวร์อยู่ในหัวข้อ การใช้งานซอฟต์แวร์ ADAPT II

3.1.2 การใช้งานซอฟต์แวร์ ADAPT II

จากขั้นตอนในการหาระดับความเข้มข้นของยาในเลือดในหัวข้อ 3.1.1 จนกระทั่งได้กราฟความเข้มข้นของระดับยาในเลือดมาแล้ว กราฟที่ได้สามารถบอกชนิดของแบบจำลองได้คร่าวๆ โดยหากต้องการทราบว่าแบบจำลองที่คิดไว้นั้นถูกต้องหรือไม่ จะต้องทำการทดสอบโดยการใช่แบบจำลองนั้น คำนวณกลับไปเพื่อดูว่าระดับความเข้มข้นของยาเป็นไปตามลักษณะที่ได้ทำการเจาะมาหรือไม่ ซึ่งในการคำนวณต่างๆที่เกิดขึ้นนั้นต้องใช้การคำนวณทางคณิตศาสตร์เป็นจำนวนมาก จึงต้องมีการนำซอฟต์แวร์เข้ามาช่วยในการคำนวณ และในงานวิจัยนี้ได้ใช้ซอฟต์แวร์ ADAPT II เป็นกรณีศึกษา ซอฟต์แวร์นี้มีการใช้ในการวิจัยในต่างประเทศหลายๆชิ้น มีใช้ในมหาวิทยาลัยหลายแห่งในต่างประเทศ รวมทั้งในประเทศไทยด้วย และมีการพัฒนาซอฟต์แวร์มาอย่างยาวนาน ซอฟต์แวร์นี้แบ่งการทำงานออกได้เป็น 2 ส่วนคือ

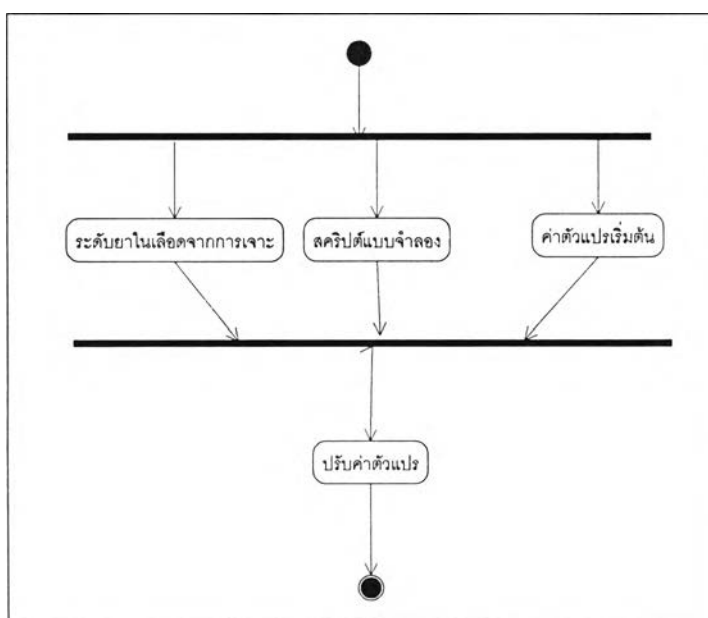
1) การจำลองระดับยา การทำงานในส่วนนี้สามารถอธิบายเป็นขั้นตอนต่างๆได้ด้วยแผนภาพแอกติวิตีรูปที่ 3-1 จากรูปแสดงให้เห็นว่าผู้ใช้งานต้องเตรียมข้อมูลต่างๆ ซึ่งจำเป็นต้องใช้ได้แก่ ตัวแปรที่ใช้สำหรับแบบจำลองซึ่งอาจหาได้จาก ข้อมูลจากตำรา หรือ จากข้อมูลเดิมที่เคยมีอยู่ ตัวแปรเหล่านี้ได้แก่ค่า K_{el} , V_d หรือค่าอื่นๆ ซึ่งขึ้นกับชนิดของแบบจำลอง สิ่งที่ต้องเตรียมอีกอย่างคือสคริปต์สำหรับระบุแบบจำลอง โดยในสคริปต์จะประกอบไปด้วย สูตรแบบจำลอง (Model formula) ซึ่งจะแตกต่างกันไปสำหรับแบบจำลองต่างๆ และสุดท้ายที่ต้องมีคือ ความเข้มข้นของยาในเลือดจากตัวอย่างเลือด ที่ต้องการหาแบบจำลอง เนื่องจากยาที่นำมาจะยังไม่ทราบชนิดของแบบจำลอง เมื่อได้สิ่งที่เป็นสำหรับการทำงานแล้ว ขั้นตอนในการทำงานในส่วนของการหาแบบจำลอง ในขั้นตอนแรกคือ การนำสคริปต์เข้าสู่การทำงาน และ ให้ค่าตัวแปรกับซอฟต์แวร์ ขั้นที่สอง ซอฟต์แวร์ก็จะทำการประมวลผลสิ่งที่ได้รับเข้ามา และสร้างเป็นข้อมูลของชุดความเข้มข้นของยาในเลือดอีกชุดหนึ่ง ขั้นที่สามจากข้อมูลที่ได้ผู้ใช้งานจะนำข้อมูลที่ได้ออกมาทำการเปรียบเทียบกับชุด

ความเข้มข้นของยาที่ได้จากการเจาะเลือดว่ามีความเหมือนกันหรือไม่ หากไม่เหมือนกันก็ต้องกลับไปปรับลักษณะของแบบจำลองใหม่และกลับไปเริ่มต้นอีกครั้ง จนได้แบบจำลองที่เหมาะสมก็เป็นอันสิ้นสุดการทำงาน



รูปที่ 3-1 แสดงขั้นตอนในการหาแบบจำลองทางเภสัชจลนศาสตร์โดย ADAPT II

2) การปรับค่าตัวแปร โดยขั้นตอนการทำงานของส่วนนี้สามารถแสดงได้ดังแผนภาพแอกติวิตีรูปที่ 3-2



รูปที่ 3-2 แสดงขั้นตอนในการปรับค่าตัวแปรโดย ADAPT II

จากรูปเป็นส่วนการทำงานสำหรับการปรับค่าตัวแปรในแบบจำลอง ซึ่งจะต้องใช้ในกรณีที่ทราบแบบจำลองของยาแล้วและต้องการหาค่าตัวแปรซึ่งได้จากตัวอย่าง โดยอาจได้จากผู้ป่วย หรือ ตัวอย่างในงานวิจัย ในส่วนการทำงานนี้สคริปต์แบบจำลองจะมีเพียงชุดเดียวเนื่องจากเป็นยาตัวเดียวและทราบแบบจำลองแล้ว แต่สิ่งที่จะเปลี่ยนไปเรื่อยๆคือชุดข้อมูลของระดับยาในเลือดซึ่งได้จากตัวอย่าง โดยชุดตัวอย่างของระดับยาในเลือดจะถูกให้เข้าไปในซอฟต์แวร์ และต้องกำหนดค่าเริ่มต้นซึ่งเป็นค่าของตัวแปรที่ต้องการปรับ โดยค่าเหล่านี้ได้จากแหล่งข้อมูลตำรา หรือ จากข้อมูลเดิมที่มีอยู่ เมื่อข้อมูลต่างๆครบถ้วนระบบจะทำการคำนวณเพื่อปรับค่าตัวแปรตามจำนวนรอบที่กำหนดให้กับซอฟต์แวร์ เมื่อสิ้นสุดการทำงานก็จะได้ตัวแปรซึ่งเหมาะสมสำหรับตัวอย่างแต่ละชุดซึ่งสามารถนำไปใช้ต่อไปได้

3.1.3 ปัญหาและอุปสรรคในการนำซอฟต์แวร์ ADAPT II มาใช้ทางคลินิก

1) เนื่องจากซอฟต์แวร์ ADAPT II เป็นซอฟต์แวร์ที่เน้นการใช้งานสำหรับงานวิจัย ดังนั้นผู้ที่ใช้ซอฟต์แวร์ได้ต้องมีความรู้ทางด้านคณิตศาสตร์อย่างมากโดยเฉพาะเกี่ยวกับการสร้างแบบจำลอง เนื่องจากต้องมีการใช้ในการสร้างสคริปต์แบบจำลองและการสร้างสคริปต์ต้องใช้คณิตศาสตร์ขั้นสูงหลายอย่าง และต้องมีความรู้ทางเภสัชจลนศาสตร์เชิงลึก คือต้องสามารถมองภาพของแบบจำลองได้อย่างชัดเจน รู้วิธีในการเปลี่ยนแบบจำลองไปเป็นสคริปต์แบบจำลองได้

2) ระบบของซอฟต์แวร์ ADAPT II ไม่มีส่วนติดต่อผู้ใช้ที่เป็นแบบแผนที่แน่นอน คือมีแต่ส่วนถามแล้วก็ตอบคำถามไปเรื่อยๆ หากทำผิดพลาดในขั้นตอนใดขั้นตอนหนึ่งต้องกลับไปเริ่มต้นใหม่ ทำให้ไม่มีความสะดวกในการใช้งาน

3) ซอฟต์แวร์ ADAPT II ต้องอาศัยการสนับสนุนการทำงานโดยฟอร์แทรน (FORTRAN compiler) ไม่สามารถทำงานได้ด้วยตัวซอฟต์แวร์เอง

4) ชุดข้อมูลที่เกิดขึ้นถูกเก็บอยู่ในลักษณะของไฟล์ข้อมูลทำให้ยากต่อการหาความสัมพันธ์ของข้อมูล ยากต่อการนำมาใช้ และข้อมูลไม่สามารถใช้ร่วมกับผู้อื่นได้

3.2 ระบบจำลองระดับยาในเลือดสำหรับงานเภสัชกรรมคลินิก

จากปัญหาและอุปสรรคต่างๆที่ได้กล่าวมาแล้วข้างต้น ผู้วิจัยจึงได้เกิดแนวความคิดในการพัฒนาระบบจำลองระดับความเข้มข้นของยาในเลือดขึ้นมา โดยมีแนวทางดังต่อไปนี้คือ

1) ซอฟต์แวร์จำลองระดับความเข้มข้นระดับยาในเลือดที่ต้องการพัฒนานั้น ต้องมีรูปแบบการทำงานใหม่ให้เหมาะสมกับการทำงานทางคลินิก เช่น สามารถใช้งานได้ง่ายโดยมีส่วน

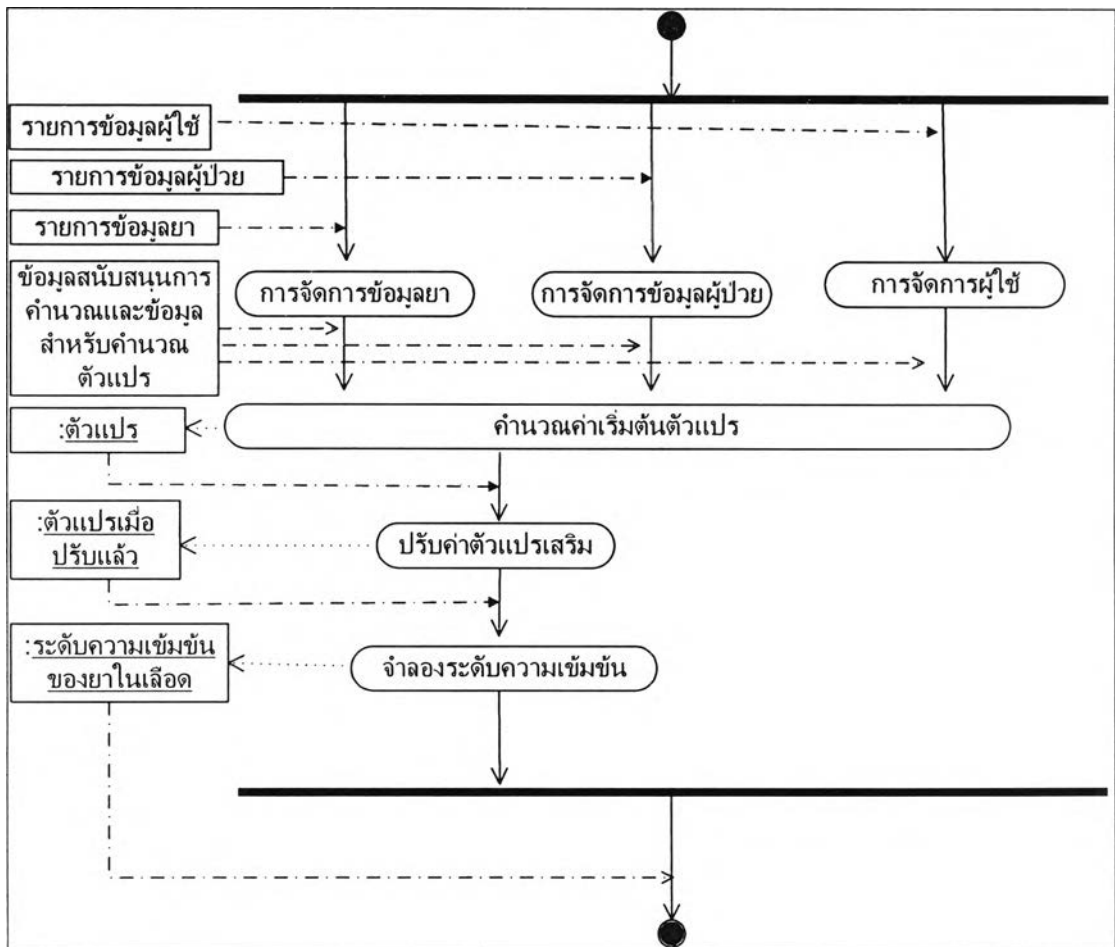
ติดต่อผู้ใช้ที่คงที่ และ ข้อมูลที่ต้องให้กับระบบหากเกิดความผิดพลาดขึ้นก็สามารถทำการแก้ไขได้ รวมไปถึงข้อมูลต้องสามารถเรียกใช้ได้ง่าย

2) ผู้ใช้งานมีเพียงความรู้พื้นฐานทางด้านเภสัชจลนศาสตร์ก็เพียงพอที่จะทำงานได้ และไม่จำเป็นต้องมีความรู้ทางด้านคณิตศาสตร์ในเชิงลึกมากนัก โดยผู้ใช้สามารถเลือกแบบจำลองที่ต้องการได้จากส่วนติดต่อผู้ใช้โดยไม่ต้องสร้างสคริปต์ในการทำงานเอง

3) ซอฟต์แวร์ที่พัฒนาไม่ต้องการการสนับสนุนจากซอฟต์แวร์อื่นในการทำงาน โดยเฉพาะซอฟต์แวร์ในส่วนที่ทำงานบนเครื่องของผู้ใช้ และไม่ต้องการ การจัดการระบบเป็นพิเศษ

4) ระบบที่พัฒนาขึ้นสามารถทำให้เกิดการใช้ข้อมูลร่วมกันได้ ในกลุ่มของการทำงาน เพื่อเหตุผลของความปลอดภัยสำหรับระบบ และ สำหรับข้อมูลที่ใช้ร่วมกันอยู่

จากแนวคิดทั้งหมดที่ได้กล่าวมาระบบจำลองระดับยาในเลือดที่จะใช้ในงานเภสัชกรรมคลินิกควรมีลักษณะการทำงานแสดงได้ดังแผนภาพในรูปที่ 3-3



รูปที่ 3-3 แสดงลักษณะการทำงานของระบบจำลองระดับยาในเลือด

จากรูปนั้นจะเห็นว่าการทำงานเริ่มต้นด้วยการระบุรายการต่างๆไว้ก่อนล่วงหน้าเช่น รายการผู้ใช้ รายการผู้ป่วย และ รายการยา รายการที่ระบุไว้เหล่านี้จะถูกนำมาใช้ในการทำงานเช่นเพื่อพิสูจน์ตัวตน หรือเพื่อคำนวณค่าทางเภสัชจลนศาสตร์ ในการคำนวณทางเภสัชจลนศาสตร์นั้นข้อมูลอาจถูกใช้เพื่อกำหนดความเป็นเอกเทศของข้อมูลเช่น ข้อมูลสำหรับผู้ป่วยรายหนึ่ง มีการใช้ยาใดบ้าง ขนาดเท่าใด เป็นต้น เมื่อสิ้นสุดการทำงานก็จะได้ค่าตัวแปร และระดับยาในเลือดที่จำลองเมื่อนำตัวแปรนั้นไปทำการคำนวณสำหรับผู้ป่วยรายนั้น การใช้งานข้อมูลร่วมกันนั้นข้อมูลการคำนวณค่าตัวแปรสามารถทำการบันทึกและเก็บข้อมูลไว้ในฐานข้อมูล และ สถาปัตยกรรมที่เลือกใช้ในการพัฒนาจะทำให้สามารถเข้าถึงข้อมูลได้ซึ่งในงานวิจัยนี้เลือกใช้สถาปัตยกรรมเว็บเซอร์วิส ดังได้กล่าวไว้แล้วในบทที่ 2 สถาปัตยกรรมนี้สามารถทำให้ผู้ใช้หลายคนเข้าถึงข้อมูลได้พร้อมกัน และ ทำให้ผู้ใช้สามารถเข้าถึงข้อมูลจากบริเวณไหนก็ได้ โดยมีการรักษาความปลอดภัยทั้งจากตัวซอฟต์แวร์เองและ ทั้งจากองค์ประกอบในสถาปัตยกรรมด้วย

3.3 การกำหนดความต้องการของระบบ

ในส่วนตัวต่อไปนี้จะกล่าวถึงการค้นหา เพื่อระบุความต้องการด้านต่างๆ ของระบบเพื่อทำให้ระบบจำลองระดับยาในเลือดสามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยความต้องการเหล่านี้จะทำให้ผู้วิจัยได้ทราบว่า ระบบจำลองระดับยาในเลือดควรมีสิ่งใดบ้างเป็นองค์ประกอบ เพื่อที่จะทำให้การทำงานของระบบที่พัฒนาขึ้นเป็นไปด้วยความราบรื่น โดยข้อมูลนั้นได้มาจากแหล่งต่างๆ ได้แก่

ข้อมูลจากการศึกษาการทำงานของซอฟต์แวร์อื่นที่มีอยู่ เช่นในงานวิจัยนี้ศึกษาจากการทำงานของ ซอฟต์แวร์ ADAPT II ดังที่ได้กล่าวไปแล้วในหัวข้อ 3.1.2 จากการศึกษาการทำงานของซอฟต์แวร์ ADAPT II ทำให้ได้แนวทางในการพัฒนาระบบจำลองระดับยาในเลือด 2 ประการคือ ประการที่ 1 ขั้นตอนและวิธีที่ใช้ในการคำนวณ โดยในซอฟต์แวร์นี้จะมีวิธีการคำนวณเพื่อปรับค่าตัวแปรโดยใช้ การค้นหาแบบลึกลงไปมากที่สุด (steepest descending) และมีรูปแบบในการเปรียบเทียบหรือที่เรียกว่าการ ฟิตติ้ง (fitting) ด้วยวิธีการต่างๆเช่น การใช้ผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด (General Least Square) การใช้ผลรวมกำลังสองแบบถ่วงน้ำหนัก (Weighing Least Square) และ การใช้วิธีการแบบเหมือนมากที่สุด (Maximum Likelihood) แต่ผู้วิจัยมีแนวคิดว่าการค้นหาแบบลึกลงไปมากที่สุด อาจไม่สามารถหาค่าที่อยู่ในพื้นที่อื่นที่มีค่าของผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดได้จึงได้เลือกใช้วิธีในการค้นหาในรูปแบบอื่นและผู้วิจัยเห็นว่าวิธีการค้นหาแบบ การค้นหาแบบสามจุด (Triplex search) น่าจะค้นหาค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดที่อยู่ในพื้นที่อื่นได้ จึงเลือกใช้วิธีการค้นหาในการค้นหาค่าของผลรวมของผลต่างกำลัง

สองน้อยที่สุด และเลือกใช้การเปรียบเทียบแบบกำลังสองน้อยที่สุดเพียงอย่างเดียว ประการที่สอง ด้านการใช้งานซอฟต์แวร์ การใช้งานซอฟต์แวร์ ADAPT II ค่อนข้างจะมีความยุ่งยากเนื่องจากส่วนติดต่อผู้ใช้ที่ไม่คงที่คือมีการถาม-ตอบ ไปเรื่อยๆ การทำงานต้องลำดับขั้นตอนไว้ก่อนล่วงหน้าหากขั้นตอนที่เกิดขึ้นผิดพลาดจากที่ต้องทำ ก็ต้องกลับไปเริ่มการทำงานใหม่หมด ระบบจำลองระดับยา ในเลือดควรแก้ไขความไม่สะดวกต่างๆที่เกิดขึ้นในซอฟต์แวร์ ADAPT II ได้เช่น ระบบที่พัฒนาควรมีส่วนติดต่อผู้ใช้ที่ทำให้การใช้งานง่ายขึ้น

ข้อมูลจากการศึกษาขั้นตอนต่างๆในการทำงานทางด้านเภสัชกรรมคลินิกในการดูแลผู้ป่วย เช่นหลังจากการให้ยากับผู้ป่วยแล้ว จากนั้นต้องทำการเจาะเลือดผู้ป่วย แล้วนำไปผ่านขั้นตอนของการหาระดับยาในเลือด และค่าความเข้มข้นที่ได้ก็จะไปสู่ขั้นตอนการคำนวณค่าทางเภสัชจลนศาสตร์ หรืออื่นๆต่อไป จากสิ่งเหล่านี้จะทำให้ทราบถึงลำดับในการทำงาน ดังนั้นในระบบที่ต้องการพัฒนาจะได้แนวคิดเรื่องลำดับในการเปลี่ยนแปลงส่วนติดต่อผู้ใช้ว่าควรจะมีการเปลี่ยนแปลงจากส่วนติดต่อหนึ่งไปยังอีกส่วนติดต่อหนึ่งอย่างไร หรือการเคลื่อนที่ของข้อมูล เช่น การนำข้อมูลเข้าสู่ระบบควรนำข้อมูลจากขั้นตอนใดเข้ามาบ้าง ขอยกตัวอย่างในกรณีของการรับข้อมูลความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ข้อมูลที่ควรนำเข้าก็ควรมีข้อมูลของผู้ป่วยที่ได้ทำการตรวจวัดระดับยาในเลือดมา ควรมีข้อมูลว่ายาที่ใช้เป็นยาใด และมีแบบจำลองที่เลือกใช้ ข้อมูลเหล่านี้ระบบควรจะได้มาจากไหน ได้จากผู้ใช้ หรือ ได้จากฐานข้อมูล ขั้นตอนของการทำงานจะช่วยในการออกแบบส่วนติดต่อผู้ใช้และ การเปลี่ยนแปลงที่เกิดขึ้นระหว่างส่วนติดต่อผู้ใช้แต่ละอัน

ข้อมูลจากการสอบถามข้อมูลจากผู้ที่ทำงานทางด้านงานวิจัยต่างๆที่เกี่ยวกับการใช้งานแบบจำลองทางเภสัชจลนศาสตร์ เพื่อหาข้อมูลของแบบจำลองทางเภสัชจลนศาสตร์ รวมทั้งการปรับใช้ และผู้ที่ทำงานกับแบบจำลองทางเภสัชจลนศาสตร์อาจเคยใช้ซอฟต์แวร์อื่นที่ใช้ในการหาแบบจำลองเช่นเดียวกับซอฟต์แวร์ ADAPT II ข้อมูลนี้จะทำให้ได้แนวคิดในแง่ของลักษณะการทำงานของซอฟต์แวร์ที่แตกต่างออกไปจากการทำงานของซอฟต์แวร์ ADAPT II ข้อมูลที่ได้จะช่วยให้เห็นภาพการทำงานระบบที่กว้างขึ้นช่วยให้ซอฟต์แวร์ที่พัฒนาได้คุณลักษณะที่หลากหลายขึ้น เนื่องจากคุณลักษณะพิเศษบางอย่างจะช่วยเพิ่มความสะดวกต่อการทำงานกับซอฟต์แวร์ เช่นในซอฟต์แวร์ KINETICA เป็นซอฟต์แวร์ที่มีส่วนติดต่อที่ดี มีการนำเข้าข้อมูลในรูปแบบลักษณะสเปรดชีต (Spread Sheet) และเก็บข้อมูลในรูปแบบของเอกสารเอ็กซ์เซล (Excel) ซึ่งข้อมูลนำกลับมาใช้ได้ง่าย คุณลักษณะนี้ก็นำมาปรับใช้ในซอฟต์แวร์การจำลองระดับยาในเลือดแต่เปลี่ยนจากการเก็บข้อมูลในเอกสารเอ็กซ์เซล มาเป็นการเก็บข้อมูลในฐานข้อมูลแทนซึ่งการเรียกใช้ข้อมูลง่ายกว่า และข้อมูลใช้ร่วมกันระหว่างซอฟต์แวร์ง่ายกว่าอีกด้วย เป็นต้น

สิ่งเหล่านี้จะนำมาประกอบกันเข้าเพื่อให้ได้ระบบที่สามารถทำงานได้ครบตามความต้องการในการใช้งาน และผู้วิจัยได้แบ่งความต้องการของระบบออกเป็น ความต้องการด้านต่างๆ คือ

3.3.1 ความต้องการด้านหน้าที่

เป็นความต้องการของระบบที่ใช้สำหรับระบุรายละเอียดของระบบที่ต้องการ ว่าควรจะเป็นประกอบไปด้วยการทำงานใดบ้าง และ ในแต่ละการทำงานนั้นต้องใช้องค์ประกอบใดร่วมด้วย เพื่อให้การทำงานของระบบในส่วนนั้นๆสำเร็จลุล่วงไปได้แบ่งการระบุความต้องการออกเป็น 2 ส่วนคือ

1) ส่วนเว็บแอปพลิเคชัน (Web Application)

เป็นส่วนที่ใช้สำหรับทำการเพิ่ม เปลี่ยนแปลง หรือ ลบข้อมูลที่เป็นข้อมูลทั่วไป ไม่มีหน้าที่เกี่ยวข้องกับการคำนวณค่าต่างๆ ความต้องการทางด้านหน้าที่ในส่วนการทำงานนี้ แบ่งแยกได้สองกลุ่ม ดังต่อไปนี้คือ

(1) การทำงานที่ทำได้เฉพาะผู้บริหารระบบ งานที่อยู่ในกลุ่มนี้ได้แก่

- การเพิ่มข้อมูลผู้ใช้งาน รวมทั้งการให้สิทธิ์ในการใช้งาน เป็นการเพิ่มข้อมูลผู้ใช้งานระบบ และกำหนดสิทธิ์ในการใช้ พร้อมทั้งรายละเอียดที่จำเป็น เพื่อใช้สำหรับระบุตัวตนผู้ใช้ รายละเอียดระบุไว้ใน ตารางที่ ก-2 ในภาคผนวก ก

- การแก้ไขข้อมูลผู้ใช้งาน รวมทั้งการเปลี่ยนสิทธิ์การใช้งาน รายละเอียดดูในแสดงไว้ดังตารางที่ ก-3 ในภาคผนวก ก

- การลบรายการผู้ใช้งาน รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-4 ในภาคผนวก ก

(2) การทำงานที่ทำได้ทั้งผู้บริหารระบบ และผู้ใช้ทั่วไป

- การตรวจสอบสิทธิ์ผู้ใช้งาน หรือ ผู้บริหารระบบ ทำหน้าที่ในการตรวจสอบสิทธิ์ในการเข้าใช้งานสำหรับ ผู้บริหารระบบ และ ผู้ใช้ รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-1 ในภาคผนวก ก

- การเพิ่มข้อมูลผู้ป่วย รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-5 ในภาคผนวก ก

- การแก้ไขข้อมูลผู้ป่วย รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-6 ในภาคผนวก ก

- การเพิ่มข้อมูลยา รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-7 ในภาคผนวก ก

- การแก้ไขรายละเอียดเกี่ยวกับยา รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-8 ในภาคผนวก ก

- การออกรายงาน รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-25 ในภาคผนวก ก

2) ส่วนแอฟเพล็ต (Applets)

ประกอบด้วยส่วนของการทำงานซึ่งแบ่งโดยอาศัยขั้นตอนในการทำงาน จะแบ่งออกได้ดังนี้

(1) การรับข้อมูลเพื่อกำหนดค่าให้กับเวกเตอร์เพื่อนำไปคำนวณตำแหน่งของจุดความเข้มข้น ประกอบด้วยขั้นตอนย่อยอีก 5 ขั้นตอนคือ การเพิ่มแถวให้แบบจำลองตารางรายละเอียดระบุไว้ในตารางที่ ก-9 การรับข้อมูลก่อนกำหนดค่าให้เวกเตอร์แสดงรายละเอียดไว้ในตารางที่ ก-11 การลดจำนวนแถวของแบบจำลองตารางรายละเอียดระบุไว้ในตารางที่ ก-10 การกำหนดค่าให้กับเวกเตอร์รายละเอียดระบุไว้ในตารางที่ ก-12 และ กำหนดค่าให้กับแบบจำลองตารางข้อมูลเพื่อใช้ในการคำนวณการประมาณค่ารายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-13 ทุกตารางอยู่ในภาคผนวก ก และเมื่อผู้ใช้งานเพิ่มแถวข้อมูลแล้วจึงจะสามารถเพิ่มข้อมูล หรือ แก้ไขข้อมูลในตารางได้

(2) คำนวณเพื่อวาดจุดจากการเก็บตัวอย่าง หลังจากได้กำหนดค่าความเข้มข้นที่ได้เก็บตัวอย่างมาให้กับเวกเตอร์แล้วระบบจะทำการคำนวณค่าของตำแหน่งการแสดงผลของจุดออกมา และ แสดงตำแหน่งบนส่วนแสดงผล รายละเอียดได้ระบุไว้ในตารางที่ ก-14 โดยในการคำนวณมีวิธีการคือ เมื่อผู้ใช้ให้ข้อมูล ซึ่งต้องมีข้อมูลครบถ้วน ประกอบด้วย เวลาที่ได้ทำการเจาะหาความเข้มข้น(Sampling) ความเข้มข้นที่ตรวจวัดได้ และผู้ใช้งานต้องทำการกำหนดหน่วยของความเข้มข้นเสมอ สำหรับค่าเริ่มต้นของหน่วยความเข้มข้นนั้น มีหน่วยเป็นมิลลิกรัม และในการแสดงผลข้อมูลจากตารางนั้นต้องทำการอ่านค่าข้อมูลทั้งหมดจากแบบจำลองของตาราง จากนั้นจึงทำการกำหนดค่าให้กับ เวกเตอร์ซึ่งเป็นชนิดข้อมูลประเภทหนึ่ง เมื่อได้เวกเตอร์ซึ่งบรรจุข้อมูลแล้ว จึงนำค่าเวกเตอร์นี้ไปทำการคำนวณเพื่อแสดงผลบนส่วนการแสดงผล ในการคำนวณนั้นมีวิธีการคือ ความเข้มข้น และเวลาซึ่งอ่านมาจากเวกเตอร์นั้นจะต้องถูกเปลี่ยนให้อยู่ในรูปของลอการิทึม ก่อนที่จะถูกคำนวณออกมาในหน่วยของพิกเซล (pixel) โดยกำหนดว่า ในแนวแกน X กำหนดให้ 20 พิกเซลจะมีค่าเท่ากับหนึ่งหน่วยชั่วโมง ทั้งนี้ต้องทำการหัก 25 พิกเซลซึ่งเป็นขอบด้านหน้าสำหรับเป็นช่องว่างหรือเนื้อที่ให้ใช้สำหรับใส่ค่าตัวเลข เครื่องหมายกำหนดต่างๆ และค่าอธิบายแกน โดยจำนวนชั่วโมงทั้งหมดคือ 24 ชั่วโมง ในแนวแกน Y กำหนดให้ 30 พิกเซลจะมีค่าเท่ากับ หนึ่งหน่วยลอการิทึม ด้านบนให้เริ่มต้นจากจุด 25 พิกเซล และสิ้นสุดที่ 330 พิกเซล โดยค่าในแนวแกน X นั้นจะใช้สมการในการคำนวณดังนี้

$$\text{plotX} = 25 + (\text{VectorXVal} * 20)$$

ค่าของ plotX หมายถึงค่าของจุดที่จะต้องวาดออกมาเป็นตำแหน่งของจุด บนแกน X

ค่าของ VectorXVal หมายถึงค่าของเวลาที่ได้จากเวกเตอร์

ค่าในแนวแกน Y นั้นจะใช้สมการในการคำนวณคือ

$$\text{plotX} = 25 + (\text{VectorXVal} * 20)$$

ค่าของ plotX หมายถึงค่าของจุดที่จะต้องวาดออกมาเป็นตำแหน่งของจุด บนแกน X

ค่าของ VectorXVal หมายถึงค่าของเวลาที่ได้จากเวกเตอร์

ค่าในแนวแกน Y นั้นจะใช้สมการในการคำนวณคือ

$$\text{plotY} = 330 - (\text{VectorYVal} * 30)$$

ค่าของ plotY หมายถึงค่าของจุดที่จะต้องวาดออกมาเป็นตำแหน่งของจุดบนแกน Y

ค่าของ VectorYVal หมายถึงค่า ของความเข้มข้นที่ได้จากเวกเตอร์และถูกเปลี่ยนให้อยู่ในรูปของลอการิทึมแล้ว

(3) คำนวณเพื่อวาดจุดและค่าของจุด การทำงานจะมีสองขั้นตอนคือ หลังจากได้รับตำแหน่งการเลือกของผู้ใช้ระบบจะคำนวณตำแหน่งการเลือกแล้วแสดงผล และเมื่อผู้ใช้กระทำขั้นตอนนี้สมบรูณ์ระบบจะทำการคำนวณค่าตัวแปรให้ รายละเอียดได้ระบุไว้ในตารางที่ ก-15 ถึง ตาราง ก-16 ในภาคผนวก ก โดยแนวคิดในการคำนวณเพื่อแสดงผลข้อมูลคือ การวาดจุดบนส่วนแสดงผล ซอฟต์แวร์จะทำการตรวจสอบก่อนว่ามีค่าที่ผู้ใช้ระบุให้กับเวกเตอร์หรือไม่ หากยังไม่ได้ทำการกำหนดค่าซอฟต์แวร์จะไม่ยอมให้ผู้ใช้วาดจุดไปบนบริเวณแสดงผล แต่หากผู้ใช้ได้ทำการกำหนดค่าให้กับเวกเตอร์แล้วผู้ใช้สามารถจะวาดจุดบนส่วนแสดงผลได้ และแบ่งขั้นตอนในการคำนวณออกเป็น 2 ขั้นตอนดังนี้

– การคำนวณเพื่อวาดจุดที่ผู้ใช้เลือกบนส่วนแสดงผล

เมื่อผู้ใช้เลือกจุดบนส่วนแสดงผลระบบจะทำการตรวจสอบเงื่อนไขที่ตรงตามแบบจำลองแบบต่างๆว่าเป็นไปตามเงื่อนไขหรือไม่โดยแยกเป็น 4 กรณีคือ

กรณีที่ 1 แบบจำลองหนึ่งคอมพาร์ทเมนต์ แบบให้ยาทางหลอดเลือด ไม่กำหนดเงื่อนไขพิเศษใดๆซอฟต์แวร์จะทำการตรวจสอบว่าผู้ใช้ได้ทำการเลือกจุดไปที่จุดแล้ว หากผู้ใช้ทำการเลือกหนึ่งจุดซึ่งเป็นจุดแรกก็จะทำการวาดจุดตรงที่ผู้ใช้ทำการคลิกเลือกด้วยเมาส์ และทำการคำนวณ

คำว่า ณ จุดนั้นมีค่าของความเข้มข้นเป็นเท่าใด และเวลาเป็นเท่าใด แล้วทำการเขียนค่าที่คำนวณได้ไปบนจอภาพ

กรณีที่ 2 แบบจำลองหนึ่งคอมพาร์ทเมนต์ แบบให้ยานอกหลอดเลือด ต้องตรวจสอบว่าจุดซึ่งได้ทำการตรวจวัดมานั้นมีจำนวนจุดมากกว่าหรือเท่ากับ 3 จุดหรือไม่ หากจำนวนไม่ครบตามที่กำหนด ซอฟต์แวร์จะไม่วาดจุดไปบนส่วนแสดงผล แต่หากผ่านเงื่อนไขก็จะวาดจุดไปบนส่วนแสดงผล

กรณีที่ 3 แบบจำลองสองคอมพาร์ทเมนต์ แบบให้ยาทางหลอดเลือด ต้องตรวจสอบว่าจุดซึ่งได้ทำการตรวจวัดมานั้นมีจำนวนจุดมากกว่าหรือเท่ากับ 3 จุดหรือไม่ หากจำนวนไม่ครบตามที่กำหนด ซอฟต์แวร์จะไม่วาดจุดไปบนส่วนแสดงผล แต่หากผ่านเงื่อนไขก็จะวาดจุดไปบนส่วนแสดงผล

กรณีที่ 4 แบบจำลองสองคอมพาร์ทเมนต์ แบบให้ยานอกหลอดเลือด ต้องตรวจสอบว่าจุดซึ่งได้ทำการตรวจวัดมานั้นมีจำนวนจุดมากกว่าหรือเท่ากับ 4 จุดหรือไม่ หากจำนวนไม่ครบตามที่กำหนด ซอฟต์แวร์จะไม่วาดจุดไปบนส่วนแสดงผล แต่หากผ่านเงื่อนไขก็จะวาดจุดไปบนส่วนแสดงผล

โดยการคำนวณค่าตำแหน่งเพื่อแสดงผลสำหรับทั้ง 4 กรณีหาได้จากสมการ ดังนี้

ค่าในแนวแกน X นั้นจะใช้สมการในการคำนวณคือ

$$Tvalue = (Xvalue / 20) - 25$$

ค่าของ *Tvalue* หมายถึงค่าเวลาที่คำนวณได้

ค่าของ *Xvalue* หมายถึงค่าตำแหน่งที่ผู้ใช้เลือกตามแนวแกน X

ค่าในแนวแกน Y นั้นจะใช้สมการในการคำนวณคือ

$$Cvalue = (300 - Yvalue) / 30$$

ค่าของ *Cvalue* คือค่าของความเข้มข้นที่คำนวณออกมาได้

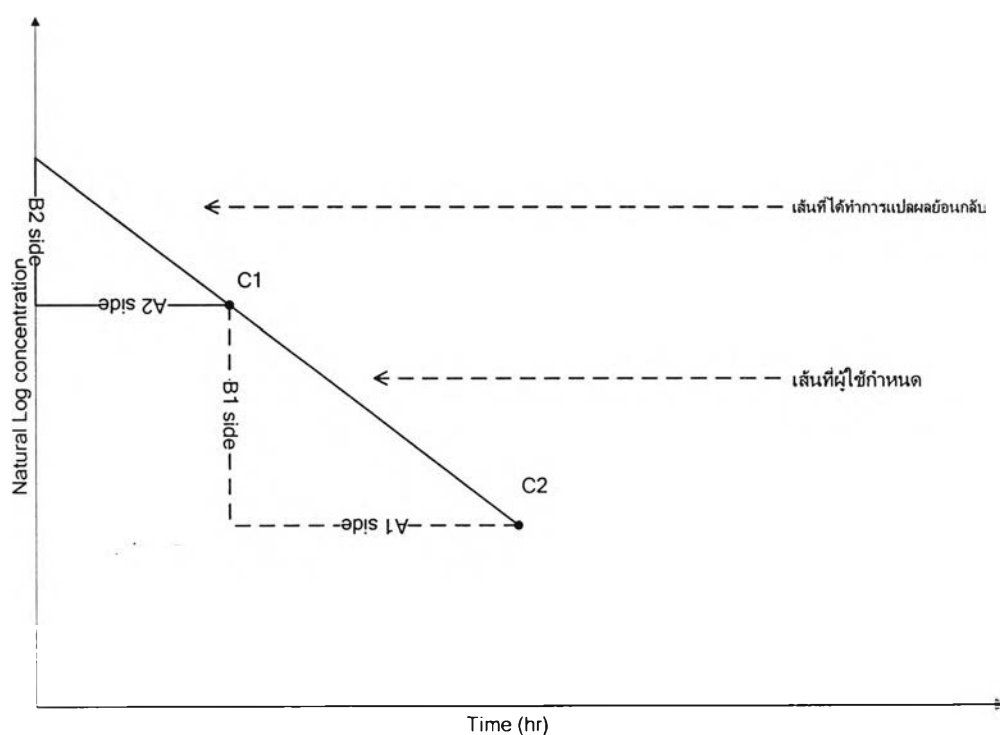
ค่าของ *Yvalue* หมายถึงค่า ของพิกเซลที่ผู้ใช้เลือกในแนวแกน Y

- การคำนวณค่าตัวแปร

หากผู้ใช้ทำการเลือกจุดซึ่งเป็นจุดที่สอง ซอฟต์แวร์จะทำการคำนวณค่าของจุดด้วยวิธีเดียวกันกับที่ได้คำนวณในการวาดจุดหนึ่งจุด แล้วทำการแสดงค่าออกมาบนส่วนแสดงผล และทำการวาดเส้นเพื่อแสดงความสัมพันธ์แบบเส้นตรงระหว่างจุดสองจุดที่ผู้ใช้ได้ทำการเลือกไว้ ในความ

เป็นจริงแล้วความสัมพันธ์ของสมการหรือแบบจำลองทั้งหนึ่งและสองคอมพาร์ทเมนต์ของความเข้มข้นกับเวลาเป็นความสัมพันธ์แบบสมการยกกำลัง (Exponential) แต่เพื่อให้ผู้ใช้งานทำงานได้สะดวกขึ้น จะใช้ปฏิบัติการ (Operation) ลอการิทึมกับแกนของความเข้มข้นเปลี่ยนความสัมพันธ์ให้เป็นเส้นตรง เมื่อการลากเส้นเสร็จสมบูรณ์ ระบบจะทำการคำนวณตัวแปร ซึ่งจะแบ่งการคำนวณตามกรณีต่างๆ คือ

การคำนวณจุดที่สองตามกรณีที่ 1 การคำนวณตัวแปรตามแบบจำลองคอมพาร์ทเมนต์เดียวโดยให้ยาทางหลอดเลือด กราฟความเข้มข้นจากการกำหนดจุดโดยผู้ใช้แสดงได้ดังรูปที่ 3-4



รูปที่ 3-4 แสดงกราฟที่ได้จากการกำหนดจุดโดยผู้ใช้ใน แบบจำลองคอมพาร์ทเมนต์เดียวโดยการให้ยาทางหลอดเลือด

หลังจากการวาดเส้นจากจุดที่ผู้ใช้เลือกแล้วระบบจะทำการคำนวณค่า ความชันของเส้น ซึ่งจะใช้ก็คือค่าคงที่ในการขจัดยาออกจากกระแสเลือด (K_{el}), คำนวณหาจุดตัดบนแกนตั้ง ซึ่งเป็นค่า ลอการิทึมของความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ในการคำนวณหาจุดตัดนั้นจะใช้ทฤษฎีทาง เรขาคณิตมาใช้ เพื่อช่วยในการคำนวณหาจุดตัดโดยมีวิธีการดังนี้

เมื่อเส้นที่ผู้ใช้กำหนดและเส้นที่ต้องการทำการแปลผลย้อนกลับเป็นเส้นตรงที่อยู่ในแนวเดียวกัน ดังนั้น ความชันของเส้นตรงทั้งสองนั้นจะมีค่าเท่ากันและจะได้ว่าอัตราส่วนระหว่าง $B2/A2$ จะมีค่าเท่ากับ $B1/A1$ (ตามกฎของสามเหลี่ยมคล้าย)

$$\text{จะได้ว่า} \quad B2/A2 = B1/A1$$

จึงสามารถที่จะหาความยาวของด้านที่ต้องการซึ่งก็คือด้าน B2 ได้เมื่อทราบระยะของ A1, B1 และ A2

การคำนวณค่าของด้านนั้นให้กลับไปพิจารณาจากกราฟ รูปที่ 3-4 การหาค่าของความยาวด้านแต่ละด้านทำได้โดยสมการดังต่อไปนี้

$$\text{ความยาวด้าน } A1 = \sqrt{(t2 - t1)^2 + (C_2 - C_1)^2}$$

$$\text{ความยาวด้าน } B1 = \sqrt{(t2 - t1)^2 + (C_2 - C_1)^2}$$

หลังจากได้ทำการคำนวณค่าของ ด้าน B2 มาแล้วให้นำมาบวกเข้ากับค่า ณ แกนของลอการิทึมความเข้มข้น ซึ่งเป็นค่าของจุดปลายด้านที่มีค่าของเวลาน้อยกว่า ดังแสดงในภาพคือจุด C₁ (ในกรณีที่ความชันเป็นลบ) หรือนำค่าที่คำนวณได้นี้มาลบออกจากค่า ณ แกนของความเข้มข้น ซึ่งเป็นค่าของจุดปลายด้านที่มีค่าของเวลาน้อยกว่า (ในกรณีที่ความชันเป็นบวก) เมื่อทำการต่อเส้นจากจุด C₁ ไปยังจุดตัดแกน Y ที่หาได้ก็จะได้เส้นประดังรูปที่ 3-4 แสดงไว้ เรียกวิธีการแบบนี้ว่าการแปลผลย้อนกลับ (Back Extrapolation) และการที่ต้องกำหนดเงื่อนไขการบวก หรือ ลบ ในแต่ละกรณีเช่นที่กล่าวไปแล้ว ก็เนื่องจากผู้ใช้อาจจะทำการวาดเส้นกราฟโดยไม่ตั้งใจ หรือ อาจวาดกราฟที่อยู่นอกเหนือเงื่อนไขอันอาจทำให้เกิดความผิดพลาดต่อการทำงานของซอฟต์แวร์ได้ เมื่อได้ทำการคำนวณค่าของจุดตัดบนแกนลอการิทึมความเข้มข้นแล้ว จะได้ค่าของลอการิทึมความเข้มข้นเริ่มต้นของยาที่ใช้สำหรับผู้ป่วยรายนั้น ความเข้มข้นที่ได้สามารถนำไปทำการคำนวณหาค่าปริมาตรการกระจาย (Volume of Distribution) ของยาที่ต้องการได้ด้วยสมการคือ

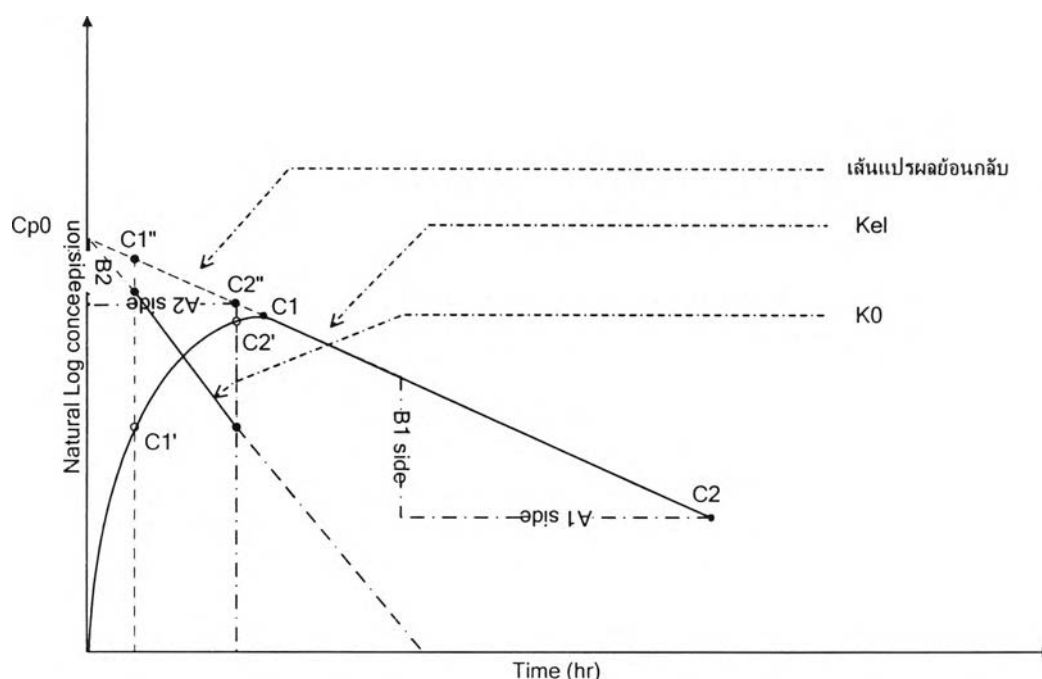
$$Vd = \frac{\text{Dose}}{C_p^0}$$

โดยค่าของ $C_p^0 = Y \text{ intercept}$ ซึ่งก็คือจุดตัดแกน Y ของเส้นตรงที่ผู้ใช้ได้ทำการเลือก

จากค่าของความชัน และ ค่าปริมาตรการกระจายที่หาได้จากแผนภาพ จะนำไปทำการประมาณค่า นอกจากนั้นซอฟต์แวร์ยังต้องคำนวณ ค่าผลรวมกำลังสองมาตรฐาน (Standard Sum Square) ซึ่งเป็นค่าผลรวมกำลังสองมาตรฐานซึ่งได้จากการคำนวณโดยใช้ค่าตัวแปรที่ได้จากการคำนวณที่กล่าวมาแล้วข้างต้น เพื่อใช้เป็นค่าเปรียบเทียบกับค่าผลรวมกำลังสองซึ่งคำนวณในระหว่างการทำ

การประมาณค่า เมื่อได้ค่าของ ตัวแปร และค่าของผลรวมกำลังสองมาตรฐานแล้ว ซอฟต์แวร์จะทำการเก็บค่าของตัวแปรเหล่านั้นไว้ในหน่วยความจำเพื่อนำไปใช้ในขั้นตอนการคำนวณเพื่อปรับค่าแบบจำลอง

การคำนวณจุดที่สองตามกรณีที่ 2 การคำนวณตัวแปรตามแบบจำลองคอมพิวเตอร์ที่เดียวโดยให้ยานอกหลอดเลือด กราฟความเข้มข้นจากการกำหนดจุดโดยผู้ใช้แสดงได้ดังรูปที่ 3-5



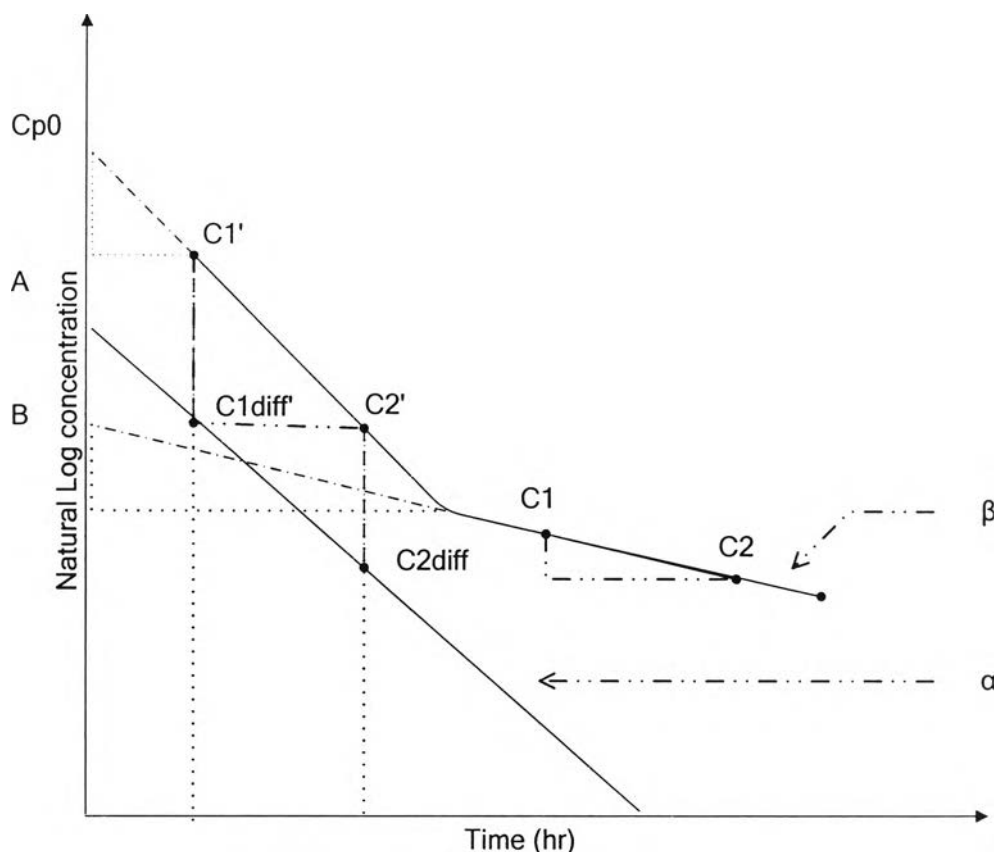
รูปที่ 3-5 แสดงกราฟที่ได้จากการกำหนดจุดโดยผู้ใช้ในแบบจำลองคอมพิวเตอร์ที่เดียวโดยการให้ยานอกหลอดเลือดหลังจากการวาดจุดโดยการอ่านค่าจากเวกเตอร์

เมื่อได้ทำการวาดจุดซึ่งได้จากการตรวจวัดระดับยาในเลือด ซึ่งอ่านได้จากเวกเตอร์ซึ่งผู้ใช้ได้ทำการกำหนดไว้แล้ว ผู้ใช้สามารถทำการวาดจุดในลักษณะเดียวกับที่ได้ทำในการวาดจุดในแบบจำลองแบบคอมพิวเตอร์ที่เดียว และให้ยานอกหลอดเลือด จากรูปคือเส้นที่เกิดจากจุด C_1, C_2 แต่จะมีข้อจำกัดและความแตกต่าง สำหรับแบบจำลอง คอมพิวเตอร์ที่เดียว แต่ให้ยานอกหลอดเลือดคือจุดที่ต้องทำการเจาะและหาความเข้มข้นออกมานั้นต้องมากกว่า 3 จุดขึ้นไปแต่ขอแนะนำว่าให้พยายามเจาะหาระดับความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ให้มีจำนวนจุดมากที่สุด ที่สุดเท่าที่จะทำได้ เนื่องจากการที่มีจำนวนจุดในการคำนวณน้อยจุด ความคลาดเคลื่อนก็จะมีค่ามากไปด้วย เส้นที่ทำ

การวาดนั้นจะต้องมีสองจุดแรกของค่าความเข้มข้นต้องอยู่ต่ำกว่าเส้น หรือกล่าวอีกอย่างได้ว่า ความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ณ เวลาของความเข้มข้นสองจุดแรกต้องเป็นค่าที่น้อยกว่าความเข้มข้นของระดับยาในเลือดซึ่งคำนวณได้จากค่าที่อยู่บนเส้นตรงที่ผู้ใช้ทำการวัดในสองจุดแรก ขอแนะนำว่าการกำหนดระยะเวลาในการเจาะหาความเข้มข้นของระดับยาในเลือดในกรณีนี้สำคัญมาก ค่าสองจุดแรกที่ใช้เป็นค่าอ้างอิงสำหรับการคำนวณค่าความชันของเส้นตรงซึ่งแสดงค่าของค่าคงที่ในการดูดซึมของยา (K_0) ซึ่งแสดงไว้ในรูปที่ 3-5 จะถูกตัดออกไปในขั้นตอนในการคำนวณ ผลรวมกำลังสอง

ในการคำนวณค่าตัวแปรสำหรับแบบจำลองหนึ่งคอมพาร์ทเมนต์ โดยให้ยานอกหลอดเลือดนั้น มีขั้นตอนคือ เมื่อผู้ใช้ได้ทำการเลือกจุดครบสองจุดแล้วซอฟต์แวร์จะทำการตรวจสอบเงื่อนไขที่กำหนดไว้คือ จุดสองจุดแรกที่ได้ทำการตรวจวัดระดับยาในเลือดมา (อ่านจากเวกเตอร์) นั้นอยู่ใต้เส้นหรือมีค่าน้อยกว่าที่เกิดจากจุดสองจุดที่ผู้ใช้กำหนดหรือไม่ หากว่ามีจุดใดจุดหนึ่งหรือทั้งสองจุดอยู่เหนือเส้นที่ผู้ใช้กำหนดหรือมีค่ามากกว่า จะทำการลบจุดทั้งสองจุดที่ได้กำหนดไว้นั้นออกไปจากหน้าจอแสดงผลและแจ้งเตือนให้ทำการเลือกตำแหน่งของจุดที่เหมาะสมใหม่ พร้อมแสดงข้อความแจ้งให้ทราบว่าจุดไหนเลือกได้ถูกต้องแล้ว ผู้ใช้ก็จะต้องทำการเลือกจุดใหม่ให้ถูกต้อง หากผู้ใช้ได้ทำการเลือกจุดซึ่งทำให้ได้เส้นตรงที่ทำให้เงื่อนไขเป็นจริงซอฟต์แวร์ก็จะทำการวาดจุดและเส้นที่ผู้ใช้เลือกถูกต้องนี้ออกมา และแสดงข้อความให้ทราบว่าจุดที่ได้ทำการเลือกนี้สองจุดที่ถูกเลือกนั้นมีจุดใดบ้าง และมีค่าเท่าใด จุดที่ผู้ใช้คำนวณค่าของการขจัด (K_{el}) โดยหาจากความชันของเส้นกราฟที่เกิดจากการเชื่อมจุดที่ผู้ใช้ได้ทำการเลือกไว้ หากการเลือกจุดสองจุดผ่านตามเงื่อนไขแล้วซอฟต์แวร์จะคำนวณหาจุดตัดแกน Y โดยทำการแปรผลย้อนกลับ และคำนวณหาเส้นตรงอีกเส้นหนึ่งซึ่งเกิดจากจุดความเข้มข้นของระดับยาในเลือดสองจุด โดยการหาผลต่างของความเข้มข้นของระดับยาที่ได้จากการคำนวณจากเส้นที่ผู้ใช้กำหนด กับ ความเข้มข้นของระดับยาในเลือดที่ได้จากการตรวจวัดจากผู้ป่วย จากรูปที่ 3-5 แสดงให้เห็นคือ เมื่อหาค่าผลต่างของ $C_1 - C_1^0$ และ $C_2 - C_2^0$ ก็จะได้ความเข้มข้นสองจุดออกมา จากนั้นทำการคำนวณหาค่าความชันของเส้นตรงนี้ออกมา เมื่อได้ความชันของเส้นตรงนี้ออกมาแล้วก็จะได้ ค่าของค่าคงที่ในการดูดซึมของยา (K_0) และต้องทำการแปรผลย้อนกลับเพื่อหาจุดตัดแกน Y อีกครั้งหนึ่ง เมื่อได้เส้นที่สองแล้วจุดตัดบนแกน Y ของเส้นทั้งสองนั้นควรจะมีค่าเท่ากันซึ่งจะได้ว่า $C_0^0 = A = B$ และคำนวณค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด ซึ่งเป็นค่ามาตรฐานเพื่อใช้สำหรับทำการเปรียบเทียบ ในขั้นตอนต่อไป ค่าที่คำนวณเหล่านี้จะถูกเก็บไว้ในตัวแปรของคลาสเพื่อนำไปใช้ในขั้นตอนของการทำการประมาณค่าตัวแปร

การคำนวณจุดที่สองตามกรณีที่ 3 การคำนวณตัวแปรตามแบบจำลองสองคอมพาร์ทเมนต์โดยให้ยาทางหลอดเลือด กราฟจากการกำหนดจุดโดยผู้ใช้แสดงได้ดังรูปที่ 3-6



รูปที่ 3-6 แสดงให้เห็นกราฟที่ได้จากการกำหนดจุดโดยผู้ใช้ในแบบจำลองสองคอมพาร์ทเมนต์โดย การให้ยาทางเลือด หลังจากการวาดจุดโดยการอ่านค่าจากเวกเตอร์แล้ว

เมื่อได้ทำการวาดจุดซึ่งได้จากการตรวจวัดระดับยาในเลือด ซึ่งอ่านได้จากเวกเตอร์ซึ่งผู้ใช้ได้ทำการ กำหนดไว้แล้ว ผู้ใช้สามารถทำการวาดจุดในลักษณะเดียวกับที่ได้ทำในการวาดจุดในแบบจำลอง แบบคอมพาร์ทเมนต์เดียว และให้ยาทางหลอดเลือด หรือ นอกหลอดเลือด จากรูป 3-6 เส้นที่เกิด จากจุด C_1, C_2 แต่จะมีข้อจำกัดและความแตกต่าง สำหรับแบบจำลอง สองคอมพาร์ทเมนต์ และ ให้ยาทางหลอดเลือดคือ จุดที่ต้องทำการเจาะและหาความเข้มข้นออกมานั้นต้องตั้งตั้งแต่ 4 จุดขึ้นไป แต่ขอแนะนำว่า ให้พยายามเจาะหาระดับความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ให้มีจำนวนจุดมากที่สุดเท่าที่จะทำได้ เนื่องจากการที่มีจำนวนจุดในการคำนวณน้อยจุด ความคลาดเคลื่อนก็จะมีค่า มากไปด้วย เส้นที่ทำการวาดนั้นจะต้องมีสองจุดแรกของค่าความเข้มข้นต้องอยู่สูงกว่าเส้น หรือ กล่าวอีกอย่างได้ว่า ความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ณ เวลาของความเข้มข้นสองจุดแรกต้อง เป็นค่าที่มากกว่าความเข้มข้นของระดับยาในเลือดซึ่งคำนวณได้จากค่าที่อยู่บนเส้นตรงที่ผู้ใช้

ประมาณค่าเอาไว้ ขอแนะนำว่าการกำหนดระยะเวลาในการเจาะหาความเข้มข้นของระดับยาในเลือดในกรณีนี้สำคัญมากต้องกำหนดให้เหมาะสม

ค่าสองจุดแรกที่ใช้เป็นค่าอ้างอิงสำหรับการคำนวณค่าความชันของเส้นตรงซึ่งแสดงค่าคงที่ (ค่า β ซึ่งแสดงไว้ในรูปที่ 3-6) และค่าของความชันที่ผู้ใช้กำหนดจะเป็นค่าคงที่ α จะถูกตัดออกไปในขั้นตอนในการคำนวณ ผลรวมกำลังสอง ค่าคงที่ทั้งสองนี้จะถูกนำไปคำนวณค่า K_{el} , K_a ต่อไป

การคำนวณค่าตัวแปรสำหรับแบบจำลองสองคอมพาร์ตเมนต์ โดยให้ยาทางหลอดเลือดดำนั้น มีขั้นตอนคือ เมื่อผู้ใช้ได้ทำการเลือกจุดครบสองจุดแล้วซอฟต์แวร์จะทำการตรวจสอบเงื่อนไขที่กำหนดไว้คือ จุดสองจุดแรกที่ได้ทำการตรวจวัดระดับยาในเลือดมา (อ่านจากเวกเตอร์) นั้นอยู่ใต้เส้นหรือมีค่ามากกว่าที่เกิดจากจุดสองจุดที่ผู้ใช้กำหนดหรือไม่ หากว่ามีจุดใดจุดหนึ่งหรือทั้งสองจุดอยู่ต่ำกว่าเส้นที่ผู้ใช้กำหนดหรือมีค่าน้อยกว่า จะทำการลบจุดทั้งสองจุดที่ได้กำหนดไว้นั้นออกไปจากหน้าจอแสดงผลและแจ้งเตือนให้ทำการเลือกตำแหน่งของจุดที่เหมาะสมใหม่ พร้อมแสดงข้อความแจ้งให้ทราบว่าจุดไหนเลือกได้ถูกต้องแล้ว ผู้ใช้ก็จะต้องทำการเลือกจุดใหม่ให้ถูกต้อง หากผู้ใช้ได้ทำการเลือกจุดซึ่งทำให้ได้เส้นตรงที่ทำให้เงื่อนไขเป็นจริงซอฟต์แวร์ก็จะทำการวาดจุดและเส้นที่ผู้ใช้เลือกถูกต้องนี้ออกมา และแสดงข้อความให้ทราบว่าจุดที่ได้ทำการเลือกนี้สองจุดที่ถูกเลือกนั้นมีจุดใดบ้าง และมีค่าเท่าใด และคำนวณหาความชันของเส้นตรงเส้นนั้นได้ค่าคงที่ β ซึ่งแสดงถึงการขจัดทั้งหมด (Overall elimination) ในส่วนของ slow disposition โดยการใช้สมการดังนี้

$$\beta = \frac{\ln C_2 - \ln C_1}{t_2 - t_1}$$

และจุดตัดแกน Y คือ B

หากการเลือกจุดสองจุดผ่านตามเงื่อนไขแล้วซอฟต์แวร์จะคำนวณหาจุดตัดแกน Y โดยวิธีการคำนวณตามที่ได้กล่าวไปแล้วเพื่อทำการแปรผลย้อนกลับ และคำนวณหาเส้นตรงอีกเส้นหนึ่งซึ่งเกิดจากจุดความเข้มข้นของระดับยาในเลือดสองจุด คำนวณได้จากการหาผลต่างของความเข้มข้นของระดับยาที่ได้จากการคำนวณจากเส้นที่กำหนด กับ ความเข้มข้นของระดับยาในเลือดที่ได้จากการตรวจวัดจากผู้ป่วย รูปที่ 3-6 แสดงให้เห็นว่า เมื่อหาค่าผลต่างของ $C_1 - C_1'$ และ $C_2 - C_2'$ ก็จะได้ความเข้มข้นสองจุดออกมา แล้วทำการคำนวณหาความชันของเส้นตรงที่เกิดจากการเชื่อมจุดสองจุดนี้ และทำการแปรผลย้อนกลับเพื่อหาจุดตัดของเส้นตรงที่เกิดขึ้นใหม่นี้ออกมา เมื่อได้ความชันและค่าของจุดตัดแกน Y จุดที่สองของเส้นตรงนี้ออกมาแล้วก็จะได้ค่าคงที่อีกค่าหนึ่งคือ α ซึ่งแสดงถึงค่าคงที่การกระจาย (fast disposition) โดยใช้สมการดังนี้

$$\alpha = \frac{\ln C_{2\text{diff}} - \ln C_{1\text{diff}}}{t_2 - t_1}$$

และจุดตัดแกน Y คือ A

เมื่อได้ทั้งค่า β , A , B และ α แล้วจะนำค่าทั้งหมดนี้ไปคำนวณค่า K_{12} , K_{21} และ K_{10} โดยค่าเหล่านี้เป็นค่าคงที่ตามแบบจำลองที่ได้เคยกล่าวมาแล้วในส่วนของทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง จึงจะไม่ขอกล่าวซ้ำอีกในที่นี้ แต่จะขอแนะนำเพียงสมการที่ใช้มาแสดงเพื่อให้เห็นภาพของการนำมาใช้ที่ชัดเจนเท่านั้น สมการที่ใช้ในการหาค่าต่างๆคือ

$$K_{12} = \frac{A \cdot B \cdot (\beta - \alpha)^2}{C_p^0 \cdot (A \cdot \beta + B \cdot \alpha)}$$

$$K_{21} = \frac{A \cdot \beta + B \cdot \alpha}{C_p^0}$$

$$K_{10} = \frac{C_p^p}{A/\alpha + B/\beta}$$

โดย

K_{12} = ค่าคงที่การกระจายจากคอมพาร์ทเมนต์กลางไปยังคอมพาร์ทเมนต์รายล้อม

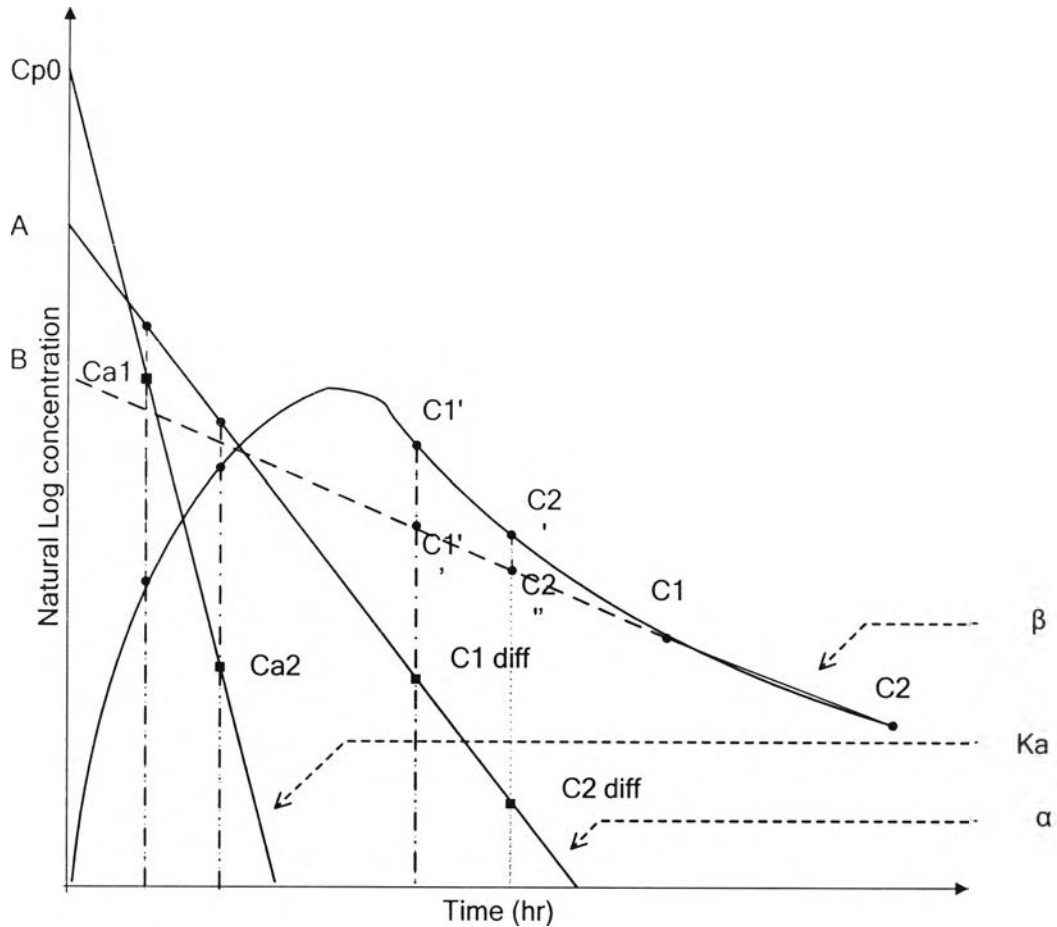
K_{21} = ค่าคงที่การกระจายจากคอมพาร์ทเมนต์รายล้อมไปยังคอมพาร์ทเมนต์กลาง

K_{10} = ค่าคงที่การขจัดจากคอมพาร์ทเมนต์กลาง

ค่า K_{10} นำไปใช้เพื่อทำการปรับค่าแทนค่า K_{el}

เมื่อได้ค่า ของตัวแปรออกมาแล้วต้องทำการคำนวณค่าของผลรวมกำลังสองมาตรฐานด้วยเพื่อใช้ในการเปรียบเทียบในขั้นตอนการทำการประมาณค่า

การคำนวณจุดที่สองตามกรณีที่ 4 การคำนวณตัวแปรตามแบบจำลองสองคอมพาร์ทเมนต์โดยให้ยานอกหลอดเลือด กราฟความเข้มข้นที่ได้จากการเลือกโดยผู้ให้แสดงได้ดังรูปที่ 3-7



รูปที่ 3-7 แสดงกราฟที่ได้จากการกำหนดจุดโดยผู้ใช้แบบจำลองสองคอมพาร์ตเมนต์โดยการให้ ยานอกหลอดเลือด หลังจากการวาดจุดโดยการอ่านค่าจากเวกเตอร์

เมื่อได้ทำการวาดจุดที่ได้จากการตรวจวัดระดับยาในเลือด ซึ่งอ่านได้จากเวกเตอร์จากการที่ผู้ใช้ได้ ทำการกำหนดไว้แล้ว ผู้ใช้สามารถทำการวาดจุดในลักษณะเดียวกับที่ได้ทำในการวาดจุดใน แบบจำลองแบบคอมพาร์ตเมนต์เดียว และให้ยาทางหลอดเลือด หรือ นอกหลอดเลือด และแบบ สองคอมพาร์ตเมนต์โดยการให้ยาทางหลอดเลือด จากรูปคือเส้นที่เกิดจากจุด C_1, C_2 แต่จะมี ข้อจำกัดและความแตกต่าง สำหรับแบบจำลอง สองคอมพาร์ตเมนต์ และให้ยานอกหลอดเลือดคือ จุดที่ต้องทำการเจาะและหาความเข้มข้นออกมานั้นต้องมีจำนวนตั้งแต่ 7 จุดขึ้นไปแต่ขอแนะนำว่า ให้พยายามเจาะหาระดับความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ให้มีจำนวนจุดมากที่สุด ที่สุดเท่าที่จะทำ ได้ เนื่องจากการที่มีจำนวนจุดในการคำนวณน้อยจุด ความคลาดเคลื่อนก็จะมีค่ามากไปด้วย เส้น ที่ทำการวาดนั้นจะต้องมีสองจุดแรกของค่าความเข้มข้นอยู่ต่ำกว่าเส้น หรือกล่าวอีกอย่างได้ว่า ความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ณ เวลาของความเข้มข้นสองจุดแรกต้องเป็นค่าที่น้อยกว่าความ เข้มข้นของระดับยาในเลือดซึ่งคำนวณได้จากค่าที่อยู่บนเส้นตรงที่ผู้ใช้ประมาณค่าเอาไว้ และอีก

สองจุดต่อมาต้องอยู่เหนือเส้น หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งว่า ความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ณ เวลาของความเข้มข้นสองจุดถัดมาต้องเป็นค่าที่มากกว่าความเข้มข้นของระดับยาในเลือดซึ่งคำนวณได้จากค่าที่อยู่บนเส้นตรงที่ผู้ใช้ได้ทำการประมาณค่าเอาไว้ ขอแนะนำว่าการกำหนดระยะเวลาในการเจาะหาความเข้มข้นของระดับยาในเลือดในกรณีนี้สำคัญมากต้องกำหนดให้เหมาะสม ซึ่งการกำหนดค่าที่ไม่เหมาะสมจะมีผลกับการคำนวณด้วย หลังจากที่ได้ทำการกำหนดเส้นแล้วซอฟต์แวร์จะทำการคำนวณเส้นที่จำเป็นขึ้นมาอีกสองเส้น เพื่อใช้ในการคำนวณ

การคำนวณค่าตัวแปรสำหรับแบบจำลองสองคอมพาร์ตเมนต์ โดยให้ยาทางหลอดเลือดนั้นมีขั้นตอนคือ เมื่อผู้ใช้ได้ทำการเลือกจุดครบสองจุดแล้วซอฟต์แวร์จะทำการตรวจสอบเงื่อนไขที่กำหนดไว้คือ จุดสองจุดแรกที่ได้ทำการตรวจวัดระดับยาในเลือดมา (อ่านจากเวกเตอร์) นั้นอยู่ใต้เส้นหรือมีค่ามากกว่าค่าที่เกิดจากการคำนวณค่าจากเส้นที่เกิดจากจุดสองจุดที่ผู้ใช้กำหนดหรือไม่ และในขณะเดียวกันซอฟต์แวร์ก็จะทำการตรวจสอบอีกสองจุดที่อยู่ถัดจากสองจุดแรกไปพร้อมกัน หากว่าในสองจุดแรกมีจุดใดจุดหนึ่งหรือทั้งสองจุดอยู่เหนือเส้นที่ผู้ใช้กำหนดหรือมีค่ามากกว่า และสองจุดถัดมามีจุดใดจุดหนึ่งหรือทั้งสองจุดอยู่ต่ำกว่าหรือมีค่าน้อยกว่าค่าที่คำนวณได้จากเส้นที่ผู้ใช้กำหนด จะทำการลบจุดทั้งสองจุดที่ได้กำหนดไว้นั้นออกไปจากหน้าจอแสดงผลและแจ้งเตือนให้ทำการเลือกตำแหน่งของจุดที่เหมาะสมใหม่ พร้อมแสดงข้อความแจ้งให้ทราบว่าจุดไหนเลือกได้ถูกต้องแล้ว ผู้ใช้ก็ต้องทำการเลือกจุดใหม่ให้ถูกต้อง หากผู้ใช้ได้ทำการเลือกจุดซึ่งทำให้ได้เส้นตรงที่ทำให้เงื่อนไขเป็นจริงซอฟต์แวร์ก็จะทำการวาดจุดและเส้นที่ผู้ใช้เลือกถูกต้องนี้ออกมา และแสดงข้อความให้ทราบว่าจุดที่ได้ทำการเลือกนี้สองจุดที่ถูกเลือกนั้นมีจุดใดบ้างที่อยู่สูงหรือต่ำกว่า และมีค่าเท่าใด คำนวณหาจุดตัดแกน Y โดยการทำการแปรผลย้อนกลับได้จุดตัด B และหาค่าความชันของเส้นตรงเส้นนั้นได้ค่าคงที่ β ซึ่งแสดงถึงการขจัดทั้งหมด (Overall elimination) ในส่วนของ slow disposition โดยการใช้สมการคือ

$$\beta = \frac{\ln C_2 - \ln C_1}{t_2 - t_1}$$

หากการเลือกจุดสองจุดผ่านตามเงื่อนไขแล้วซอฟต์แวร์จะคำนวณหาเส้นตรงเส้นที่หนึ่งซึ่งเกิดจากจุดความเข้มข้นของระดับยาในเลือดสองจุดซึ่งได้จากการหาผลต่างของความเข้มข้นของระดับยาที่ได้จากการคำนวณจากเส้นที่กำหนด กับ ความเข้มข้นของระดับยาในเลือดที่ได้จากการตรวจวัดจากผู้ป่วย จากรูปที่ 5-4 แสดงให้เห็นคือ เมื่อหาค่าผลต่างของ $C_1' - C_1''$ และ $C_2' - C_2''$ ก็จะได้ความเข้มข้นสองจุดออกมา จากนั้นทำการคำนวณหาค่าความชันของเส้นตรงนี้ออกมา เมื่อได้ความชันของเส้นตรงนี้ออกมาแล้วก็จะสามารถคำนวณหาจุดตัดแกน Y เป็นค่า A และคำนวณความชันจะได้ค่าคงที่อีกค่าหนึ่งคือ α ซึ่งแสดงถึงค่าคงที่การกระจาย (fast disposition) โดยใช้สมการคือ

$$\alpha = \frac{\ln C_{2\text{diff}} - \ln C_{1\text{diff}}}{t_2 - t_1}$$

จากนั้นซอฟต์แวร์ต้องทำการคำนวณหาเส้นตรงเส้นที่สองซึ่งเป็นเส้นที่ได้จากการหาผลต่างของความเข้มข้น ระหว่างค่าของความเข้มข้นของระดับยาที่เกิดขึ้นบนเส้นตรงที่คำนวณได้เส้นแรก หรือ ที่ได้อธิบายไปก่อนหน้านี้ ในหัวข้อ b) กับค่าความเข้มข้นที่วัดมาได้จากผู้ป่วยซึ่งเป็นจุด 2 จุดแรกเมื่อทำการหาค่าผลต่างของความเข้มข้นออกมาแล้วจะได้ค่าของ C_{o1} และ C_{o2} จากนั้นก็หาค่าความชันของเส้นตรงซึ่งเกิดจากจุดสองจุดนี้โดยใช้สมการ

$$K_a = \frac{\ln C_{a2} - C_{a1}}{t_2 - t_1}$$

และหาค่าจุดตัดแกน Y โดยการทำการแปรผลย้อนกลับตามวิธีการคำนวณซึ่งได้กล่าวไปแล้วในตอนต้นได้จุดตัดเป็น C_p^0

เมื่อได้ทั้งค่า β , α , A , B , K_a แล้วจะนำค่าทั้งสองนี้ไปคำนวณค่า K_{12} , K_{21} และ K_{10} โดยค่าเหล่านี้เป็นค่าคงที่ตามแบบจำลองที่ได้เคยกล่าวมาแล้วในส่วนของทฤษฎีจึงจะไม่ขอกล่าวซ้ำอีกในที่นี้ แต่จะขอนำเพียงสมการที่ใช้มาแสดงเพื่อให้เห็นภาพของการนำมาใช้ที่ชัดเจนเท่านั้น สมการที่ใช้ในการหาค่าต่างๆคือ

$$K_{12} = \frac{A \cdot B \cdot (\beta - \alpha)^2}{C_p^0 \cdot (A \cdot \beta + B \cdot \alpha)}$$

$$K_{21} = \frac{A \cdot \beta + B \cdot \alpha}{C_p^0}$$

$$K_{10} = \frac{C_p^p}{A/\alpha + B/\beta}$$

โดย

K_{12} = ค่าคงที่การกระจายจากคอมพาร์ทเมนต์กลางไปยังคอมพาร์ทเมนต์รายล้อม

K_{21} = ค่าคงที่การกระจายจากคอมพาร์ทเมนต์รายล้อมไปยังคอมพาร์ทเมนต์กลาง

K_{10} = ค่าคงที่การขจัดจากคอมพาร์ทเมนต์กลาง

ค่า K_{12} , K_{21} ไม่นำไปใช้ในการคำนวณ แต่ต้องคำนวณเพื่อเก็บในฐานข้อมูล

ค่า K_{10} จะนำไปใช้ในการคำนวณ ปรับตัวแปร

เมื่อได้ค่า ของตัวแปรออกมาแล้วต้องทำการคำนวณค่าของผลรวมกำลังสองมาตรฐานด้วยเพื่อใช้ในการเปรียบเทียบในขั้นตอนการทำการประมาณค่า

โดยค่าที่คำนวณออกมาได้ทั้งหมดจะถูกเก็บไว้ในหน่วยความจำและแสดงผลทางช่องข้อมูลบน
ส่วนติดต่อผู้ใช้ทางจอภาพ

(4) การคำนวณเพื่อปรับค่าแบบจำลอง โดยการทำงานมี 2 ขั้นตอนคือ การปรับค่าตัวแปรและการแสดงพื้นผิวด้วยค่าสี ผู้ใช้งานต้องเลือกการคำนวณว่าต้องการคำนวณด้วยแบบจำลอง หนึ่ง หรือ สอง คอมพาร์ทเมนต์ รายละเอียดระบุไว้ในตารางที่ ก-17 และตารางที่ ก-18 ในการแสดงผลทางส่วนแสดงผล รายละเอียดแสดงไว้ใน ตารางที่ ก-19 และการคำนวณหาค่าที่ให้ผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด [16] รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-20 ทุกตารางที่กล่าวมาแสดงไว้ในภาคผนวก ก วิธีการในการคำนวณในการปรับแบบจำลองมีแนวคิดในการคำนวณดังนี้ จากขั้นตอนในการคำนวณค่าตัวแปร จะได้ตัวแปรที่ต้องนำมาใช้ในขั้นตอน การประมาณค่า และได้ค่าผลรวมกำลังสองมาตรฐานซึ่งคำนวณจากตัวแปรที่ได้จากขั้นตอนเดียวกัน ซอฟต์แวร์จะนำค่าผลรวมกำลังสองมาตรฐานในหน่วยความจำ มาเป็นค่าเริ่มต้นสำหรับการเปรียบเทียบกับค่าที่จะทดสอบเพื่อหาค่าที่น้อยที่สุด โดยมีดัชนีค่าสี(color index) แสดงไว้ดังรูปที่ 3-8 และผลลัพธ์ในการเปรียบเทียบค่าแสดงไว้ในรูปที่ 3-9

```
public static final Color[] colors={new Color(204,255,255),new Color(153,255,255),new
Color(102,255,255),new Color(102,255,204),new Color(102,255,153),new
Color(51,255,102),new Color(0,255,51),new Color(0,255,0),new Color(51,255,0),new
Color(153,255,0),new Color(204,255,0),new Color(255,255,51),new
Color(255,255,0),new Color(255,204,0),new Color(255,204,51),new
Color(255,153,0),new Color(255,153,51),new Color(255,102,0),new
Color(255,102,51),new Color(255,51,0),new Color(255,51,51),new Color(255,0,0)};
```

รูปที่ 3-8 แสดงดัชนีค่าสีที่กำหนดให้กับโปรแกรม

indexColor[i]	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
$C < \text{stdSumSquare} - 90 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C < \text{stdSumSquare} - 70 * (\text{stdSumSquare} / 100) \ \&\& \ C \geq \text{stdSumSquare} - 90 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C < \text{stdSumSquare} - 60 * (\text{stdSumSquare} / 100) \ \&\& \ C \geq \text{stdSumSquare} - 70 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C < \text{stdSumSquare} - 50 * (\text{stdSumSquare} / 100) \ \&\& \ C \geq \text{stdSumSquare} - 60 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C < \text{stdSumSquare} - 40 * (\text{stdSumSquare} / 100) \ \&\& \ C \geq \text{stdSumSquare} - 50 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						

รูปที่ 3-9 แสดงตารางการแปรผลค่าสีในการคำนวณเพื่อปรับตัวแปร

indexColor[i]	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
tdSumSquare-30*(stdSumSquare/100) && C >=stdSumSquare- 40*(stdSumSquare/100)																						
C <stdSumSquare- 20*(stdSumSquare/100) && C >=stdSumSquare-30*(stdSumSquare/100)																						
C <stdSumSquare- 10*(stdSumSquare/100) && c >=stdSumSquare- 20*(stdSumSquare/100)																						
C <stdSumSquare-5*(stdSumSquare/100) && C >=stdSumSquare- 10*(stdSumSquare/100)																						

รูปที่ 3-9 แสดงตารางการแปรผลค่าสีในการคำนวณเพื่อปรับตัวแปร (ต่อ)

indexColor[i]	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
$C < \text{stdSumSquare} - 1 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && $C \geq \text{stdSumSquare} - 5 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C < \text{stdSumSquare}$ && $C \geq \text{stdSumSquare} - 1 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C \geq \text{stdSumSquare}$ && $C < \text{stdSumSquare} + 1 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C \geq \text{stdSumSquare} + 1 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && $C < \text{stdSumSquare} + 5 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
$C \geq \text{stdSumSquare} + 5 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && $C < \text{stdSumSquare} + 10 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						

รูปที่ 3-9 แสดงตารางการแปรผลค่าสีในการคำนวณเพื่อปรับตัวแปร (ต่อ)

indexColor[i]	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
C $\geq \text{stdSumSquare} + 10 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && C $< \text{stdSumSquare} + 20 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
C $\geq \text{stdSumSquare} + 20 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && C $< \text{stdSumSquare} + 30 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
C $\geq \text{stdSumSquare} + 30 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && C $< \text{stdSumSquare} + 40 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						
C $\geq \text{stdSumSquare} + 40 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && C $< \text{stdSumSquare} + 50 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																						

รูปที่ 3-9 แสดงตารางการแปรผลค่าสีในการคำนวณเพื่อปรับตัวแปร (ต่อ)

indexColor[i]	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	
C $\geq \text{stdSumSquare} + 50 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && C $< \text{stdSumSquare} + 60 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																							
C $\geq \text{stdSumSquare} + 60 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && C $< \text{stdSumSquare} + 70 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																							
C $\geq \text{stdSumSquare} + 70 * (\text{stdSumSquare} / 100)$ && C $< \text{stdSumSquare} + 90 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																							
C $\geq \text{stdSumSquare} + 90 * (\text{stdSumSquare} / 100)$																							
Other	Black																						

รูปที่ 3-9 แสดงตารางการแปรผลค่าสีในการคำนวณเพื่อปรับตัวแปร (ต่อ)

โดยกำหนดว่า

colors เป็นอาร์เรย์ (array) ของค่าสีต่างๆซึ่งกำหนดไว้ล่วงหน้า ค่าสีที่กำหนดไว้จะถูกนำไปใช้ในฟังก์ชันหรือเมธอดซึ่งทำหน้าที่ในการกำหนดค่าสี โดยมีรายละเอียดแสดงไว้ใน รูปที่ 3-8

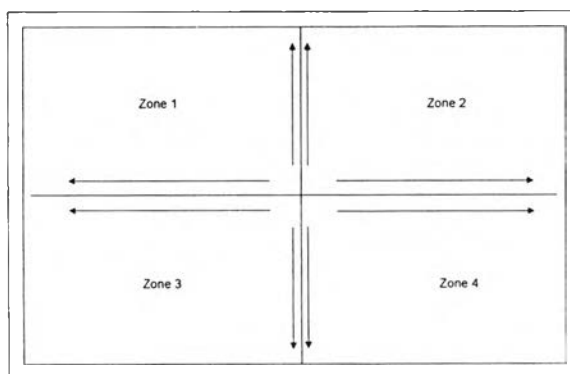
C = ผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดที่ได้จากการคำนวณแต่ละครั้ง

stdSumSquare = ผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดมาตรฐานที่ได้มาจากการคำนวณสภาวะเริ่มต้น



แสดงการทำงานในการตัดสินใจเพื่อแสดงผลสีจากดัชนีค่าสี

เมื่อได้ทำการกำหนดค่าสีแล้วค่าของผลรวมกำลังสองที่คำนวณได้จะต้องนำไปเปรียบเทียบกับค่าผลรวมกำลังสองมาตรฐานแล้วจึงกำหนดค่าสีให้กับค่าที่คำนวณได้นั้นแล้ววาดออกมาเป็นภาพ การวาดภาพที่ได้จากการคำนวณนั้นจะกำหนดให้ค่าของผลรวมกำลังสองมาตรฐานนั้นเป็นจุดที่อยู่ตรงกึ่งกลางของบริเวณแสดงผลและให้ทำการทดสอบจุดออกไปสี่ทิศทาง ซึ่งประกอบด้วย ด้านซ้าย ด้านขวา ด้านล่าง และด้านบน และแบ่งบริเวณแสดงผลนั้นออกเป็นสี่ส่วนแสดงไว้ในรูปที่ 3-10 ในแต่ละบริเวณของการแสดงผลที่ถูกแบ่งออกเป็นสี่ส่วนนั้นจะมีการคำนวณแต่ละบริเวณแตกต่างกัน จะกำหนดให้ค่าผลรวมกำลังสองมาตรฐานเป็นค่าเริ่มต้นโดยให้มีตำแหน่งอยู่กึ่งกลางของส่วนแสดงผล อธิบายได้ดังนี้



รูปที่ 3-10 แสดงการแบ่งส่วนแสดงผลกราฟิกออกเป็นสี่ส่วน เพื่อแยกส่วนการทำงานในการประมวลผล

ส่วนแสดงผลทั้งหมดมีความกว้าง 410 ยาว 560 พิกเซล กำหนดให้มีขอบด้านในด้านละ 30 พิกเซล ดังนั้นส่วนแสดงผลที่เหลือ จะมีความกว้าง 350 ยาว 500 และเมื่อทำการแบ่งส่วนของการแสดงผลที่เหลือออกเป็นสี่ส่วนเท่าๆกัน จะได้สี่เหลี่ยมที่มีขนาด 175*250 พิกเซลจำนวนสี่รูปตั้งชื่อให้เป็น Zone1,Zone2,Zone3 และ Zone4 และแบ่งการคำนวณด้วยเส้นทางที่แตกต่างกัน

ตำแหน่ง ณ จุดกึ่งกลางของรูปคือ (280,205) โดยให้แกน X เป็นค่าของ K_{el} แกน Y เป็นค่าของ V_d กำหนดให้พื้นที่ของการเคลื่อนที่เป็น บวกและลบ 5 เปอร์เซ็นต์ตามแนวแกน X และ Y

บริเวณที่ 1 (Zone 1) จะเริ่มต้นการคำนวณจากจุดกึ่งกลางโดยการเคลื่อนที่ของจุดที่ต้องการทดสอบ โดยเริ่มต้นจากล่างขึ้นบน และเมื่อครบรอบคือเคลื่อนที่ไปจนถึงจุดที่ค่าของพิกเซลตามแนวแกน Y จากค่า 175 ลดลงไปครั้งละ 1 พิกเซลจนมีค่าเท่ากับ 0 พิกเซลและจะเคลื่อนที่กลับมาคำนวณค่าบนพิกเซลที่ 175 ในแนวแกน Y อีกครั้งแต่จะคำนวณเคลื่อนที่ต่อไปทางซ้ายโดยค่าพิกเซลตามแนวแกน X จะมีค่าลดลงไปครั้งละ 1 พิกเซลโดยเริ่มที่ 205 พิกเซล ทำเช่นนี้ต่อไปเรื่อยๆจนค่าพิกเซลตามแนวแกน X และ Y มีค่าเป็น 0 จึงหยุดการทำงาน โดยมีวิธีการคำนวณและการแทนค่าสีคือ ในแนวแกน Y หรือแกนตั้งนั้น มีสมการในการคำนวณ

$\text{indexColor}((\text{double})(\text{func}(i, j)))$

indexColor เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดที่ใช้ในการกำหนดค่าสีให้กับค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดที่คำนวณได้

$\text{func}(i, j)$ เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดเพื่อคำนวณค่าของผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดโดยแทนค่า V_d, K_{el}

ค่าของ V_d, K_{el} ที่เปลี่ยนแปลงนั้นคิดขั้นการเปลี่ยนแปลงโดยสมการ

คือ $X = (K_{el} * 5) / 100 * 205, Y = (V_d * 5) / 100 * 175$

โดยในเมธอด func จะทำการตรวจสอบเงื่อนไขและหาสมการที่เหมาะสมสำหรับแบบจำลองที่ผู้ใช้ได้ทำการเลือกไว้และทำการคำนวณค่าความเข้มข้นจากตัวแปร เมื่อได้ค่าความเข้มข้นแล้วใน เมธอด indexColor จะทำการเปรียบเทียบค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดที่ได้จากการทดสอบ กับความผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดซึ่งได้จากค่า ตัวแปรซึ่งใช้เป็นค่ามาตรฐานสำหรับเปรียบเทียบ เพื่อหาค่าสีที่เหมาะสม

บริเวณที่ 2 (Zone 2) จะเริ่มต้นการคำนวณจากจุดกึ่งกลางโดยการเคลื่อนที่ของจุดที่ต้องการทดสอบนั้น เริ่มต้นจากล่างขึ้นบนเช่นเดียวกับในบริเวณที่ 1 และเมื่อครบรอบคือเคลื่อนที่ไปจนถึงจุดที่ค่าของพิกเซลตามแนวแกน Y จากค่า 175 ลดลงไปครั้งละ 1 พิกเซลจนมีค่าเท่ากับ 0 จะเคลื่อนที่กลับมาคำนวณค่าบนพิกเซลที่ 175 ในแนวแกน Y อีกครั้งแต่จะคำนวณเคลื่อนที่ต่อไปทางขวาโดยค่าพิกเซลตามแนวแกน X จะมีค่าเพิ่มขึ้นไปครั้งละ 1 พิกเซลโดยเริ่มที่ 0 พิกเซล ทำเช่นนี้ต่อไปเรื่อยๆจนค่าพิกเซลตามแนวแกน X มีค่าเท่ากับ 205 และ Y มีค่าเป็น 0 จึงหยุดการ

ทำงาน โดยมีวิธีการคำนวณและการแทนค่าสีคือ ในแนวแกน Y หรือแกนตั้งนั้น มีสมการในการคำนวณ

`indexColor((double)(func(i, j)))`

`indexColor` เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดที่ใช้ในการกำหนดค่าสีให้กับค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดที่คำนวณได้

`func(i, j)` เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดเพื่อคำนวณค่าของผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดโดยแทนค่า V_d, K_{el}

ค่าของ V_d, K_{el} ที่เปลี่ยนแปลงนั้นคิดขั้นการเปลี่ยนแปลงโดยสมการ

คือ $X = (K_{el} * 5) / 100 * 205, Y = (V_d * 5) / 100 * 175$

โดยในเมธอด `func` จะทำการตรวจสอบเงื่อนไขและหาสมการที่เหมาะสมสำหรับแบบจำลองที่ผู้ใช้ได้ทำการเลือกไว้และทำการคำนวณค่าความเข้มข้นจากตัวแปร เมื่อได้ค่าความเข้มข้นแล้วใน เมธอด `indexColor` จะทำการเปรียบเทียบค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดที่ได้จากการทดสอบ กับความผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดซึ่งได้จากค่า ตัวแปรซึ่งใช้เป็นค่ามาตรฐานสำหรับเปรียบเทียบ เพื่อหาค่าสีที่เหมาะสม

บริเวณที่ 3 (Zone 3) จะเริ่มต้นการคำนวณจากจุดกึ่งกลางโดยการเคลื่อนที่ของจุดที่ต้องการทดสอบนั้น เริ่มต้นจากบนลงล่าง และเคลื่อนที่ไปจนถึงจุดที่ค่าของพิกเซลตามแนวแกน Y จากค่า 0 เพิ่มขึ้นไปครั้งละ 1 พิกเซลจนมีค่าเท่ากับ 175 พิกเซล และ จะเคลื่อนกลับมาคำนวณค่าบนพิกเซลที่ 0 ในแนวแกน Y อีกครั้งแต่จะคำนวณเคลื่อนที่ต่อไปทางซ้ายค่าในแนวแกน X จะลดค่าลง 1 พิกเซลโดยค่าพิกเซลตามแนวแกน X จะมีค่าลดลงไปครั้งละ 1 พิกเซลโดยเริ่มที่ 205 พิกเซลทำเช่นนี้ต่อไปเรื่อยๆจนค่าพิกเซลตามแนวแกน X มีค่าเท่ากับ 0 และ Y มีค่าเป็น 175 จึงหยุดการทำงาน โดยมีวิธีการคำนวณและการแทนค่าสีคือ ในแนวแกน Y หรือแกนตั้งนั้น มีสมการในการคำนวณ

`indexColor((double)(func(i, j)))`

`indexColor` เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดที่ใช้ในการกำหนดค่าสีให้กับค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดที่คำนวณได้

`func(i, j)` เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดเพื่อคำนวณค่าของผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดโดยแทนค่า V_d, K_{el}

ค่าของ V_d, K_{el} ที่เปลี่ยนแปลงนั้นคิดขั้นตอนการเปลี่ยนแปลง (step) โดยสมการที่ใช้
คือ $X = (K_{el} * 5) / 100 * 205, Y = (V_d * 5) / 100 * 175$

โดยในเมธอด *func* จะทำการตรวจสอบเงื่อนไขและหาสมการที่เหมาะสมสำหรับ
แบบจำลองที่ผู้ใช้ได้ทำการเลือกไว้และทำการคำนวณค่าความเข้มข้นจากตัวแปร เมื่อได้ค่าความ
เข้มข้นแล้วใน เมธอด *indexColor* จะทำการเปรียบเทียบค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด
ที่ได้จากการทดสอบ กับความผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดซึ่งได้จากค่า ตัวแปรซึ่งใช้เป็น
ค่ามาตรฐานสำหรับเปรียบเทียบ เพื่อหาค่าสีที่เหมาะสม

บริเวณที่ 4 (Zone 4) จะเริ่มต้นการคำนวณจากจุดกึ่งกลางโดยการเคลื่อนที่ของจุดที่ต้องการ
ทดสอบนั้น เคลื่อนที่จากบนลงล่าง และเคลื่อนที่ไปจนถึงจุดที่ค่าของพิกเซลตามแนวแกน Y จาก
ค่า 0 เพิ่มขึ้นไปครั้งละ 1 พิกเซลจนมีค่าเท่ากับ 175 พิกเซล และ จะเคลื่อนกลับมาคำนวณค่าบน
พิกเซลที่ 0 ในแนวแกน Y อีกครั้งแต่จะคำนวณเคลื่อนที่ต่อไปทางขวาค่าในแนวแกน X จะเพิ่มค่า
ขึ้น 1 พิกเซลโดยค่าพิกเซลตามแนวแกน X จะมีค่าเพิ่มขึ้นไปครั้งละ 1 พิกเซลโดยเริ่มที่ 0 พิกเซล
ทำเช่นนี้ต่อไปเรื่อยๆจนค่าพิกเซลตามแนวแกน X มีค่าเท่ากับ 205 และ Y มีค่าเป็น 175 จึงหยุด
การทำงาน โดยมีวิธีการคำนวณและการแทนค่าสีคือ ในแนวแกน Y หรือแกนตั้งนั้น มีสมการใน
การคำนวณ

$\text{indexColor}((\text{double})(\text{func}(i, j)))$

indexColor เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดที่ใช้ในการกำหนดค่าสีให้กับค่าผลรวมของผลต่างกำลัง
สองน้อยที่สุดที่คำนวณได้

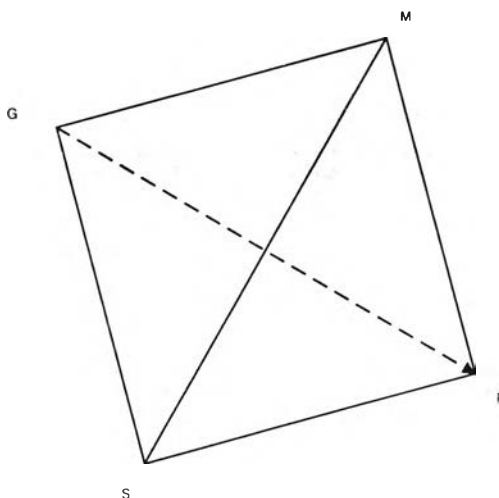
func(i, j) เป็นฟังก์ชัน หรือ เมธอดเพื่อคำนวณค่าของผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดโดย
แทนค่า V_d, K_{el}

ค่าของ V_d, K_{el} ที่เปลี่ยนแปลงนั้นคิด ขั้นตอนการเปลี่ยนแปลงโดยสมการ
คือ $X = (K_{el} * 5) / 100 * 205, Y = (V_d * 5) / 100 * 175$

โดยในเมธอด *func* จะทำการตรวจสอบเงื่อนไขและหาสมการที่เหมาะสมสำหรับ
แบบจำลองที่ผู้ใช้ได้ทำการเลือกไว้และทำการคำนวณค่าความเข้มข้นจากตัวแปร เมื่อได้ค่าความ
เข้มข้นแล้วใน เมธอด *indexColor* จะทำการเปรียบเทียบค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด
ที่ได้จากการทดสอบ กับความผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดซึ่งได้จากค่า ตัวแปรซึ่งใช้เป็น
ค่ามาตรฐานสำหรับเปรียบเทียบ เพื่อหาค่าสีที่เหมาะสม

ในช่วงเวลาเดียวกับที่เรดในการวาดรูปค่าสีไปบนพื้นที่ของรูปซึ่งอยู่ในหน่วยความจำ จะมีเรดอีกเส้นทางหนึ่งตรวจสอบว่าในหน่วยความจำซึ่งใช้เป็นแหล่งเก็บภาพชั่วคราวนั้นมีข้อมูลอยู่หรือไม่ หากมีข้อมูลอยู่ก็จะถูกนำมาแสดงในส่วนแสดงผล

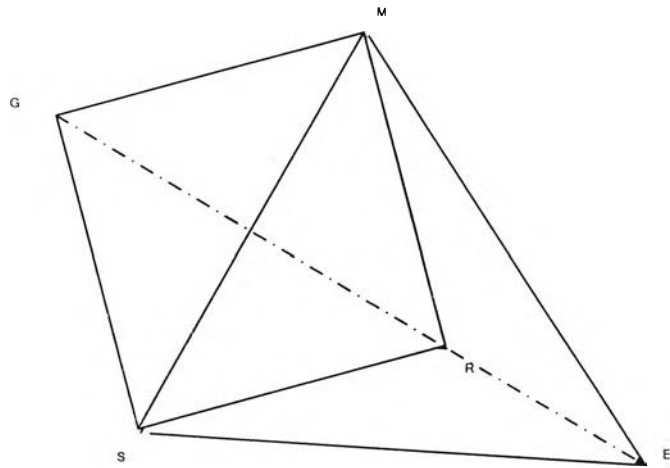
เมื่อได้ทำการวาดพื้นผิวเสร็จแล้วขั้นตอนต่อไปคือการค้นหาจุดซึ่งมีค่าผลรวมของผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดซึ่งเป็นขั้นตอนสำคัญในการปรับค่าตัวแปร เริ่มต้นจากการกำหนดค่าเริ่มต้นให้กับการค้นหา ด้วยจุดสามจุด พิจารณาจากรูปที่ 3-11 จุดเริ่มต้นที่กำหนดไว้คือ G, M และ S ซึ่งเป็นค่าที่ได้จากฟังก์ชัน จากนั้นเริ่มต้นด้วยการค้นหาค่าผลรวมกำลังสองที่มากที่สุดจากสามจุดนี้ สมมติว่าให้ค่า $G > M > S$ จากการค้นหา ดังนั้นจะได้ว่าจุดที่มีค่ามากที่สุดคือจุด G และจะเป็นจุดที่จะไม่ให้ความสนใจ เมื่อได้จุดที่มีค่ามากที่สุดในสามจุดแล้ว ในที่นี้คือค่า ณ จุด G ให้ทำการสะท้อน (reflex) จุดนั้นผ่านศูนย์กลาง (Centroid) ด้านตรงข้ามไปยังอีกฝั่งหนึ่ง จะได้จุดใหม่เกิดขึ้น ให้จุดนี้มีชื่อว่า R แสดงได้ดังรูปที่ 3-11



รูปที่ 3-11 แสดงการเคลื่อนที่ของสามเหลี่ยมจากจุด G ขยายออกไปยังจุด R

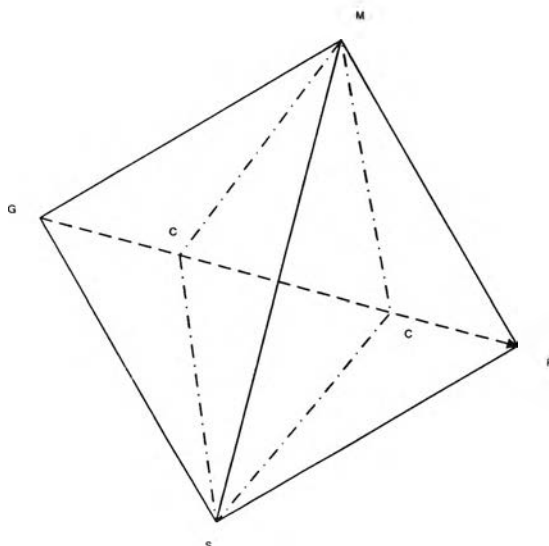
หากว่าหลังจากการสะท้อนค่าไปแล้วได้ผลคือ $G > R$ และ $M > R > S$ แสดงว่าจุดที่ได้ทำการสะท้อนมานั้นเป็นจุดที่ให้ค่าที่เหมาะสม ให้ทำการจัดตำแหน่งของจุดใหม่ (ทำป้ายชื่อใหม่) คือให้เปลี่ยน $M \rightarrow G$, $R \rightarrow M$ และ $S \rightarrow S$ ก็จะได้รูปสามเหลี่ยมใหม่และให้ทำซ้ำขั้นตอนการสะท้อนจุดต่อไป

หลังจากที่ได้ทำการสะท้อนค่าแล้วได้สามเหลี่ยมใหม่ หากเงื่อนไขที่ได้ เป็น $S > R$ จะต้องทำการทดสอบต่อไปว่า จากสามเหลี่ยมที่ได้หากมีการเคลื่อนที่ต่อไปในทิศทางเดียวกัน กับจุด R โดยระยะทางที่เคลื่อนที่ไปจะเท่ากับระยะจากจุด R ถึงจุดกึ่งกลางด้านตรงข้าม ดังแสดงไว้ในรูปที่ 3-12 จุดที่เกิดขึ้นใหม่นั้นได้ค่าที่น้อยกว่าให้แทนค่า G ด้วยค่า E แต่หากค่าของ R มีค่าน้อยกว่าค่าของ E ให้ใช้ค่า R แทน แล้วให้ทำการ จัดตำแหน่งของแต่ละจุดใหม่ (ทำป้ายชื่อใหม่) แล้วกลับไปทำขั้นตอนการสะท้อนค่าจุดต่อไป



รูปที่ 3-12 แสดงการเคลื่อนที่ของสามเหลี่ยม จากจุด R ขยายออกไปยังจุด E

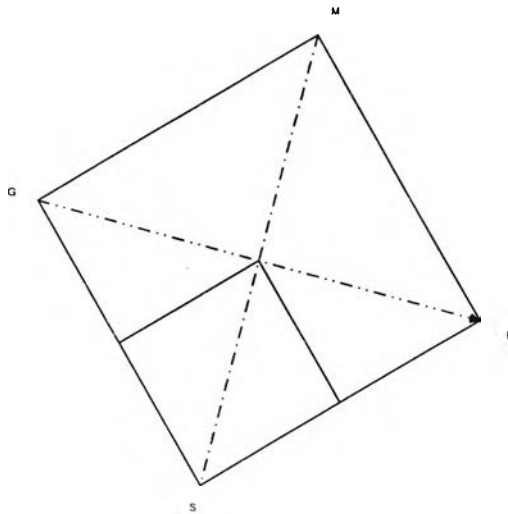
ในกรณีที่การสะท้อนค่าแล้วพบว่า ค่าของ $R > M$ และค่าของ $R > M$ ให้พิจารณาว่าค่าของ G มีค่าเป็นอย่างไรเมื่อเทียบกับค่า R หากว่าค่าของ $G < R$ ให้ใช้ค่า G เดิม และให้ทำการหด (Contract) หรือทำการเคลื่อนจุด G เข้าหาด้านตรงข้ามโดยเคลื่อนตามเส้นที่ผ่านศูนย์กลางของด้านตรงข้าม และระยะที่เคลื่อนที่ไปเป็นระยะทางครึ่งหนึ่งจากจุด G เดิมไปยังจุดกึ่งกลางด้านตรงข้าม แต่หาก $G > R$ ให้ใช้ค่า R แล้วทำการหด หรือทำการเคลื่อนจุด R เข้าหาด้านตรงข้ามโดยเคลื่อนตามเส้นที่ผ่านศูนย์กลางของด้านตรงข้าม และระยะที่เคลื่อนที่ไปเป็นระยะทางครึ่งหนึ่งจากจุด R ได้จุดใหม่ให้ชื่อว่า C ดังแสดงในรูปที่ 3-13



รูปที่ 3-13 แสดงการเคลื่อนที่ของสามเหลี่ยม จากจุด R หดเข้าสู่ศูนย์กลาง และ G หดเข้าสู่ศูนย์กลาง

หากว่าค่าที่ได้นั้นเป็นไปตามเงื่อนไขคือ $M > C > S$ แล้วให้ทำการจัดตำแหน่งของจุดใหม่(ทำป้ายชื่อใหม่) แล้วให้ไปทำขั้นตอนการสะท้อนจุดต่อไป

หากการกระทำทั้งสามแบบหลังจากที่ได้ทำการสะท้อนแล้ว ไม่ได้ทำให้เกิดการแก้ปัญหาใดๆ ให้ทำการลดระยะความยาวของด้านทั้งสามด้าน ให้ลดลงครึ่งหนึ่งโดยให้การเคลื่อนที่เพื่อลดระยะของด้านต่างๆเป็นการลดระยะเข้าหา S และในการลดระยะนั้นจะลดด้าน R หรือด้าน G ให้พิจารณาว่าค่าของ R หรือ G ค่าด้านไหนน้อยกว่ากันหากค่าด้านใดน้อยกว่าก็ให้ลดระยะด้านนั้น เมื่อได้ทำการลดระยะแล้วให้ทำการจัดตำแหน่งของจุดใหม่ดังแสดงในรูปที่ 3-14 และให้ดำเนินการสะท้อนจุดต่อไป



รูปที่ 3-14 แสดงการเคลื่อนที่ของสามเหลี่ยม จากจุด R หดเข้าสู่ศูนย์กลาง และ G หดเข้าสู่ศูนย์กลาง

(5) การบันทึกข้อมูลหลังคำนวณเพื่อปรับค่าตัวแปรแล้ว รายละเอียดระบุไว้ในตารางที่ ก-21 ในภาคผนวก ก

(6) การรับค่าข้อมูลการให้ยาเพื่อทำการจำลองระดับยาในเลือด จะประกอบไปด้วยขั้นตอนย่อยอีก 3 ขั้นตอนคือ การเพิ่มจำนวนแถวแบบจำลองตาราง การลดแถวของแบบจำลองตาราง และ การกำหนดค่าให้กับเวกเตอร์ รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-22 ในภาคผนวก ก

(7) การคำนวณเพื่อจำลองความเข้มข้นในระยะเวลา 24 ชั่วโมง ขั้นตอนและรายละเอียดระบุไว้ในตารางที่ ก-23 โดยแนวคิดในการการคำนวณคือ เมื่อได้ทำการคำนวณค่าตัวแปรและทำการปรับค่าตัวแปรแล้วตัวแปรที่ได้ (K_d, V_d) จะนำมาใช้เพื่อทำการจำลองค่าความเข้มข้นของยาในเลือด โดยการจำลองค่าความเข้มข้นของระดับยานั้นจะขึ้นอยู่กับสองสิ่งคือ

แบบจำลองที่เลือกใช้สำหรับผู้ป่วย (แบบคอมพาร์ทเมนต์) และ วิธีการในให้ยา ผู้ใช้ต้องกำหนดวิธีการให้ยากับผู้ป่วย โดยข้อมูลที่ในการให้ยากับผู้ป่วยที่ต้องการได้แก่ ปริมาณหรืออัตราในการให้ยา เวลาเริ่มต้นในการให้ยา และ เวลาสิ้นสุด ค่าเหล่านี้จะถูกบรรจุไว้ในแบบจำลองตาราง และจะถูกบรรจุหรือถูกกำหนดให้กับเวกเตอร์ เพื่อที่จะนำไปใช้ในการคำนวณ เมื่อได้ข้อมูลการให้ยาแล้วระบบก็จะคำนวณ ตามเงื่อนไขของแบบจำลองที่เลือก เมื่อการคำนวณสิ้นสุดก็จะแสดงผลเป็นกราฟของความเข้มข้นบนส่วนแสดงผล

(8) การคำนวณความเข้มข้นของระดับยาในเลือด ณ เวลาที่ต้องการบนกราฟการจำลองระดับยา รายละเอียดระบุไว้ในตารางที่ ก-24

(9) การค้นหาข้อมูลตัวแปร ข้อมูลยา และข้อมูลผู้ป่วย รายละเอียดแสดงไว้ในตารางที่ ก-26 และ ตารางที่ ก-27

3.3.2 ความต้องการที่ไม่ใช่หน้าที่ (Non Functional Requirement)

แสดงถึงองค์ประกอบที่ควรจะมีในระบบ เพื่อสนับสนุนการทำงานของระบบและทำให้ระบบมีเสถียรภาพมากขึ้น รายละเอียดต่างๆมีดังต่อไปนี้

1) ส่วนติดต่อผู้ใช้งานและความสามารถของผู้ใช้งานระบบ (User interface and human factor) ส่วนติดต่อกับผู้ใช้งานระบบ จะแสดงผลเป็นแบบกราฟิก เพื่อง่ายในการทำความเข้าใจและง่ายต่อการใช้งาน ผู้พัฒนาซอฟต์แวร์จะต้องมีการฝึกอบรมการใช้งานระบบ ให้กับผู้ที่มีส่วนเกี่ยวข้องในการใช้งานระบบ โดยมีเวลาการอบรมไม่ต่ำกว่า 4 ชั่วโมง

2) งานด้านเอกสาร (Documentation) กระบวนการพัฒนาระบบต้องมีการจัดทำเอกสารในการออกแบบ ได้แก่ ข้อกำหนดในการออกแบบซอฟต์แวร์ (Software Design Specification : SDS)

3) ประสิทธิภาพ (Performance characteristics) เมื่อผู้ใช้ร้องขอไปยังระบบ ระบบจะโต้ตอบภายในเวลา 15 วินาที การโต้ตอบนี้จะวัดเมื่อป้อนข้อมูลหรือกดแป้นคีย์บอร์ดครั้งสุดท้าย เพื่อให้ข้อมูลไปปรากฏบนหน้าจอกอมพิวเตอร์

4) การจัดการความผิดพลาด (Error Handling and Extreme conditions) ถ้ามีการป้อนข้อมูลผิดพลาดเข้าไปในระบบทำให้มีความผิดพลาดเกิดขึ้น ระบบจะทำการโต้ตอบด้วยการแสดงข้อความผิดพลาด เช่น มีอักขระน้อยเกินไป มีอักขระไม่ถูกต้องตามรูปแบบชนิดของข้อมูล

5) ด้านคุณภาพ (Quality Issues) กระบวนการพัฒนาระบบจะต้องมี SRS (Software Requirement Specification) ที่มีความสอดคล้องกัน เช่น ข้อกำหนด การอธิบายถึงความต้องการ

ในรูปแบบของตาราง และในการกำหนดอื่นๆ ต้องมีการอธิบายความต้องการในรูปแบบของตารางด้วย

6) การแก้ไขระบบ (System Modification) เวลาเฉลี่ยในการแก้ไขข้อผิดพลาดต้องไม่เกิน 1 วัน

7) ความปลอดภัย (Security Issues) ระบบควรมีการสำรอง (Backup) ข้อมูลทุกๆ 1 วัน และเก็บข้อมูล ที่สำรองนั้นไว้ ในที่ที่ปลอดภัย ซึ่งไม่ใช่บริเวณเดียวกันกับที่ ระบบติดตั้งอยู่

8) ด้านทรัพยากร (Resources Issues) ฮาร์ดแวร์และซอฟต์แวร์ทั้งหมดจะต้องถูกกฎหมาย และมีการแจกแจงรายละเอียด พร้อมราคาทั้งหมด ระบบควรมีรูปแบบการเก็บข้อมูลที่เป็นมาตรฐาน เช่น การเก็บข้อมูลในไฟล์อักขระ ควรมีรูปแบบ(format) ที่เป็นไปตามมาตรฐานขององค์กร การเก็บข้อมูลลงในโปรแกรมฐานข้อมูลที่มีมาตรฐาน เพื่อให้สามารถแลกเปลี่ยนข้อมูลระหว่างระบบได้ในอนาคต

3.3.3 ความต้องการเทียม (Pseudo Requirement)

เป็นความต้องการที่อาจเป็น หรือ ไม่เป็นไปตามความต้องการก็ได้ แต่หากสามารถเป็นไปได้ตามความต้องการ จะทำให้ประสิทธิภาพของระบบดีขึ้นดังแสดงไว้ในรูป 3-15

ความต้องการทางด้านฮาร์ดแวร์ (Hardware Requirement) สำหรับผู้ให้บริการ
— หน่วยประมวลผลมีความเร็วตั้งแต่ 2 GHz และหน่วยความจำหลักตั้งแต่ 512 MB ขึ้นไป เนื่องจากเซิร์ฟเวอร์ต้องให้บริการการค้นข้อมูลและการคำนวณในปริมาณมาก
— หน่วยความจำสำรองตั้งแต่ 80 GB ขึ้นไปเพื่อใช้สำหรับเป็นเนื้อที่ในการเก็บแอปพลิเคชัน และเพื่อรองรับการเก็บข้อมูลในปริมาณมาก
— มี CD-RW ความเร็วอย่างน้อย 52x24x52 ใช้สำหรับการติดตั้งซอฟต์แวร์ ที่สนับสนุนการทำงานของระบบ หรือเพื่อแก้ไขปัญหาของระบบ หรืออาจใช้เพื่อทำการสำรองข้อมูลระบบบางส่วน
— Floppy Disk Drive ขนาด 1.4 นิ้ว
— มี USB port เพื่อใช้ในการต่อพ่วงอุปกรณ์หรือเพื่อใช้ในการสื่อสารระหว่างเครื่องคอมพิวเตอร์

รูปที่ 3-15 แสดงรายละเอียดสำหรับความต้องการเทียม

<p>ความต้องการทางด้านฮาร์ดแวร์ (Hardware Requirement) สำหรับผู้ให้บริการ</p> <ul style="list-style-type: none"> – หน่วยประมวลผลมีความเร็วตั้งแต่ 800 MHz และหน่วยความจำหลัก 128 MB ขึ้นไป เพื่อสนับสนุนการคำนวณและการแสดงผลทางด้านกราฟิก – หน่วยความจำสำรองตั้งแต่ 10 GB ขึ้นไปเพื่อใช้สำหรับการเก็บระบบปฏิบัติการและเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการทำงานของระบบโดยรวม – มี CD Rom Drive เพื่อใช้ในการติดตั้งซอฟต์แวร์เช่น ติดตั้งระบบปฏิบัติการ – Floppy Disk Drive ขนาด 1.4 นิ้ว
<p>ความต้องการทางด้านซอฟต์แวร์ (Software Requirement)</p> <p>(สำหรับผู้ให้บริการ)</p> <p>ระบบนี้สามารถใช้กับ ระบบปฏิบัติการ windows 2000,windows XP professional</p> <p>(สำหรับผู้รับบริการ)</p> <p>สามารถใช้งานได้กับระบบปฏิบัติการที่มีเว็บเบราว์เซอร์ และมี แอปพลิเคชันสำหรับเริ่มสภาพแวดล้อมจาวา</p>

รูปที่ 3-15 แสดงรายละเอียดสำหรับความต้องการเพิ่มเติม(ต่อ)