

کاربرد روشهای کموتریکس در پایش آلاینده های زیست محیطی

لیلا عالی زاده^۱، محمدرضا باعزت^۱، سعید یوسفی نژاد^{۲،۳*}

^۱گروه شیمی، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

^۲مرکز تحقیقات علوم بهداشتی، پژوهشکده سلامت دانشگاه علوم پزشکی شیراز، شیراز، ایران

^۳گروه مهندسی بهداشت حرفه ای و ایمنی کار، دانشگاه علوم پزشکی شیراز، شیراز، ایران

چکیده: با توجه به اهمیت اندازه گیری های زیست محیطی و پایش غلظت آلاینده ها، میزان مواجهه با آنها و ضرورت کاهش مخاطرات زیست محیطی برای جوامع انسانی و موجودات زنده، استفاده از کموتریکس در مطالعات زیست محیطی در طول دو دهه گذشته افزایش یافته است. این کاربردها به آزمون و اثبات قدرت روش های پردازش داده ها اختصاص داده شده در این زمینه و در دسترس بودن نرم افزارهای مناسب با تحقیقات فشرده در این زمینه منجر شده است. در این مطالعه مروری بر جنبه هایی از توانمندی روشهای کموتریکس یا شیمی سنجی در پردازش داده های زیست محیطی و اندازه گیری های آلاینده های خطرناک پرداخته ایم. با توجه به مزایای روشهای چند متغیره و کموتریکس انتظار می رود که در آینده این زمینه کاری بتواند در حل مسائل دشوار و استخراج اطلاعات مفید بیشتر از داده های آنالیز دستگامی حوزه زیست محیطی موثر باشد که البته چالش های بسیاری نیز در این راه وجود دارد. از آنجایی که پایش های زیست محیطی همچنان با مخلوطهای آلاینده پیچیده تر مواجه می شود، استفاده از رویکردهای کموتریکس پیشرفته برای به دست آوردن بینش جامع در مورد سرنوشت و رفتار آلاینده ها در سیستم های زیست محیطی یا زیستی دارای اهمیت خواهد بود. چشم اندازها و چالش های آینده در کاربرد کموتریکس، پتانسیل زیاد این روش ها برای پیشبرد پایش های زیست محیطی و تجزیه آلاینده ها را نشان می دهد. از ادغام داده های بزرگ و یادگیری ماشین گرفته تا پیشرفت ها در تصویربرداری فرایفی، همجوشی حسگر و کمی سازی عدم قطعیت، اطلاعات موجود در متون علمی بر وسعت رویکردهای نوظهور و نوآورانه در کموتریکس زیست محیطی تأکید می کند.

واژگان کلیدی: روش های چند متغیره، ترکیبات آلی، آلاینده های محیطی، پایش، آلودگی، شیمی سنجی

yousefinejad.s@gmail.com

در حال رشد هستند، توسعه مداوم برنامه ها و دستگاه های نظارت خودکار و پیشرفته برای افزایش دقت گزارش های پایش زیست محیطی و مقرون به صرفه بودن فرآیند نظارت بر محیط زیست بسیار مهم است [۴،۵].

در سال های اخیر، نگرانی فزاینده ای در مورد این وجود داشته است که افزایش مواجهه با آلاینده های آلی پایدار زیست محیطی، شامل هیدروکربن های آروماتیک چند حلقه ای، آفت کش های کلر دار آلی و آلاینده های آلی نو ظهور از جمله،

۱- مقدمه

هدف اصلی پایش زیست محیطی، مدیریت و به حداقل رساندن تأثیر فعالیت بر محیط زیست است، که می تواند از جنبه های مختلف از جمله اطمینان از انطباق با قوانین و مقررات و نیز برای کاهش خطرات اثرات مضر بر محیط زیست طبیعی و حفاظت از سلامت انسان ها مورد استفاده قرار گیرد [۱-۳]. از آنجایی که جمعیت انسان ها، فعالیت های صنعتی و مصرف انرژی همچنان

سه حوزه اصلی مورد علاقه محققان کمومتریکس در حوزه زیست محیطی شامل تجزیه و تحلیل شیمیایی کمی، نظارت بر ارزیابی و مدل سازی و پیش بینی کیفیت زیست محیطی و اثرات سم شناسی است [۱۴].

مطالعات پایش زیست محیطی منجر به جمع آوری مقادیر زیادی از پارامترهای فیزیکی و غلظت های شیمیایی جمع آوری شده در مکان های جغرافیایی مختلف، دوره های زمانی و/یا بخش های مختلف مطالعات زیست محیطی (به عنوان مثال، هوا، آب، خاک و موجودات زنده) می شود. به منظور آشکار ساختن الگوهای مرتبط و تنوع منابع در این مجموعه داده های بزرگ زیست محیطی، رویکردهای کمومتریکس بر اساس تجزیه و تحلیل داده های چند متغیره آماری و تحلیل فاکتوری در دهه های گذشته پیشنهاد شده و به کار گرفته شده است. فرض اساسی این روش ها این است که تغییر هر یک از پارامترها یا غلظت های شیمیایی اندازه گیری شده در یک نمونه خاص را می توان با کاهش تعداد مشارکت های مختلف ناشی از منابع محیطی مستقل یا مزاحمت ها توضیح داد و تحلیل کرد.

یکی از روش های متداول برای آنالیز الاینده های محیط زیستی استفاده از روش های کروماتوگرافی است. با این حال، روش های کروماتوگرافی نسبتاً گران و زمان بر هستند و اغلب نیاز به روشهای آماده سازی پر زحمت قبل از آنالیز دارند. البته برخی راهکارها برای مشکل گران قیمت بودن روشهای آنالیز کروماتوگرافی پیشنهاد شده است که از جمله آن استفاده از راهبردهای جایگزین آنالیز دستگاهی است. از جمله این روش ها استفاده از روش های فسفریمتری و فلوریمتری است که حد تشخیص های پایینی دارند و برای آنالیز غلظت های بسیار پایین نیز مناسب هستند [۱۶]. با این وجود، به طور کلی اندازه گیری های مبتنی بر روشهای طیف سنجی فاقد گزینش پذیری هستند و به ویژه این مشکل زمانی که ترکیبات شیمیایی مشابه در نمونه های پیچیده باید آنالیز شوند و در حضور گونه های مداخله گر مرتبط با نمونه های طبیعی برجسته تر می شود. استفاده از روش های کمومتریکس مبتنی بر روش های کالیبراسیون چند متغیره به منظور غلبه بر این محدودیت ها و تکمیل روش های آنالیز طیف سنجی می تواند بسیار کمک کننده باشد [۱۷]. شکل ۱

بازدارنده های بروم دار آسیب بر سلامت انسان و حیات وحش را به دنبال داشته باشد و شواهد بسیاری نیز در این زمینه ارائه شده است [۶،۷]. وجود این مواد مضر می تواند باعث اختلالاتی در طبیعت شود و از طرف دیگر نیاز به بکارگیری چرخه ها و فرآیندها و نیاز به دستیابی به دانش بهتر و عمیق تر در مورد مدیریت تخلیه آلاینده های آلی و اثرات زیست محیطی مرتبط با آنها همواره احساس می شود. آلاینده های زیست محیطی، از جمله مواد شیمیایی، فلزات سنگین و ترکیبات آلی، تهدیدات قابل توجهی برای اکوسیستم، سلامت انسان و محیط زیست به طور کلی ایجاد می کنند. بنابراین تشخیص دقیق، شناسایی و تعیین کمیت این آلاینده ها برای پایش و مدیریت موثر زیست محیطی ضروری است [۸].

کمومتریکس، کمومتری یا شیمی سنجی یک شاخه چند رشته ای است که اصول ریاضیات، آمار و شیمی را برای استخراج اطلاعات ارزشمند از داده های شیمیایی پیچیده ترکیب می کند و نقش مهمی در علوم زیست محیطی، به ویژه در تجزیه و تحلیل و تفسیر داده های مربوط به آلاینده های زیست محیطی ایفا می کند [۹]. کاربرد کمومتریکس در زمینه آلاینده های زیست محیطی شامل توسعه و اجرای روش های آماری و ریاضی برای تجزیه و تحلیل مجموعه داده های بزرگ تولید شده از برنامه های پایش محیطی، آزمایش های آزمایشگاهی و مطالعات میدانی است [۱۰]. این روش ها دانشمندان را قادر می سازد تا اطلاعات معنی داری را از داده های شیمیایی پیچیده استخراج کنند، الگوها و روندها را شناسایی کنند و در مورد استراتژی های کنترل آلودگی و اصلاح تصمیمات آگاهانه بگیرند [۱۱]. روشهای کمومتریکس با توجه به توانایی ها و مزایای خود به ویژه کالیبراسیون های چند متغیره و روشهای طبقه بندی دسته بندی، در حل بسیاری از مسائل تجزیه ای به کار رفته اند [۱۲]. از میان این کاربردها، افزایش استفاده از کمومتریکس در مطالعات زیست محیطی در طول دو دهه گذشته، محکی برای اثبات قدرت روش های پردازش داده ها بوده است. همچنین در دسترس بودن نرم افزارهای مناسب به تحقیقات فشرده کمک شایانی به حل مسائل در پایش ها و اندازه گیری های زیست محیطی را داشته است [۱۳].

روشهای کمومتریکس مختلف در تحلیل داده‌های تجزیه‌های زیست محیطی را خلاصه کرده است.

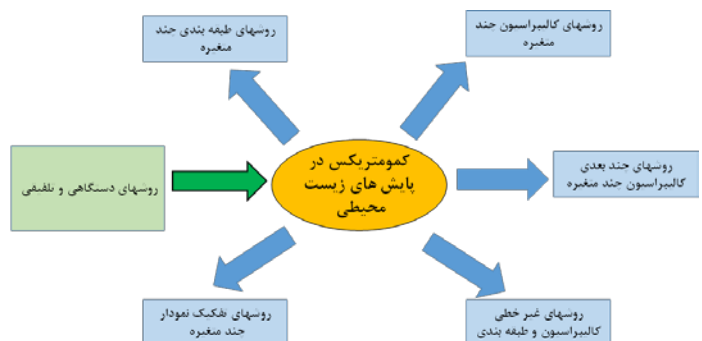
روشهای کالیبراسیون چند متغیره با استفاده از مدل‌های ریاضی سیگنال‌های چند متغیره را به غلظت آنالیت یا ویژگی‌های نمونه مرتبط می‌کند [۱۸]. در حالی که در کالیبراسیون تک متغیره، که به طور معمول و سنتی در تهیه یک منحنی کالیبراسیون به کار می‌رود، یک مقدار عددی واحد (مثلاً جذب در یک طول موج خاص) در هر نمونه را ثبت و آنالیز می‌کند. به عبارت دیگر کالیبراسیون چند متغیره با آرایه‌های داده‌های پیچیده‌تر، مثلاً یک بردار داده یا یک ماتریس داده به ازای هر نمونه کار می‌کند و امکان تخمین‌های کمی تحلیلی را در سیستم‌های حاوی چند گونه شیمیایی و فاقد گزینش پذیری را فراهم می‌کند [۱۹]. در روشهای کالیبراسیون مرتبه اول، پاسخ یک "بردار عددی" (داده‌های مرتبه اول، به عنوان مثال، طیف، ولتاموگرام، پروفایل‌های زمانی) برای هر نمونه است. استفاده از این اطلاعات به اصطلاح "مزیت مرتبه اول" را فراهم می‌کند. با استفاده از مزیت مرتبه اول، کمی‌سازی یک آنالیت (آلاینده هدف) در حضور گونه مزاحم یا مداخله‌گر، زمانی که ترکیبات مزاحم در نمونه‌های کالیبراسیون در طول ایجاد مدل کالیبراسیون وجود داشته باشند را ممکن می‌سازد [۲۰، ۲۱]. در روش‌های کالیبراسیون "مرتبه دوم"، پاسخ حاصل از آنالیز یک نمونه یک ماتریس داده برای هر نمونه است. به عنوان مثال به ازای هر نمونه، داده‌های مرتبه دوم همچون یک کروماتوگرام (HPLC-DAD) یا اندازه‌گیری فلورسانس برانگیختگی-نشر ثبت می‌شود که در نهایت به این

معناست که سهم آنالیت را می‌توان از نظر کمی حتی در حضور گونه‌های مداخله‌گر ناشناخته تخمین زد و این مهم بدون حضور گونه‌های مزاحم در نمونه‌های کالیبراسیون نیز امکان پذیر است [۲۰، ۲۱]. هر چند تا اینجا به روش‌های چند متغیره مرتبه اول و دوم اشاره شد. اما مجموعه داده‌های مرتبه بالاتر از این دو مورد و استراتژی‌های کالیبراسیون مربوط به آنها نیز امکان پذیر است و قادر است قدرت تفکیک و برآوردهای کمی را بیش از مراتب اول و دوم بهبود بخشد.

امکان استفاده از پاسخ‌های دستگاهی بسیار متنوع می‌تواند از مزیت‌های روش‌های چند متغیره کمومتریکس باشد که به پیش‌بینی غلظت آنالیت منجر می‌شود. بر اساس نتایج منتشر شده تحقیقات در متون علمی، کالیبراسیون چند متغیره به ابزارهای تحلیلی بسیار قدرتمندی تبدیل شده‌اند. اگرچه اولین انتشارات در این زمینه تحقیقاتی است در حدود ۳۰ سال قبل منتشر شد، اما پس از آن و در دهه اخیر رشد قابل توجهی در برنامه‌های کاربردی مرتبه دوم و سوم و جعبه ابزارهای محاسباتی مرتبط در حوزه چند متغیره در زمینه‌های مختلف شیمی تجزیه صورت گرفته است [۲۲].

الگوریتم‌ها و کاربردهای کالیبراسیون چند متغیره مرتبه دوم و سوم در مقالات و متون مختلف مورد بررسی و بحث قرار گرفته‌اند [۲۱]. جدای از الگوریتم‌های درجه دوم کالیبراسیون، مانند تفکیک منحنی چند متغیره با حداقل کردن مربعات به روش متناوب (MCR-ALS) [۲۳] و تحلیل عاملی موازی^۳ (PARAFAC) [۲۴]، روش‌های دیگری بر اساس مدل‌سازی داده‌های انعطاف‌پذیر پیشنهاد شده‌اند که از میان آنها می‌توان به حداقل مربعات جزئی (PLS) برای تجزیه نمونه‌های زیست محیطی اشاره کرد [۲۵، ۲۶].

به این ترتیب، با استفاده از روش‌های چند متغیره و کمومتریکس می‌توان منابع آلودگی نقطه‌ای و پراکنده متعلق به یک منشأ خاص (طبیعی، انسانی، صنعتی، کشاورزی) را مشخص کرد و تقسیم نسبی آنها برای آشکار کردن الگوهای جغرافیایی، زمانی یا غیره را انجام داد [۲۷]. بنابراین با توجه به مزایای بیان شده می‌



شکل ۱. روش‌های کمومتریکس مختلف در تحلیل داده‌های تجزیه‌های زیست محیطی

² Multivariate Curve Resolution-Alternating Least Squares

³ PARAllel FACTor analysis

⁴ Partial Least Squares regression

¹ High-Performance Liquid Chromatography with Diode-Array Detection

توان ادعان کرد که کاربرد کمومتریکس در تحقیقات آلودگی زیست محیطی اغلب جایگاه ویژه ای دارد [۲۷،۲۸].

۲- نقش کمومتریکس در افزایش دقت و صحت آنالیزهای زیست محیطی

در دهه های اخیر، پیشرفت های قابل توجهی در روش های آنالیز و تجزیه دستگاهی برای تشخیص آلاینده های محیطی صورت گرفته است. این روش ها شامل کروماتوگرافی [۲۹]، طیف سنجی جرمی [۳۰]، طیف سنجی [۳۱]، روش های الکتروشیمیایی [۳۲] و غیره می باشد. این ابزارهای تجزیه ای اطلاعات ارزشمندی در مورد وجود، غلظت و توزیع آلاینده ها در نمونه های محیطی مانند هوا، آب، خاک و موجودات زنده ارائه می دهند.

با این حال، داده های تولید شده توسط این روش ها اغلب پیچیده و چند متغیره هستند و حاوی اطلاعاتی در مورد ترکیبات شیمیایی متعدد و برهمکنش های آنها هستند. این پیچیدگی چالش هایی را در تجزیه و تحلیل و تفسیر داده ها ایجاد می کند و استخراج اطلاعات مرتبط با استفاده از روش های آماری سنتی را دشوار می کند. اینجاست که کمومتریکس وارد عمل می شود و مجموعه ای از ابزارها و روش های قدرتمند را برای کشف پیچیدگی داده های آلاینده های محیطی ارائه می دهد [۳۳،۱۴-۳۵].

کمومتریکس، به عنوان یک زمینه چند رشته ای، نقش مهمی در افزایش دقت و صحت تجزیه و تحلیل داده های شیمیایی ایفا می کند [۳۶]. در زمینه علوم زیست محیطی و پایش آلاینده ها، کاربرد کمومتریکس در پرداختن به چالش های مربوط به کیفیت داده ها، کاهش نویز و اعتبارسنجی مدل دستگاهی است. در این قسمت از مقاله به طور جامع به جنبه های کلیدی نقش کمومتریکس در افزایش دقت و صحت پرداخته می شود و از متون علمی مربوطه برای ایجاد درک کاملی از تأثیر آن بر تجزیه آلاینده های زیست محیطی استفاده می شود.

۲-۱- پیش پردازش داده ها و کاهش نویز

یکی از کمک های اولیه کمومتریکس در افزایش دقت و صحت از طریق روش های پیشرفته پیش پردازش داده هاست [۳۷].

داده های آلاینده های زیست محیطی اغلب حاوی نویز، نقاط پرت و مداخله گرهایی هستند که می توانند بر قابلیت اطمینان نتایج تجزیه ای تأثیر بگذارند. روش های کمومتریکس مانند تصحیح خط پایه، هموارسازی^۱ و تشخیص نقاط پرت نقش مهمی در بهبود کیفیت داده ها با کاهش تأثیر تنوع ابزار به کاررفته یا اثرات محیطی بر داده ایفا می کنند [۱۲]. با حذف موثر اجزای نویز ناخواسته، روش های پیش پردازش کمومتریکس به افزایش دقت و صحت داده ها کمک می کند [۳۸] و منجر به تفسیرهای مطمئن تر از سطوح آلاینده در نمونه های زیست محیطی می شود.

۲-۲- نرمال سازی و کالیبراسیون

روش های کمومتریکس برای نرمال سازی و کالیبراسیون داده ها نیز ضروری هستند، که گام های مهمی در حصول اطمینان از صحت و دقت تجزیه آلاینده های زیست محیطی هستند [۳۹]. روش های نرمال سازی مانند مقیاس خودکار و مرکزیت میانگین، حذف اثرات مقیاس و تغییرات در پاسخ های دستگاهی را ممکن می سازد. در نتیجه مقایسه منطقی مقادیر آلاینده را در نمونه های مختلف یا مکان های مورد پایش تسهیل می کنند [۴۰،۴۱].

علاوه بر این، روش های کالیبراسیون کمومتریکس، از جمله روش های رگرسیون چند متغیره مانند حداقل مربعات جزئی (PLS) و رگرسیون مؤلفه اصلی (PCR)، به طور گسترده برای ایجاد روابط قوی بین سیگنال های تجزیه ای و غلظت آلاینده استفاده می شوند [۴۲]. این مدل های کالیبراسیون نه تنها دقت کمی سازی آلاینده ها را افزایش می دهند، بلکه دقت پیش بینی ها را نیز بهبود می بخشند. این مزایا به خوبی در مطالعات پایه نشان داده شده است [۴۳،۴۴].

۲-۳- اعتبارسنجی مدل و کمی سازی عدم قطعیت

نقش کمومتریکس در افزایش دقت و صحت به جنبه مهم اعتبارسنجی مدل و تعیین کمی عدم قطعیت در تجزیه آلاینده های زیست محیطی در حال گسترش است. مدل های کمومتریکس که برای پیش بینی مقادیر آلاینده یا شناسایی منابع آلودگی ایجاد

¹ Smoothing

² Principal Component Regression

شده‌اند، باید برای اطمینان از قابلیت اطمینان و تعمیم‌پذیری آنها، مراحل اعتبارسنجی دقیقی را پشت سر بگذارند.

اهمیت روش‌های اعتبارسنجی متقاطع، مانند اعتبارسنجی متقاطع یک‌تایی و اعتبارسنجی متقاطع k تایی، برای ارزیابی عملکرد پیش‌بینی‌کنندگی در مدل‌های کمومتریکس تأکید شده است [۴۵]. این روش‌های اعتبارسنجی نه تنها دقت پیش‌بینی‌های مدل را افزایش می‌دهند، بلکه بینش‌هایی را در مورد صحت تخمین‌های انجام شده توسط مدل را ارائه می‌دهند [۱۰] و در نتیجه محققان را قادر می‌سازند تا عدم قطعیت‌های مرتبط با اندازه‌گیری‌های آلاینده را کمی کنند.

۲-۴- روش‌های آماری چند متغیره قوی در جهت افزایش صحت و دقت

استفاده از روش‌های آماری چند متغیره قوی یکی از ویژگی‌های کمومتریکس در افزایش دقت و صحت در تجزیه آلاینده‌های زیست محیطی است [۴۵]. روش‌های چند متغیره مانند تجزیه و تحلیل PCA، PLS و تجزیه و تحلیل خوشه‌ای، محققان حوزه‌های پایش آلاینده‌های زیست محیطی و مواجهات شغلی را قادر می‌سازد تا اطلاعات مرتبط را از مجموعه داده‌های پیچیده استخراج کنند و در عین حال تأثیر نقاط دورافتاده و تغییرات نامربوط را به حداقل برسانند. به عنوان مثال، در مطالعه‌ای از روش‌های تحلیل مؤلفه اصلی (PCA) و تحلیل عاملی اصلی (PFA) برای ارزیابی اثربخشی شبکه پایش کیفیت آب سطحی در رودخانه‌ای استفاده شده است که متغیرهای ارزیابی شده ایستگاه‌های پایش بودند [۴۷].

۲-۵- ادغام روش‌های پیشرفته دستگامی

ادغام روش‌های پیشرفته دستگامی با روش‌های کمومتریکس در افزایش دقت و صحت تجزیه آلاینده‌های زیست محیطی اهمیت بسیاری دارد [۴۸]. پلتفرم‌های تجزیه‌ای مدرن مانند سیستم‌های کروماتوگرافی-طیف‌سنجی جرمی، طیف‌سنجی جذب اتمی و ابزارهای طیف‌سنجی مجموعه‌های داده‌های چند متغیره

پیچیده‌ای را تولید می‌کنند که برای تفسیر مؤثر به ابزارهای کمومتریکس پیچیده نیاز دارند [۴۹].

۲-۶- استفاده از روابط غیرخطی در چالش‌ها

سهم مهم دیگر کمومتریکس در افزایش دقت و صحت و توانایی آن برای رسیدگی به چالش‌های مرتبط با روابط غیرخطی بین آلاینده‌ها و سیگنال‌های تجزیه‌ای است. روش‌های سنتی تک متغیره ممکن است برای ثبت برهم‌کنش‌های غیرخطی پیچیده بین آلاینده‌های متعدد و عوامل محیطی مشکل داشته باشند که منجر به عدم دقت در تعیین کمیت آلاینده می‌شود. از طرف دیگر، روش‌های کمومتریکس پیشرفته مبتنی بر روش‌های هوش مصنوعی مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) [۵۰]، ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM) [۵۱] و روش‌های مبتنی بر هسته (Kernel) [۵۲] راه‌حل‌های قدرتمندی برای مدل‌سازی روابط غیرخطی در داده‌های آلاینده‌های زیست محیطی ارائه می‌دهند.

۳- رویکردهای کمومتریکس نوآورانه برای پایش آلاینده‌های پیچیده

با توجه به مزایای روش‌های کمومتریکس در تحلیل داده‌های پیچیده، در این بخش از مقاله، رویکردهای کمومتریکس نوآورانه‌ای را بررسی خواهیم کرد که به عنوان ابزار قدرتمندی برای مقابله با چالش‌های مرتبط با آلاینده‌های پیچیده ظاهر شده‌اند. بر اساس تحقیقات منتشر شده، در این بخش به صورت خلاصه درکی از کاربردها، مزایا و چشم‌اندازهای آینده روش‌های کمومتریکس پیشرفته ارائه خواهد شد.

۳-۱- تفکیک منحنی چند متغیره (MCR) برای واهم گشت‌سیگنال‌های همپوشانی

یکی از رویکردهای کمومتریکس نوآورانه که در تجزیه و تحلیل آلاینده‌های پیچیده انقلابی ایجاد کرده است، تفکیک منحنی چند متغیره (MCR) است. روش‌های MCR، دکانولوشن یا

² Artificial Neural Networks

³ Support Vector Machines

⁴ Deconvolution

¹ Principal Factor Analysis

۳-۳- غربالگری غیر هدفمند با استفاده از طیف سنجی جرمی با وضوح بالا و داده کاوی کموتریکس

استفاده از طیف‌سنجی جرمی با وضوح بالا (HRMS) همراه با داده‌کاوی کموتریکس، مرزهای جدیدی را در غربالگری غیرهدفمند آلاینده‌های پیچیده در نمونه‌های زیست محیطی و مواجهه با آلاینده‌ها باز کرده است [۵۹]. HRMS داده‌های طیفی با کیفیت بالا را فراهم می‌کند و امکان شناسایی آلاینده‌های ناشناخته و محصولات تبدیلی را که ممکن است با استفاده از روش‌های تجزیه ای مرسوم هدف قرار نگیرند را فراهم می‌کند [۶۰]. مطالعات مختلف پتانسیل روش های داده کاوی کموتریکس مانند انتخاب ویژگی، خوشه بندی و الگوریتم های طبقه بندی را در تجزیه و تحلیل داده های HRMS برای غربالگری غیر هدفمند آلاینده های پیچیده نشان داده است [۶۰]. این رویکردهای کموتریکس نوآورانه، شناسایی سریع آلاینده‌های نوظهور و محصولات تبدیلی را امکان‌پذیر می‌سازد. در نتیجه دقت و صحت پایش آلاینده‌ها و ارزیابی ریسک در سیستم‌های زیست‌محیطی را افزایش می‌دهد [۶۱].

۳-۴- رویکردهای شیمی‌سنجی مبتنی بر یادگیری ماشین برای توسعه مدل های پیش‌بینی کننده

ادغام رویکردهای کموتریکس مبتنی بر یادگیری ماشین، مدل‌سازی پیش‌بینی‌کننده آلاینده‌های پیچیده در نمونه‌های زیست محیطی را به‌طور قابل‌توجهی پیشرفته کرده است. الگوریتم‌های یادگیری ماشین، از جمله جنگل‌های تصادفی، ماشین‌های بردار پشتیبان و مدل‌های یادگیری عمیق، ابزارهای قدرتمندی را برای ثبت روابط غیرخطی پیچیده بین داده‌های آلاینده و عوامل محیطی ارائه می‌دهند [۶۲].

مطالعات مختلفی اثربخشی رویکردهای کموتریکس مبتنی بر یادگیری ماشین را در پیش‌بینی دقیق مقادیر آلاینده، تقسیم منبع و الگوهای توزیع فضایی آلاینده‌ها در سیستم‌های زیست محیطی نشان داده‌اند [۶۳، ۶۴]. این رویکردهای نوآورانه با استفاده از مجموعه داده‌های بزرگ و گرفتن الگوهای پیچیده، دقت و صحت مدل‌سازی پیش‌بینی‌کننده را افزایش می‌دهند و در نتیجه

تفکیک سیگنال‌های همپوشانی را در داده‌های تحلیلی امکان‌پذیر می‌سازد، که به ویژه در نمونه‌های زیست محیطی حاوی مخلوط‌هایی از آلاینده‌ها با غلظت‌ها و ویژگی‌های طیفی متفاوت، بسیار ضروری و مفید است [۵۳].

بسیاری از مطالعات کارایی MCR را در مخلوط‌های آلاینده پیچیده در نمونه‌های مختلف و از جمله آن زیست محیطی نشان داده‌اند که منجر به شناسایی دقیق و تعیین کمیت اجزای موجود در مخلوط به صورت جداگانه می‌شود [۵۴]. با استخراج پروفایل‌های طیفی و غلظت خالص از سیگنال‌های دارای همپوشانی، MCR به افزایش دقت و صحت در تجزیه آلاینده‌ها کمک می‌کند و در نتیجه بینش‌های ارزشمندی در مورد منابع و رفتار آنها در سیستم‌های محیطی ارائه می‌دهد [۵۵].

۳-۲- روش های دستگاهی تلفیقی و روشهای کموتریکس چند بلوکی برای تجزیه جامع آلاینده ها

ادغام روش های تجزیه ای با عنوان روشهای تلفیقی، مانند کروماتوگرافی گازی-طیف سنجی جرمی و کروماتوگرافی مایع-طیف سنجی جرمی، با روش های کموتریکس چند بلوکی به عنوان یک رویکرد نوآورانه برای تجزیه و تحلیل جامع آلاینده های پیچیده پدید آمده است. این روش‌های تلفیقی می‌توانند داده‌های چند بعدی تولید کنند و چالش مهمی برای تفسیر دقیق و تعیین کمیت آلاینده‌ها ایجاد می‌کنند. اما روش‌های کموتریکس در حل این چالش‌ها بسیار مهم و کارگشا بوده‌اند [۵۶].

مطالعات مختلفی کاربرد روش‌های کموتریکس چند بلوکی، از جمله تحلیل عاملی موازی [۵۷] و حداقل مربعات جزئی چند بلوکی (MB-PLS) [۵۸] را در مدیریت موثر داده‌های چند بعدی از روش‌های دستگاهی تلفیقی برجسته کرده‌اند. این روش‌ها با یکپارچه‌سازی اطلاعات از بلوک‌های تجزیه ای مختلف، تجزیه جامع آلاینده‌های پیچیده را امکان‌پذیر می‌کنند که منجر به بهبود دقت و صحت در شناسایی و تعیین کمیت کلاس‌های متنوع آلاینده‌ها در نمونه‌های محیطی می‌شود.

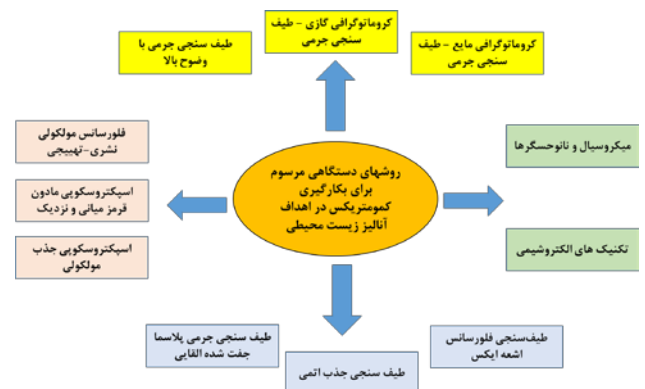
² High Resolution Mass Spectrometry

¹ Multi Block-Partial Least Squares

بینش های ارزشمندی در مورد رفتار و سرنوشت آلاینده های پیچیده در بافت های مختلف زیست محیطی ارائه می دهند.

۴- روش های تجزیه دستگاهی متداول برای تشخیص آلاینده های محیطی

آلودگی های محیطی ناشی از انتشار آلاینده های مختلف در هوا، آب و خاک، تهدیدات قابل توجهی برای زیست بوم ها و سلامت انسان به شمار می رود. شناسایی و تعیین کمیت آلاینده ها در نمونه های زیست محیطی برای ارزیابی تاثیر آنها و اجرای اقدامات کاهش موثر ضروری است. اساسا بدون در نظر گرفتن نقش کمومتریکس روش های تجزیه ای به خودی خود نقش مهمی در شناسایی و شناسایی آلاینده ها ایفا می کنند و بینش های ارزشمندی را در مورد منابع، رفتار و خطرات احتمالی آلاینده های زیست محیطی ارائه می کنند. در این بخش تعدادی از مهمترین روش های تجزیه ای مورد استفاده برای تشخیص آلاینده های زیست محیطی را بررسی می کنیم که می توانند داده های ورودی روش های کمومتریکس را تامین نمایند. شکل ۲ شمایی از پرکاربردترین روشهای تجزیه ای به عنوان ورودی روش های کمومتریکس در تجزیه های زیست محیطی را نشان می دهد. در ادامه به بررسی این روش ها پرداخت می شود.



شکل ۲. پرکاربردترین روشهای تجزیه ای به عنوان ورودی روش های کمومتریکس در تجزیه های زیست محیطی

۴-۱- کروماتوگرافی گازی - طیف سنجی جرمی^۱ (GC-MS) برای تجزیه آلاینده های آلی

کروماتوگرافی گازی - طیف سنجی جرمی (GC-MS) به عنوان یک روش تحلیلی قدرتمند برای تشخیص و تعیین غلظت آلاینده های آلی در نمونه های محیطی بسیار پرکاربرد است. GC مخلوط های پیچیده ترکیبات آلی را بر اساس فراریت و میل ترکیبی آنها به فاز ساکن جدا می کند، در حالی که آشکار ساز MS شناسایی ترکیبات مجزا را با تجزیه و تحلیل طیف جرمی آنها امکان پذیر می کند [۶۵].

مطالعات مختلفی کاربرد گسترده GC-MS در تجزیه و تحلیل آلاینده های محیطی، به ویژه برای ترکیبات آلی فرار (VOCs)، هیدروکربن های آروماتیک چند حلقه ای (PAHs) و آفت کش ها را نشان داده اند [۶۵،۶۶]. در جدول ۱ تعدادی از مطالعات، که با استفاده از روش GC-MS و سایر روش های دستگاهی و با به کارگیری روش های کمومتریکس به اندازه گیری آفت کش ها پرداخته اند، آورده شده است. حساسیت بالا، گزینش پذیری و قابلیت تجزیه طیف گسترده ای از آلاینده های آلی، GC-MS را به ابزاری همه کاره برای پایش های زیست محیطی، ارزیابی ریسک و انطباق با مقررات تبدیل کرده است.

۴-۲- کروماتوگرافی مایع - طیف سنجی جرمی (LC-MS) برای تجزیه آلاینده های قطبی

کروماتوگرافی مایع-طیف سنجی جرمی (LC-MS) برای تجزیه آلاینده های قطبی و نیمه قطبی در ماتریس های زیست محیطی اهمیت پیدا کرده است [۷۹]. LC ترکیبات را بر اساس تمایل آنها به فازهای متحرک و ثابت جدا می کند، در حالی که MS اطلاعات ساختاری را از طریق تجزیه و تحلیل جرم ارائه می دهد. تحقیقات متعدد استفاده گسترده از LC-MS در تشخیص داروها، محصولات مراقبت شخصی و آلاینده های نوظهور در نمونه های آب و خاک تاکید می کند [۷۵]. توانایی LC-MS برای مدیریت ترکیبات قطبی و قابل یونیزه شدن، همراه با حساسیت و وضوح بالای آن، این روش دستگاهی تلفیقی را برای غربالگری جامع و تعیین مقدار طبقات مختلف آلاینده ها در نمونه های زیست محیطی ضروری می کند [۸۰].

۴-۳- طیف سنجی جذب اتمی (AAS) برای تجزیه و تحلیل آلاینده های فلزی

¹ Gas Chromatography-Mass Spectrometry

جدول ۱. کاربرد روشهای کمومتریکس در اندازه گیری آفت کش ها در نمونه های زیست محیطی

منابع	نمونه ها	روش دستگاهی	روش های آنالیز کمومتریکس	نام آفت کش
[۶۷]	آب رودخانه	پلاروگرافی جریان مستقیم و پالس تفاضلی	PLS, PCR, ANNs	کاپتان، کاتپتافول، فلیت
[۶۸]	نمونه آب شیر، دریاچه و برکه	سپتیک / اسپکتروفتومتری	PLS, PCR, RBF-ANNs	کارباریل، فوکسیم
[۶۹]	خاک	اسپکتروسکوپی مادون قرمز نزدیک	PLS	کلرودکون
[۷۰]	نمونه سبزیجات و آب	سپتیک / اسپکتروفتومتری	PLS, PCR, BNN	کارباریل
[۷۱]	رودخانه و فاضلاب	HPLC-DAD	GRAM, PARAFAC, MCR-ALS	اکسامیل، متومیل، رزورسینول فیل، ۴-نیتروفنول، ۲،۴-دی نیتروفنول
[۷۲]	فاضلاب و رسوبات	HPLC-DAD	MCR-ALS	متومیل، دی اتیل سیمازین، دی اتیل آترازین، کاربندازیم، کربوفوران، سیمازین، آترازین، آلاکلر، کلرپیریفوس-اکسون، تربوترین، کلرفن وینفوس، پیریمیفوس متیل، کلرپیریفوس
[۷۳]	فاضلاب و رسوبات	HPLC-MS	MCR-ALS	متومیل، دی اتیل سیمازین، دی اتیل آترازین، کاربندازیم، کربوفوران، سیمازین، آترازین، آلاکلر، کلرپیریفوس-اکسون، تربوترین، کلرفن وینفوس، پیریمیفوس متیل، کلرپیریفوس
[۷۴]	فاضلاب و رسوبات	HPLC-DAD-MS	MCR-ALS	آلاکلر، آترازین، کاربندازیم، کربوفوران، کلرفن وینفوس، کلرپیریفوس، کلرپیریفوس-اکسون، دی اتیل آترازین، دی اتیل سیمازین، متومیل، پیریمیفوس متیل، سیمازین، تربوترین
[۷۵]	صدف	HPLC-MS در مدهای تک یون و اسکن	MCR-ALS, calibration methods	آلاکلر، آترازین، کلرفنوفینفوس، پیریمیفوس متیل، تربوترین
[۷۶]	نمونه های مصنوعی	GC-MS	MCR-ALS, PARAFAC	بیفتترین، ترامترین
[۷۷]	نمونه های مصنوعی	سپتیک / روزنانس مغناطیسی هسته	MCR-ALS	متیل سولفورون و محصولات هیدرولیز
[۷۸]	آب دریا	اسپکتروسکوپی فلورسانس نشری تحریکی	MCR-ALS	تری فیل تین

می کند که به ارزیابی ریسک و تلاش های انطباق با مقررات کمک می کند [۸۳].

۴-۴- طیف سنجی فلورسانس اشعه ایکس (XRF) برای تجزیه و تحلیل آلاینده های عنصری

طیف سنجی فلورسانس اشعه ایکس (XRF) به عنوان یک روش ارزشمند برای آنالیز عنصری آلاینده ها در نمونه های مختلف محیطی ظاهر شده است [۸۳]. XRF پرتوهای ایکس مشخصی را که از عناصر ساطع می شود در هنگام تحریک فوتون های پراثری اندازه گیری می کند و امکان تعیین سریع و غیر مخرب ترکیب عنصر را فراهم می کند [۸۴].

طیف سنجی جذب اتمی (AAS) یک روش پایه برای تجزیه و تحلیل آلاینده های فلزی در نمونه های زیست محیطی است. AAS جذب نور توسط اتم های آزاد در فاز گاز را اندازه گیری می کند و اطلاعات کمی در مورد غلظت فلزات خاص در یک نمونه ارائه می دهد [۸۱].

تحقیقات زیادی بر کاربرد گسترده AAS و نیز نشر اتمی در تشخیص فلزات سنگین مانند سرب، کادمیوم و جیوه در آب، خاک و موجودات زنده تاکید می کند [۸۲]. حساسیت بالا، سادگی و مقرون به صرفه بودن AAS، آن را به ابزاری ضروری برای پایش آلاینده های فلزی در سیستم های زیست محیطی تبدیل

مطالعات زیادی در حوزه کاربرد XRF در تجزیه و تحلیل آلاینده های عنصری مانند فلزات سنگین، متالوئیدها و عناصر خاکی کمیاب در خاک، رسوبات و ذرات هوا انجام شده است که اهمیت این روش دستگاهی را در اندازه گیری های زیست محیطی نشان می دهد [۸۵]. ماهیت غیر مخرب، سرعت بالای تجزیه و تحلیل و قابلیت چند عنصری، XRF را به ابزاری ضروری برای غربالگری آلاینده های عنصری و نقشه برداری فضایی در مطالعات زیست محیطی تبدیل کرده است [۸۶، ۸۷].

۴-۵- طیف سنجی جرمی پلاسما جفت شده القایی (ICP-MS) برای آنالیز چند عنصری

طیف سنجی جرمی پلاسما جفت شده القایی (ICP-MS) تجزیه چند عنصری آلاینده ها را در بافت های مختلف محیطی متحول کرده است [۸۸]. ICP پلاسما را در دماهای بالا تولید می کند تا عناصر را اتمی و یونیزه کند که سپس با طیف سنجی جرمی با حساسیت و دقت استثنایی کمی سازی می شود.

تحقیقات مختلفی منتشر شده است که بر استفاده گسترده از ICP-MS برای تشخیص عناصر کمیاب، فلزات سنگین و متالوئیدها (شبه فلزات) در آب، خاک، رسوبات و نمونه های بیولوژیکی تاکید می کند [۸۹-۹۱]. حد تشخیص فوق العاده، قابلیت اندازه گیری چند عنصری و محدوده غلظتی گسترده ICP-MS آن را به ابزاری توانمند و ضروری برای تجزیه جامع در پایش ها و تحقیقات زیست محیطی تبدیل می کند [۸۹].

۴-۶- سنجش ایمنوسوربنت متصل به آنزیم (ELISA) برای تشخیص آلاینده های بیوشیمیایی

سنجش ایمنوسوربنت متصل به آنزیم (ELISA) به عنوان یک روش همه کاره برای تشخیص آلاینده های بیوشیمیایی مانند آفت کش ها، هورمون ها و سموم در نمونه های محیطی پدیدار شده است [۹۲]. این روش از آنتی بادی های اختصاصی برای جذب انتخابی آنالیت های هدف و به دنبال آن تشخیص آنزیمی برای تجزیه کمی استفاده می کند.

با بررسی متون می توان کاربرد گسترده ELISA را در پایش زیست محیطی باقیمانده آفت کش ها، مواد شیمیایی مختل

کننده غدد درون ریز و سموم جلبکی مضر در نمونه های آب، خاک و مواد غذایی مشاهده کرد [۹۳-۹۵]. ویژگی 'بالا، سرعت و مقرون به صرفه بودن ELISA، آن را به ابزاری ارزشمند برای غربالگری هدفمند آلاینده های بیوشیمیایی با پیامدهای بالقوه اکولوژیکی و سلامت انسان تبدیل کرده است.

۴-۷- طیف سنجی جرمی با وضوح بالا (HRMS) برای غربالگری آلاینده های غیر هدفمند

طیف سنجی جرمی با وضوح بالا (HRMS)، در غربالگری غیر هدفمند آلاینده های پیچیده در نمونه های محیطی پیشرفت های زیادی را ایجاد کرده است [۹۶، ۹۷]. روش HRMS اندازه گیری دقیق جرم یون ها را با قدرت تفکیک بالا فراهم می کند و امکان تشخیص و شناسایی آلاینده های ناشناخته و محصولات تبدیل را فراهم می کند.

مطالعات متعددی نیز پتانسیل HRMS را در ارتباط با رویکردهای داده کاوی کمومتریکیس برای غربالگری جامع آلاینده های نوظهور در نمونه های آب، هوا و موجودات زنده نشان می دهد [۹۸-۱۰۰]. گزینش پذیری، حساسیت و توانایی بالا برای توضیح فرمول های مولکولی، HRMS را به ابزاری قدرتمند برای شناسایی آلاینده های جدید و ردیابی وقوع آنها در سیستم های محیطی تبدیل می کند [۱۰۱].

۴-۸- فناوری های نوظهور: دستگاه های میکروسیال و نانوحسگرها برای پایش در محل

فناوری های نوظهور مانند دستگاه های میکروسیال و نانوحسگرها، نوید زیادی برای پایش آلاینده های محیطی در محل دارند [۱۰۲، ۱۰۳]. دستگاه های میکروسیال پردازش و تجزیه نمونه های کوچک را با کاهش مصرف معرف و زمان آنالیز سریع امکان پذیر می کنند [۱۰۴].

تحقیقات مختلف، پتانسیل دستگاه های میکروسیال را برای پایش در زمان واقعی آلاینده ها در نمونه های آب، هوا و خاک، در مکان های دورافتاده یا منابع نقطه ای را نشان داده اند [۱۰۵، ۱۰۶]. نانوحسگرهای مبتنی بر نانومواد قابلیت های تشخیص فوق

^۱ Specificity

حساس را برای آلاینده‌های خاص از طریق عملکرد سطح و مکانیسم‌های انتقال سیگنال ارائه می‌کنند [۱۰۳].

به عنوان جمع بندی این بخش می توان گفت آرایه متنوعی از روش‌های تجزیه ای نقش اساسی در تشخیص آلاینده‌های زیست محیطی در بافت ها و کلاس‌های مختلف آلاینده ایفا می‌کند. از روش‌های سنتی مانند GC-MS و AAS گرفته تا فناوری‌های پیشرفته مانند HRMS و نانوحسگرها، بر گستردگی رویکردهای موجود برای تجزیه جامع آلاینده‌ها تاکید دارد. از آنجا که پایش های زیست محیطی با چالش‌های نوظهور و پیشرفت‌های فناوری به تکامل خود ادامه می‌دهد، ادغام این روش‌های تجزیه ای برای درک سرنوشت، انتقال و تأثیر آلاینده‌ها بر زیست بوم ها و سلامت انسان نقش مهم و حیاتی خواهد داشت.

۵- چشم اندازه‌ها و چالش های آینده در کاربرد کمومتریکس

۵-۱- ادغام تجزیه داده های بزرگ و یادگیری ماشین

آینده کمومتریکس در پایش های زیست محیطی، در ادغام تجزیه داده های بزرگ و الگوریتم های یادگیری ماشین نهفته است. با گسترش آرایه های حسگر، بستر سنجش از راه دور و ابزارهای تحلیلی با توان عملیاتی بالا، حجم عظیمی از داده های چند بعدی تولید می شود [۱۰۷، ۱۰۸]. یکی از مباحث مهم در این موضوع همان ادغام تجزیه داده‌های بزرگ و یادگیری ماشین است که چالش‌هایی را در رابطه با کیفیت داده، قابلیت تفسیر مدل و منابع محاسباتی ایجاد می‌کند [۱۰۸]. بنابراین می توان گفت که اطمینان از قابلیت اعتماد و نمایندگی مجموعه داده های زیست محیطی در مقیاس بزرگ و همچنین توسعه مدل های یادگیری ماشینی شفاف و قابل تفسیر، برای به دست آوردن بینش عملی از داده های بزرگ در کمومتریکس زیست محیطی ضروری است [۱۰۸].

۵-۲- پیشرفت در تصویربرداری فراطیفی و طیف

سنجی

تصویربرداری و طیف‌سنجی فراطیفی با ارائه اطلاعات فضایی و طیفی دقیق در مورد آلاینده‌ها در ماتریس‌های مختلف، یکی از زمینه های تحقیقاتی است که می تواند در آینده پایش های زیست محیطی نقش متحول کننده داشته باشد [۱۰۹]. کاربرد آتی کمومتریکس در تجزیه و تحلیل داده های فراطیفی فرصت های بی سابقه ای را برای نقشه برداری توزیع فضایی، شناسایی نقاط داغ آلاینده و مشخص کردن مخلوط های پیچیده آلاینده ها ارائه می دهد [۱۱۰]. تحقیقات مختلف، پتانسیل روش‌های کمومتریکس مانند تفکیک منحنی چند متغیره، عدم اختلاط طیفی و انتخاب ویژگی را برای استخراج اطلاعات مرتبط از مجموعه داده‌های فراطیفی در مطالعات تجزیه ای برجسته می‌کنند [۱۱۰] که می توانند در آینده مطالعات زیست محیطی بسیار کمک کننده باشند.

چالش موجود در این موضوع آن است که استفاده موثر از داده های فراطیفی در کمومتریکس زیست محیطی مستلزم پرداختن به دشواری ها و پیچیدگی های مربوط به پیش پردازش داده ها، کاهش ابعاد و تنوع طیفی است [۱۱۱]. توسعه ابزارهای کمومتریکس قوی برای مدیریت مجموعه داده های فراطیفی با ابعاد بالا و استخراج اطلاعات معنی دار از سیستم های پیچیده زیست محیطی برای تحقق پتانسیل کامل تصویربرداری فراطیفی و طیف سنجی ضروری خواهد بود.

۵-۳- روندهای نوظهور در همجوشی حسگر^۱ و تجزیه چند وجهی^۲

آینده کمومتریکس زیست محیطی شاهد تغییری به سمت همجوشی حسگرها و تجزیه چندوجهی خواهد بود که داده ها را از حسگرهای مختلف و روش های تجزیه ای برای افزایش جامعیت پایش آلاینده ها یکپارچه می کند [۱۱۲]. روش‌های همجوشی حسگر ترکیبی از اطلاعات انواع حسگرهای مختلف، مانند حسگرهای نوری، الکتروشیمیایی و مبتنی بر جرم را برای دستیابی به درک جامع‌تری از آلاینده‌های زیست محیطی امکان پذیر می‌سازد.

¹ Sensor Fusion

² Multi-Modal Analysis

که شامل پیش پردازش داده ها، کالیبراسیون، اعتبارسنجی مدل، استفاده از روش های آماری قوی، ادغام با ابزار دقیق پیشرفته و پرداختن به روابط غیرخطی است. بررسی متون مرتبط با موضوع تأثیر قابل توجه کموتریکس بر بهبود کیفیت داده ها، کاهش عدم قطعیت ها و ارائه بینش قابل اعتماد در مورد مقادیر و منابع آلاینده را برجسته می کند. از آنجایی که برنامه های پیش زیست محیطی به تولید مجموعه داده های چند متغیره پیچیده ادامه می دهند، استفاده از کموتریکس برای اطمینان از ارزیابی دقیق و صحیح آلاینده های زیست محیطی ضرورت خواهد داشت.

روش های کموتریکس نوآورانه، تجزیه و تحلیل آلاینده های پیچیده در نمونه های محیطی را با پرداختن به چالش های مربوط به تفکیک سیگنال های دارای همپوشانی تجزیه ای، تجزیه جامع با استفاده از روش های دستگاهی تلفیقی، غربالگری غیرهدفمند با طیفسنجی جرمی با وضوح بالا و مدل سازی پیش بینی کننده با استفاده از یادگیری ماشین، به طور قابل توجهی پیشرفت داده اند. رویکردهای مبتنی بر مقالات منتشر شده بر تأثیر اساسی این روش های کموتریکس نوآورانه در افزایش دقت، صحت و قابلیت اطمینان در تجزیه آلاینده تأکید می کنند. از آنجایی که پیش های زیست محیطی همچنان با مخلوط های آلاینده پیچیده تر مواجه می شود، استفاده از این رویکردهای کموتریکس پیشرفته برای به دست آوردن بینش جامع در مورد سرنوشت و رفتار آلاینده ها در سیستم های زیست محیطی دارای اهمیت خواهد بود.

روش های مختلفی از کموتریکس در اندازه گیری آلاینده های زیست محیطی مورد استفاده قرار گرفته اند که روش های کالیبراسیون چند متغیره همچون PLS و PCR و نیز روش های تحلیل نمودار به ویژه MCR-ALS از جمله پر کاربردترین آنها هستند. هر چند روش های کالیبراسیون و طبقه بندی غیر خطی همچون شبکه عصبی مصنوعی نیز در اندازه گیری آلاینده های زیست محیطی استفاده شده اند. همچنین روش های کالیبراسیون چند بعدی همچون PARAFAC نیز مزایای بسیاری در تحلیل داده های مربوط به پیش های زیست محیطی را نشان داده است. به نظر می رسد روش های کموتریکس با توجه به مزایا و توانمندی ها می توانند در آینده اقبال بیشتری در بین محققان حوزه اندازه گیری آلاینده ها و پیش های زیست محیطی داشته

تحقیقات مختلف منتشر شده، توانایی رویکردهای کموتریکس را برای یکپارچه سازی داده های حسگر چندوجهی نشان می دهد. این روش، امکان پایش بلادرنگ آلاینده ها را با حساسیت، انتخاب پذیری و پوشش فضایی افزایش می دهد [۱۱۲]. ادغام ترکیب حسگر و تجزیه و تحلیل چند وجهی چالش هایی را در رابطه با یکپارچه سازی داده ها، انتقال کالیبراسیون و مقایسه بین پلتفرمی ارائه می کند. توسعه چارچوب های کموتریکس قوی برای هماهنگ کردن داده ها از حسگرهای متفاوت و همچنین پرداختن به مسائل مربوط به رانش حسگر، هماهنگ سازی کالیبراسیون و عدم قطعیت همجوشی حسگر، برای پیشبرد کاربرد تجزیه چندوجهی در کموتریکس زیست محیطی حیاتی خواهد بود.

۵-۴- ادغام اندازه گیری عدم قطعیت و ارزیابی ریسک

کاربرد آتی کموتریکس در پایش زیست محیطی به طور فزاینده ای بر ترکیب چارچوب های اندازه گیری عدم قطعیت و ارزیابی ریسک در تجزیه و تحلیل آلاینده ها متمرکز خواهد شد. روش های اندازه گیری یا کمی سازی عدم قطعیت، تخمین عدم قطعیت های اندازه گیری، خطاهای مدل و تنوع در داده های محیطی را امکان پذیر می کنند و درک جامع تری از قابلیت اطمینان و استحکام نتایج تجزیه ای ارائه می دهند.

ادغام کمی سازی عدم قطعیت و ارزیابی ریسک در کموتریکس زیست محیطی چالش هایی را در رابطه با اعتبارسنجی مدل، انتشار عدم قطعیت و تصمیم گیری در شرایط عدم قطعیت ایجاد می کند. توسعه روش های استاندارد شده برای کمی سازی و برقراری ارتباط عدم قطعیت ها در مدل های زیست محیطی و همچنین ادغام سیستم های پشتیبانی تصمیم آگاه از عدم قطعیت در شیوه های پایش زیست محیطی، برای پرداختن به چالش های نوظهور در ارزیابی ریسک ضروری خواهد بود.

۶- نتیجه گیری

تأکید می گردد که نقش کموتریکس در افزایش دقت و صحت در تجزیه آلاینده های زیست محیطی یک نقش چند وجهی است

7. R. Nigar, S. Zhao, X. Liu, H. Huang, L. Tian, Y. Xiao, A. Habib, and G. Zhang, *Emerg. Contam.* 10, 100356 (2024).
8. A. K. Sharma, M. Sharma, A. K. Sharma, M. Sharma, and M. Sharma, *J. Geochemical Explor.* 255, 107325 (2023).
9. A. Zappi, V. Marassi, S. Giordani, N. Kassouf, B. Roda, A. Zattoni, P. Reschiglian, and D. Melucci, *Chemosensors* 11, 45 (2023).
10. S. Yousefinejad and B. Hemmateenejad, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 149, (2015).
11. A. G. Usman, N. Usanase, S. I. Abba, I. Ozsahin, B. Uzun, M. A. Yassin, S. M. Rahman, and D. U. Ozsahin, *Sustain. Chem. Environ.* 2, 100011 (2023).
12. B. Lavine and J. Workman, *Anal. Chem.* 80, 4519 (2008).
13. M. M. R. Mostert, G. A. Ayoko, and S. Kokot, *TrAC Trends Anal. Chem.* 29, 430 (2010).
14. S. Mas, A. de Juan, R. Tauler, A. C. Olivieri, and G. M. Escandar, *Talanta* 80, 1052 (2010).
15. S. P. J. van Leeuwen and J. de Boer, *J. Chromatogr. A* 1186, 161 (2008).
16. M. Gros, M. Petrović, and D. Barceló, *Talanta* 70, 678 (2006).
17. H.-P. Wang, P. Chen, J.-W. Dai, D. Liu, J.-Y. Li, Y.-P. Xu, and X.-L. Chu, *TrAC Trends Anal. Chem.* 153, 116648 (2022).
18. D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, L.M.C. Buydens, S. de Jong, P.J. Lewi, J.S. Verbeke, *Handbook of Chemometrics and Qualimetrics*, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1997, Parts A and B. (1997).

باشد و به واسطه بکارگیری آنها اطلاعات مفید بیشتری از حجم انبوده داده‌های دستگاهی در زمینه‌های مختلفی از جمله الکتروشیمی، اسپکتروسکوپی و کروماتوگرافی استخراج نماید.

چشم‌اندازها و چالش‌های آینده در کاربرد کمومتریکس، پتانسیل زیادی برای پیشبرد پایش زیست‌محیطی و تجزیه آلاینده‌ها دارد. از ادغام تجزیه داده‌های بزرگ و یادگیری ماشین گرفته تا پیشرفت‌ها در تصویربرداری فراطیفی، همجواری حسگر و کمی‌سازی عدم قطعیت، اطلاعات موجود در متون علمی بر وسعت روندهای نوظهور و رویکردهای نوآورانه در کمومتریکس زیست‌محیطی تأکید می‌کند. همانطور که فناوری به تکامل خود ادامه می‌دهد و چالش‌های جدید ایجاد می‌شود، پرداختن به چالش‌های شناسایی‌شده برای استفاده از پتانسیل کامل کمومتریکس در رسیدگی به مسائل پیچیده زیست‌محیطی و تضمین مدیریت پایدار منابع طبیعی، حیاتی خواهد بود.

مراجع

1. S. Yuan, Y. Li, F. Bao, H. Xu, Y. Yang, Q. Yan, S. Zhong, H. Yin, J. Xu, Z. Huang, and J. Lin, *Sci. Total Environ.* 858, 159741 (2023).
2. F. Dehghani, S. Yousefinejad, D. I. D. I. Walker, and F. Omidi, *Metabolomics* 18, 73 (2022).
3. M. A. Mallah, L. Changxing, M. A. Mallah, S. Noreen, Y. Liu, M. Saeed, H. Xi, B. Ahmed, F. Feng, A. A. Mirjat, W. Wang, A. Jabar, M. Naveed, J.-H. Li, and Q. Zhang, *Chemosphere* 296, 133948 (2022).
4. H. Kang, S. Sung, J. Hong, S. Jung, T. Hong, H. S. Park, and D.-E. Lee, *J. Hazard. Mater.* 402, 123483 (2021).
5. Z. Idrees and L. Zheng, *J. Ind. Inf. Integr.* 17, 100123 (2020).
6. M. Thakur and D. Pathania, in *Abat. Environ. Pollut.* (Elsevier, 2020), pp. 245–262.

- Vethamony, Crit. Rev. Environ. Sci. Technol. 51, 2681 (2021).
32. S. Tajik, H. Beitollahi, F. G. Nejad, Z. Dourandish, M. A. Khalilzadeh, H. W. Jang, R. A. Venditti, R. S. Varma, and M. Shokouhimehr, Ind. Eng. Chem. Res. 60, 1112 (2021).
33. T. S. Bos, W. C. Knol, S. R. A. Molenaar, L. E. Niezen, P. J. Schoenmakers, G. W. Somsen, and B. W. J. Pirok, J. Sep. Sci. 43, 1678 (2020).
34. A. Gredilla, S. Fdez-Ortiz de Vallejuelo, N. Elejoste, A. de Diego, and J. M. Madariaga, TrAC Trends Anal. Chem. 76, 30 (2016).
35. M. Tarapoulouzi, V. Ortone, and S. Cinti, Talanta 244, 123410 (2022).
36. B. Igne and C. R. Hurburgh, J. Chemom. 24, 75 (2010).
37. P. Mishra, A. Biancolillo, J. M. Roger, F. Marini, and D. N. Rutledge, TrAC Trends Anal. Chem. 132, 116045 (2020).
38. L. Shao, X. Lin, and X. Shao, Appl. Spectrosc. Rev. 37, 429 (2002).
39. A. Craig, O. Cloarec, E. Holmes, J. K. Nicholson, and J. C. Lindon, Anal. Chem. 78, 2262 (2006).
40. R. A. van den Berg, H. C. Hoefsloot, J. A. Westerhuis, A. K. Smilde, and M. J. van der Werf, BMC Genomics 7, 142 (2006).
41. R. Bro and A. K. Smilde, J. Chemom. 17, 16 (2003).
42. P. A. Aguilera, A. G. Frenich, H. Castro, and J. L. M. Vidal, Environ. Monit. Assess. 62, 193 (2000).
19. J. A. Arancibia, P. C. Damiani, G. A. Ibañez, and A. C. Olivieri, J. AOAC Int. 97, 39 (2014).
20. K. S. Booksh and B. R. Kowalski, Anal. Chem. 66, 782A (1994).
21. G. M. Escandar, A. C. Olivieri, N. (Klaas) M. Faber, H. C. Goicoechea, A. Muñoz de la Peña, and R. J. Poppi, TrAC Trends Anal. Chem. 26, 752 (2007).
22. A. C. Olivieri, Anal. Chem. 80, 5713 (2008).
23. R. Tauler, A. Smilde, and B. Kowalski, J. Chemom. 9, 31 (1995).
24. R. Bro, Chemom. Intell. Lab. Syst. 38, 149 (1997).
25. G. N. Piccirilli and G. M. Escandar, Analyst 131, 1012 (2006).
26. D. B. Gil, A. M. de la Peña, J. A. Arancibia, G. M. Escandar, and A. C. Olivieri, Anal. Chem. 78, 8051 (2006).
27. R. C. Henry, C. W. Lewis, P. K. Hopke, and H. J. Williamson, Atmos. Environ. 18, 1507 (1984).
28. J. Einax, H. Zwanziger, S. Geiss (Eds.), Chemometrics in Environmental Analysis, VCH, Weinheim, Germany, 1997. (n.d.).
29. D. C. Aydin, J. Zamudio Pineres, F. Al-Manji, H. Rijnaarts, and T. Grotenhuis, Anal. Methods 13, 1635 (2021).
30. L. Liu, Q. Wu, X. Miao, T. Fan, Z. Meng, X. Chen, and W. Zhu, Chemosphere 286, 131815 (2022).
31. S. Veerasingam, M. Ranjani, R. Venkatachalapathy, A. Bagaev, V. Mukhanov, D. Litvinyuk, M. Mugilarasan, K. Gurumoorthi, L. Gunganathan, V. M. Aboobacker, and P.

56. K. P. Singh, A. Malik, S. Sinha, and V. K. Singh, *Water. Air. Soil Pollut.* 185, 79 (2007).
57. R. D. JiJi, G. G. Andersson, and K. S. Booksh, *J. Chemom.* 14, 171 (2000).
58. K. Matta, T. Lefebvre, E. Vigneau, V. Cariou, P. Marchand, Y. Guitton, A.-L. Royer, S. Ploteau, B. Le Bizec, J.-P. Antignac, and G. Cano-Sancho, *Environ. Int.* 158, 106926 (2022).
59. A. T. Lebedev, D. M. Mazur, V. B. Artaev, and G. Y. Tikhonov, *Environ. Chem. Lett.* 18, 1753 (2020).
60. D. M. Mazur, E. A. Detenchuk, A. A. Sosnova, V. B. Artaev, and A. T. Lebedev, *Sci. Total Environ.* 761, 144506 (2021).
61. P. Plaza-Bolaños, N. M. Valera-Tarifa, and A. G. Frenich, in (2013), pp. 431–454.
62. X. Liu, D. Lu, A. Zhang, Q. Liu, and G. Jiang, *Environ. Sci. Technol.* 56, 2124 (2022).
63. N. Taoufik, W. Boumya, M. Achak, H. Chennouk, R. Dewil, and N. Barka, *Sci. Total Environ.* 807, 150554 (2022).
64. Y. Lyu, Q. Ju, F. Lv, J. Feng, X. Pang, and X. Li, *Environ. Pollut.* 306, 119420 (2022).
65. T. Portolés, E. Pitarch, F. J. López, J. V. Sancho, and F. Hernández, *J. Mass Spectrom.* 42, 1175 (2007).
66. F. Hernández, M. I. Cervera, T. Portolés, J. Beltrán, and E. Pitarch, *Anal. Methods* 5, 5875 (2013).
67. A. Guiberteau, T. Galeano, N. Mora, F. Salinas, J. M. Ortíz, and J. C. Viré, *Comput. Chem.* 25, 459 (2001).
43. S. Wold, P. Geladi, K. Esbensen, and J. Öhman, *J. Chemom.* 1, 41 (1987).
44. S. Wold, M. Sjöström, and L. Eriksson, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 58, 109 (2001).
45. R. G. Brereton, J. Jansen, J. Lopes, F. Marini, A. Pomerantsev, O. Rodionova, J. M. Roger, B. Walczak, and R. Tauler, *Anal. Bioanal. Chem.* 410, 6691 (2018).
46. S. Yousefinejad, F. Honarasa, F. Abbasitabar, and Z. Arianezhad, *J. Solution Chem.* 42, 1620 (2013).
47. Y. OUYANG, *Water Res.* 39, 2621 (2005).
48. N. Kumar, A. Bansal, G. S. Sarma, and R. K. Rawal, *Talanta* 123, 186 (2014).
49. M. D. Peris-Díaz and A. Krężel, *TrAC Trends Anal. Chem.* 135, 116157 (2021).
50. V. Yadav, A. K. Yadav, V. Singh, and T. Singh, *Results Eng.* 22, 102305 (2024).
51. W. Zheng, D. Tian, X. Wang, W. Tian, H. Zhang, S. Jiang, G. He, Y. Zheng, and W. Qu, *Toxicology* 313, 151 (2013).
52. J. F. Bobb, L. Valeri, B. Claus Henn, D. C. Christiani, R. O. Wright, M. Mazumdar, J. J. Godleski, and B. A. Coull, *Biostatistics* 16, 493 (2015).
53. A. de Juan and R. Tauler, *Anal. Chim. Acta* 1145, 59 (2021).
54. H. Parastar and R. Tauler, *Anal. Chem.* 86, 286 (2014).
55. M. Bayat, M. Marín-García, J. B. Ghasemi, and R. Tauler, *Anal. Chim. Acta* 1113, 52 (2020).

81. A. Inobeme, V. Nayak, T. J. Mathew, S. Okonkwo, L. Ekwoba, A. I. Ajai, E. Bernard, J. Inobeme, M. Mariam Agbugui, and K. R. Singh, *J. Environ. Manage.* 309, 114653 (2022).
82. É. F. Batista, A. dos S. Augusto, and E. R. Pereira-Filho, *Talanta* 150, 206 (2016).
83. M. Cocchi, G. Franchini, D. Manzini, M. Manfredini, A. Marchetti, and A. Ulrici, *J. Agric. Food Chem.* 52, 4047 (2004).
84. M. S. Shackley, in *X-Ray Fluoresc. Spectrom. Geoarchaeology* (Springer New York, New York, NY, 2011), pp. 7–44.
85. M. A. Stapanian, *J. Chemom.* 5, 121 (1991).
86. S. Aidene, M. Khaydukova, G. Pashkova, V. Chubarov, S. Savinov, V. Semenov, D. Kirsanov, and V. Panchuk, *Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc.* 185, 106310 (2021).
87. M. I. Kaniu, K. H. Angeyo, M. J. Mangala, A. K. Mwala, and S. K. Bartilol, *X-Ray Spectrom.* 40, 432 (2011).
88. H. Gramowska, I. Krzyzaniak, D. Baralkiewicz, and R. Goldyn, *Environ. Monit. Assess.* 160, 479 (2010).
89. E. G. Nasr, E. N. Epova, A. de Diego, R. Souissi, M. Hammami, H. Abderrazak, and O. F. X. Donard, *Foods* 11, 82 (2021).
90. E. Varhan Oral, Ö. Tokul-Ölmez, İ. Yener, M. Firat, Z. Tunay, P. Terzioğlu, F. Aydin, M. Öztürk, and A. Ertaş, *Anal. Lett.* 52, 320 (2019).
91. I. Komorowicz, H. Gramowska, and D. Baralkiewicz, *J. Environ. Sci. Heal. Part A* 45, 348 (2010).
68. Y. Ni, D. Cao, and S. Kokot, *Anal. Chim. Acta* 588, 131 (2007).
69. D. Brunet, T. Woignier, M. Lesueur-Jannoyer, R. Achard, L. Rangon, and B. G. Barthès, *Environ. Pollut.* 157, 3120 (2009).
70. Y. Ni, W. Xiao, and S. Kokot, *J. Hazard. Mater.* 168, 1239 (2009).
71. E. Comas, R. A. Gimeno, J. Ferré, R. M. Marcé, F. Borrull, and F. X. Rius, *J. Chromatogr. A* 1035, 195 (2004).
72. E. Peré-Trepat, A. Hildebrandt, D. Barceló, S. Lacorte, and R. Tauler, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 74, 293 (2004).
73. E. Peré-Trepat, S. Lacorte, and R. Tauler, *J. Chromatogr. A* 1096, 111 (2005).
74. E. Peré-Trepat and R. Tauler, *J. Chromatogr. A* 1131, 85 (2006).
75. E. Peré-Trepat, S. Lacorte, and R. Tauler, *Anal. Chim. Acta* 595, 228 (2007).
76. T. Khayamian, G. H. Tan, A. Sirhan, Y. F. Siew, and S. M. Sajjadi, *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 96, 149 (2009).
77. E. Bezemer and S. Rutan, *Anal. Chim. Acta* 459, 277 (2002).
78. J. Saurina, C. Leal, R. Compañó, M. Granados, R. Tauler, and M. D. Prat, *Anal. Chim. Acta* 409, 237 (2000).
79. R. Loos, G. Hanke, and S. J. Eisenreich, *J. Environ. Monit.* 5, 384 (2003).
80. I. S. Pérez, M. J. Culzoni, G. G. Siano, M. D. G. García, H. C. Goicoechea, and M. M. Galera, *Anal. Chem.* 81, 8335 (2009).

- Keçili, and C. M. Hussain, Trends Environ. Anal. Chem. 34, e00160 (2022).
103. A. E. D. Mahmoud and M. Fawzy, in (2021), pp. 229–246.
104. R. Pol, F. Céspedes, D. Gabriel, and M. Baeza, TrAC Trends Anal. Chem. 95, 62 (2017).
105. J. P. Lafleur, S. Senkbeil, T. G. Jensen, and J. P. Kutter, Lab Chip 12, 4651 (2012).
106. F. Zhang, W. Liu, S. Zhou, L. Jiang, K. Wang, Y. Wei, A. Liu, W. Wei, and S. Liu, Anal. Chem. 92, 7200 (2020).
107. R. Houhou and T. Bocklitz, Anal. Sci. Adv. 2, 128 (2021).
108. H. Parastar and R. Tauler, Angew. Chemie 134, (2022).
109. J. shan, J. Zhao, L. Liu, Y. Zhang, X. Wang, and F. Wu, Environ. Pollut. 238, 121 (2018).
110. V. Olmos, M. Marro, P. Loza-Alvarez, D. Raldúa, E. Prats, F. Padrós, B. Piña, R. Tauler, and A. de Juan, J. Biophotonics 11, (2018).
111. H. D. T. Jones, D. M. Haaland, M. B. Sinclair, D. K. Melgaard, M. H. Van Benthem, and M. C. Pedroso, J. Chemom. 22, 482 (2008).
112. A. M. Lines, G. B. Hall, S. Asmussen, J. Allred, S. Sinkov, F. Heller, N. Gallagher, G. J. Lumetta, and S. A. Bryan, ACS Sensors 5, 2467 (2020).
92. J. L. Zajicek, D. E. Tillitt, T. R. Schwartz, C. J. Schmitt, and R. O. Harrison, Chemosphere 40, 539 (2000).
93. J. K. Lee, K. C. Ahn, O. S. Park, S. Y. Kang, and B. D. Hammock, J. Agric. Food Chem. 49, 2159 (2001).
94. G. S. Nunes, I. A. Toscano, and D. Barceló, TrAC Trends Anal. Chem. 17, 79 (1998).
95. B. M. Brena, L. Arellano, C. Rufo, M. S. Last, J. Montaña, E. E. Cerni, G. Gonzalez-Sapienza, and J. A. Last, Environ. Sci. Technol. 39, 3896 (2005).
96. K. Anagnostopoulou, C. Nannou, V. G. Aschonitis, and D. A. Lambropoulou, Sci. Total Environ. 849, 157887 (2022).
97. E. L. Jamin, N. Bonvallot, M. Tremblay-Franco, J.-P. Cravedi, C. Chevrier, S. Cordier, and L. Debrauwer, Anal. Bioanal. Chem. 406, 1149 (2014).
98. W.-L. Chen, S.-Y. Yu, S.-Y. Liu, S.-C. Lin, and T.-H. Lee, Sci. Total Environ. 862, 160830 (2023).
99. L. L. Hohrenk, M. Vosough, and T. C. Schmidt, Anal. Chem. 91, 9213 (2019).
100. M. Pourchet, L. Debrauwer, J. Klanova, E. J. Price, A. Covaci, N. Caballero-Casero, H. Oberacher, M. Lamoree, A. Damont, F. Fenaille, J. Vlaanderen, J. Meijer, M. Krauss, D. Sarigiannis, R. Barouki, B. Le Bizec, and J.-P. Antignac, Environ. Int. 139, 105545 (2020).
101. S. Liesenfeld, P. Steliopoulos, and G. Hamscher, J. Agric. Food Chem. 68, 12493 (2020).
102. N. Pouyanfar, S. Z. Harofte, M. Soltani, S. Siavashy, E. Asadian, F. Ghorbani-Bidkorbeh, R.



Application of chemometrics methods in the monitoring of environmental pollutants

Leila Aalizadeh ¹, Mohammad Reza Baezat ¹, Saeed Yousefinejad ^{2,3*}

¹ Department of Chemistry, Payame Noor University, Tehran, Iran

² Research Center for Health Sciences, Institute of Health, Shiraz University of Medical Sciences, Shiraz, Iran

³ Department of Occupational Health Engineering, School of Health, Shiraz University of Medical Sciences, Shiraz, Iran

Abstract: Due to the importance of measurement and monitoring of environmental pollutants, the amount of exposure and the need to reduce environmental risks for humans and living organisms, the use of chemometrics in environmental studies has increased over the past two decades. These applications are designed to test and prove the power of dedicated data processing techniques and the availability of suitable software with broad applications in this field. In this review study, we have discussed aspects of the ability of chemometrics methods in gathering environmental data and measuring hazardous pollutants. Considering the advantages of multivariate methods and chemometrics, it is expected that it can be more effective in solving difficult problems and extracting useful information. As environmental monitoring continues to monitor complex pollutant mixtures, the use of advanced chemometrics approaches will be important to gain comprehensive insight into the following of the pollutants in environmental or biological systems. Future prospects and challenges in the application of chemometrics show the great potential of these methods to enhance environmental monitoring and pollutant analysis. Integration of big data, machine learning, advance hyperspectral imaging, sensor fusion, and uncertainty quantification can be considered as emerging and innovative approaches in environmental chemometrics.

Keywords: Multivariate methods, Organic compounds, Environmental pollutants, Monitoring, Pollution, Chemometrics