

Streszczenie

Autentyczność produktów w wielu przypadkach zależy od ich składu chemicznego. Dlatego też do analizy produktów pod kątem ich autentyczności wykorzystuje się sygnały instrumentalne, które zawierają duży zasób informacji na temat substancji zawartych w próbce i mogą być postrzegane jako chemiczne odciski palca. Tego typu sygnał jest definiowany jako charakterystyczny profil opisujący skład chemiczny analizowanej próbki najlepiej jak to możliwe. Wśród wielu technik instrumentalnych, podejścia chromatograficzne są bardzo dobrym narzędziem do rejestracji chemicznych odcisków palca ze względu na możliwość rozdzielenia składników mieszanin.

W ramach badań dotyczących analizy chromatograficznych odcisków palca opracowano z powodzeniem różnego rodzaju podejścia chemometryczne służące do weryfikacji autentyczności wybranych produktów (olej napędowy, Viagra[®]) oraz badania obecności tributyllocyny w próbkach środowiskowych. Przed przystąpieniem do analizy chemometrycznej zastosowano metody wstępnego przygotowania danych uzyskując poprawę jakości analizowanych sygnałów instrumentalnych. Następnie, zaproponowano modele diagnostyczne pozwalające przyporządkować badane próbki do rozważanych grup na podstawie chromatograficznych odcisków palca wykorzystując dyskryminacyjny wariant metody częściowych najmniejszych kwadratów, PLS-DA. Każdy model został poddany ocenie i opisany przez wybrane parametry walidacyjne charakteryzujące poprawność jego działania. Dodatkowo, w ramach prowadzonych badań zaproponowano nową procedurę konstrukcji i walidacji modeli diagnostycznych, która pozwala na jednoczesną estymację parametrów walidacyjnych modeli o różnej liczbie czynników dla zbioru modelowego i zbiorów testowych (wewnętrzny i zewnętrzny). Podejście to umożliwia uwzględnienie różnego rodzaju metod wyboru zmiennych istotnych na etapie budowy modelu PLS-DA, a tym samym wyznaczyć te zmienne (obszary chromatogramu), które są istotne dla rozróżniania analizowanych próbek. Ze względu na dobrą efektywność modeli diagnostycznych, opracowanych w celu weryfikacji autentyczności wybranych produktów i oceny zagrożenia biologicznego wynikającego z obecności substancji szkodliwych w próbkach środowiskowych, można wnioskować, że proponowane rozwiązania problemów badawczych z uwzględnieniem metod chemometrycznych mogą być z powodzeniem implementowane na potrzeby rutynowych analiz.