

Хүнсний луйврын шинжилгээний арга зүй

Найдвартай, баталгаатай шинжилгээний үр дүнд хүрэх зөвлөмжүүд

Хураангуй

Хүнсний луйврын дуулианууд нь олон нийтийн анхаарлын татаж, хууль дүрмийн хувьд өөрчлөлт хийх шаардлагыг бий болгодог гэдгийг харгалзан үзвэл, энэхүү өгүүллийн зорилго нь хуурамч хүнсэнд хэрэглэдэг шинжилгээ, туршилтын арга зүйг танилцуулж мөн олон хувьсагчийн статистик болон дээжийн ангилалын урьдчилсан таамаглалын аргуудыг танилцуулж байна. Молекулын спектроскопи зэрэг зарим аргууд нь харьцангуй хямд бөгөөд энэ төрлийн зарим багажийг талбайн нөхцөлд ашиглах боломжтой хэмжээнд хүртэл жижигрүүлсэн байдаг. Спектроскопийн багажууд нь хүнсний бүтээгдэхүүнийг “хурууны хээ” шиг ялган танихад тустай. Учир нь өгөгдлийг зохистой нормчлолын аргаар боловсруулсан тохиолдолд дээжийн спектрийн профайл дахь маш бага өөрчлөлтийг орчин үеийн технологиор илрүүлэх боломжтой.

Үүнтэй адил, нэг болон өндөр нягтаршилтай масс спектрометрийн (MS) аргуудыг хамтад нь ашиглах нь хуурамч хүнсний шинжилгээнд чухал ач холбогдолтой. Эдгээр аргууд нь илрүүлж буй онцгой химийн нэгдлүүдэд тулгуурлан хүнсний бүтээгдэхүүнийг ялган таних боломж олгодог. Харин индукцийн холбоост плазмын масс спектрометр (ICP/MS) болон индукцийн холбоост плазмын оптик цацруулалтын спектрометр (ICP/OES) зэрэг бусад аргууд нь ул мөр элементийн шинжилгээнд тулгуурлан гарал үүслийн газар зүйн мэдээллийг тогтоох чадвараараа үр дүнтэй нь батлагдсан. Генийн шинжилгээ нь боловсруулсан дээжээс ч загасны ДНХ-ийг өндөр нарийвчлалтай тодорхойлох боломжтой.

Арга зүйн үүднээс авч үзэхэд, зорилтот бус (nontargeted) дээжийг хурууны хээний зарчмаар ялган танихад үр дүнтэй болох нь нотлогдсон. Харьцангуй хямд компьютертэй холбогдсон төхөөрөмжүүд болон статистик программ хангамжууд бий болсноор зорилтот бус шинжилгээний ажлын урсгалыг олон хувьсагчийн статистик үр дүнтэй уялдуулан, аналитик өгөгдлөөс хэрэгцээтэй мэдээлэл гарган авах боломж бүрдсэн. Саяхныг хүртэл эдгээр аргууд нь судлаачид бие даан хэрэгжүүлэхэд хэт өндөр өртөгтэй эсвэл хэт төвөгтэй байсан тул өгөгдлийг тусгайлсан статистикчид шилжүүлэх, эсвэл бүрэн дүүрэн шинжилгээ хийлгүй орхих тохиолдол элбэг байв. Харин өнөөдөр харьцангуй боломжийн үнэ өртөгтэй хэрэгслүүд бий болж, судлаачид дээжийн чанар зэрэг шинж чанарыг тодорхойлох, мөн дээжийг ангилах урьдчилсан таамаглалын загваруудыг боловсруулахад статистик аргуудыг илүү хялбар ашиглах боломжтой болж байна.

Танилцуулга

Хүнсний найрлагыг хуурамчаар өөрчлөх нь яагаад чухал асуудал болохын тухайд, 2007 онд нохой, муурны хоолонд хордсон меламины дуулианыг та бүхэн санаж байгаа байх¹. Судалгаагаар нохой, муурын хоол нь меламина болон түүнтэй адил триазины бүлгийн нэгдлүүд (аммелид, аммелин, цианурын хүчил) хольцтой байсан нь тогтоогдсон. Эдгээр нь хямд өртөгтэй боловч азотын агууламж өндөр аж үйлдвэрийн химийн бодисууд бөгөөд хүнсэнд дэх азотын хэмжээг хиймлээр нэмэгдүүлж, уураг ихтэй мэт харагдуулах зорилгоор ашиглагдаж байсан²

Мэдлэг, ойлголт нэмэгдэхийн хэрээр хүнсэнд меламина хольж хүнсэнд хуурамч нэмэлтийг хийсэн нь маш богино хугацаанд олон улсын түвшинд хүртэл асуудлыг яригдахад хүргэсэн. Үүний дараа ийм төрлийн бодисыг АНУ-д үйлдвэрлэсэн хүүхдийн хуурай сүү, Канадад худалдан борлуулагдсан жигнэмэг, Ази болон Австралид худалдаалагдсан шоколад, Тайландад үйлдвэрлэсэн өтгөрүүлсэн сүү, мөн Хонконг дахь өндөгнөөс илэрсэн.

Энэ дуулианы үеэр Дэлхийн эрүүл мэндийн байгууллага (WHO), Хүнс, хөдөө аж ахуйн байгууллага (FAO), Европын хүнсний аюулгүй байдлын байгууллага (EFSA), Олон улсын хүнсний аюулгүй байдлын байгууллагуудын сүлжээ (INFOSAN) зэрэг олон улсын байгууллагууд хамтран ажиллаж, хямралыг тодорхойлж, хянах арга хэмжээ авсан.

Нийт 68 улс меламина агуулсан байж болзошгүй хүнсний бүтээгдэхүүнийг хориглох буюу эргүүлэн татсан бол олон улс орон меламины зөвшөөрөгдөх дээд хэмжээг тогтоосон. Үүнээс АНУ-ын Хүнс, эмийн захиргаа (FDA)-ын тогтоосноор хүүхдийн сүүнд 1 ppm (мг/кг), бусад бүтээгдэхүүнд 2.5 ppm хүртэл Үлдэгдлийн зөвшөөрөгдөх дээд хэмжээг (MRL) тодорхойлсон.

Мөн АНУ-ын Эм, хүнсний агентлагаас Эдийн засгийн шалтгаантай хуурамч бүтээгдхүүн гэдгийг судлах (Economically Motivated Adulteration, EMA) ажлын хэсэг байгуулсан. 2009 онд EMA буюу Эдийн засгийн шалтгаантай хуурамч бүтээгдхүүн гэдгийг бүтээгдэхүүний харагдах үнэ цэнийг нэмэгдүүлэх эсвэл үйлдвэрлэлийн зардлыг бууруулах (өөрөөр хэлбэл эдийн засгийн ашиг олох) зорилгоор бүтээгдэхүүнд бодисыг санаатайгаар орлуулах, нэмсэн байх залилангийн үйлдэл гэж тодорхойлсон.

Аюулгүй байдлын үндсэн асуудлуудаас гадна, хүнсний найрлагыг хуурамчаар өөрчлөх нь хэрэглэгчдийг хохироодгийг өндөр зэрэглэлийн буюу extra virgin чидун жимсний тос (EVOO)-ны жишээ харуулдаг. 2010 оны судалгаагаар тухайн үед АНУ-ын зах зээл дээрх EVOO-ийн 99%-ийг бүрдүүлж байсан импортын чидун тос нь EVOO ангиллын мэдрэхүйн шалгалтыг ихэнхдээ даваагүй болох нь тогтоогдсон. Одоогийн байдлаар мэргэжилтнүүд EVOO-ийн 80 хүртэлх хувь нь хуурамч шошготой байдаг гэж үзэж байна. EVOO болон бусад зэрэглэлийн чидун тосыг ялгах стандарт шинжилгээнүүдийг хийх нь харьцангуй энгийн байдаг. Тухайлбал, диацилглицерол эсвэл пиреофеофитин (хлорофиллын задралын бүтээгдэхүүн)-ийг HPLC аргаар хэмжих нь түгээмэл хэрэглэгддэг. Гэвч эдгээр шинжилгээнүүд нь хуурамч зэрэг болон хуурамч сөрөг үр дүн гаргах магадлалтай бөгөөд залилан үйлдэгчид өөр төрлийн холих тос ашиглан шалгалтыг давж чаддаг. Түүнчлэн амт, үнэрийн доголдоос шалтгаалан жинхэнэ EVOO ч мэдрэхүйн шалгалтанд тэнцэхгүй байх тохиолдол бий. Ялангуяа буруу хадгалсан тосонд хөгцөрсөн, муудсан, хүчиллэг болсон зэрэг асуудлууд гарч болно. Эдгээр асуудлыг илрүүлэхэд химийн шинжилгээ нь боломжтой шийдэл санал болгодог ба тодорхой маркер нэгдлүүд болох хүчил, эфир, альдегидуудын концентрацийг өндөр ppm-ээс бага ppm түвшинд тодорхойлох замаар үнэлж болно.



The Agilent 8890 GC system and Agilent 5977B GC/MSD.

Химичид хүнсний бүтээгдхүүн дэх хуурамч нэгдлийг найрлаганд илрүүлэх (EMA) илүү найдвартай аргуудыг эрэлхийлж байгаа энэ үед шинэ аналитик багаж, аргачлалуудыг судалж байна. Хамгийн чухал анхаарах асуудал нь таны шинжилгээний шаардлага болон төсөвт тохирсон зөв технологийг сонгож хэрэглэх явдал юм.

MS-д суурилсан хүнсний шинжилгээ

Бүтэн спектрийн (time-of-flight), сканнер хийх (квадруполь) болон дүрсжүүлэлт үүсгэх (Фурьегийн хувиргалт) масс спектрометрийн (MS) аргууд нь дээжийг ангилахад тохиромжтой хэрэгслүүд юм. Эдгээр нь үнийн хувьд харилцан адилгүй бөгөөд хямд ангилалд хий/масс спектрометр (GC/MS), илүү үнэтэй Фурьегийн хувиргалттай масс спектрометр (FTMS), мөн хамгийн өндөр үнэтэй боловч өндөр ач холбогдолтой шингэн фазын ионы хөдөлгөөнт квадраполь time-of-flight (IM/Q-TOF) багажууд орно.

Онцлог шинжийг илрүүлэх шинжилгээ

Мөн NIST-ээс 1990-ээд оны эхээр нийтэд нээлттэй болгосон AMDIS програм хангамжаас эхтэй, арилжааны болон шинжлэх ухааны судалгаанд зориулсан олон төрлийн онцгой шинжийг илрүүлэх арга хэрэгслэлүүд байдаг. EI (electron ionization буюу электрон ионжуулалт)-ийн пикүүдийг тааруулах болон өгөгдөл боловсруулахад тохиромжтой шинжлэх ухааны судалгаанд зориулсан шийдэлд AMDIS/ (гараар боловсруулалт хийх)/SpectConnect гэсэн хослол ордог. XCMS болон MZmine-ээс ялгаатай нь SpectConnect нь EI өгөгдөлд зориулан тусгайлан боловсруулагдсан байдаг. GC

(хийн хроматографи) нь Agilent, LECO, ZOEX зэрэг компаниудын худалдаанд гаргасан төрөл бүрийн шийдлүүдийн ачаар олон хэмжээст хроматографид (multidimensional chromatography) ашиглахад тохиромжтой. Эдгээр аргын давуу тал нь модуляц хийгдээгүй уламжлалт аргуудтай харьцуулахад ихэвчлэн дохио шуугианы харьцаа (S/N) өндөр байдаг явдал юм.

Харин сул тал нь тусгай зориулалтын тоног төхөөрөмж болон GC Image зэрэг компаниудын боловсруулсан пик задлан ялгах (peak deconvolution) програм хангамж шаарддагт оршино. Энэхүү програм нь дээжүүдийг дарааллаар нь шинжлэхэд сайн ажилладаг боловч зорилтот бус анализын үндэс суурь болох багц (batch) шинжилгээнд оновчтой биш юм.¹¹

Зорилтот бус (nontargeted) шинжилгээний ажлын урсгал

Зорилтот бус шинжилгээний ажлын урсгал нь давтагдах боломжтой, найдвартай онцлог шинжийг илрүүлэх програм хангамжид тулгуурладаг бөгөөд хамгийн төгс тохиолдолд рекурсив (давталтат) алгоритм дээр суурилсан байдаг. Рекурсив шинжийн илрүүлэлт нь хуурамч зэрэг болон хуурамч сөрөг үр дүнг аль алийг нь багасгах зорилготой. Үүнийг хэрэгжүүлэхдээ шуугиан гэж үзсэн ионуудыг хасах, барих хугацааг (retention time) уялдуулах, масс утгуудыг тааруулах, мөн ионуудыг бүлэглэх (ion binning) замаар нэгдсэн лавлах сан (consensus library)-г бүрдүүлдэг. Энэхүү лавлах сан нь нийлмэл шинж чанаруудын жагсаалт болон тэдгээрт харгалзах нийлмэл спектрүүдээс бүрдэнэ. Дараа нь алгоритм энэ лавлахыг ашиглан ион тус бүрийг дахин шалгадаг бөгөөд ингэснээр хуурамч зэрэгийн тоо буурдаг. Шалгадаагүй үлдсэн нэгдлүүдийг нь дараагийн шатанд зорилтот хайлтад ашиглана. Энэ үйл явц нь өгөгдөл дутуу байдлаас үүсэх хуурамч сөрөг үр дүнг багасгахад тусалдаг бөгөөд шалгуурыг илүү сулруулж хэрэглэн зорилтот жагсаалтыг дахин шалгадаг.

Давтан шалгаснаар үр дүнгийн чанарыг нийтэд нь сайжруулахад

зориулагдсан. Аль ч алгоритм төгс биш тул багцын хэмжээнд (batch-wise) рекурсив боловсруулалт хийсний дараа үр дүнг гараар засварлах боломжтой байх шаардлагатай. XCMS нь The Scripps Research Institute-ээс боловсруулсан, жижиг молекулын зорилтот бус шинжилгээнд зориулсан онлайн нээлттэй платформ бөгөөд дутуу пикүүдийн өгөгдлийг илрүүлэх ижил төстэй ажлын урсгалд ашигладаг. Химийн нэгдлүүдийн илрүүлэлтийн өгөгдлийг хянаж, интеграцийн алдааг зассаны дараа өгөгдлийг текст файл хэлбэрээр экспортолж болно. Хэрэв пик илрээгүй бол тухайн утгыг байхгүй байна гэж үзнэ. Статистикийн програм хангамжид эдгээр байхгүй байгаа утгуудыг 0 концентраци гэж үзэх эсвэл илрээгүй пик гэж тэмдэглэх сонголт байдаг. Нойл утга гэж үзэх нь статистикийн үр дүнд ихээхэн нөлөөлдөг тул зөвхөн өгөгдлийг сайтар шалгаж, тухайн пик үнэхээр байхгүй гэдэг нь батлагдсан тохиолдолд энэ сонголтыг ашиглах хэрэгтэй. Харин өгөгдлийг бүрэн шалгаагүй, дутуу утга нь хуурамч сөрөг байж болзошгүй бол “дутуу утга” гэсэн сонголтыг хийх нь зүйтэй.

Зорилтот ба зорилтот бус аргууд

Зорилтот болон зорилтот бус хемометрикийн аргуудыг хослуулан хэрэглэх нь дээжийг үнэлэхэд үр дүнтэй шийдэл болдог. Энэ нь байж болох химийн нэгдлүүдийг нарийвчлалтай тодорхойлохын зэрэгцээ урьдчилан таамаглаагүй нэгдлүүдийг илрүүлэх боломжийг олгодог.

Энэхүү хандлагын сайн жишээ бол Hjelmeland болон түүний хамтрагчдын хийсэн судалгаа бөгөөд тэд HS-SPME аргыг ашиглан Cabernet Sauvignon дарсны химийн болон мэдрэхүйн шинж чанарыг үнэлсэн. Судалгаанд нэгэн зэрэг SIM/Scan ашиглан зорилтот бус ажлын урсгал дээр суурилсан зорилтот шинжилгээг харуулсан байна. Зорилтот бус бүрэлдэхүүн оруулснаар дараа нь буцаж дүн шинжилгээ хийх боломж бүрддэг.

Basmati болон Jasmine зэрэг анхилуун үнэртэй будаанд fgr генийн үйл ажиллагаа алдагдсанаас шалтгаалан 2-ацил-1-пирролин нэгдлийн агууламж өндөр байдаг. ДНХ шинжилгээгээр мутацид орсон генийг илрүүлэх боломжтой боловч будаанд липидийн исэлдэлтэй холбоотой гексаналь (hexanal) зэрэг бусад чухал дэгдэмхий нэгдлүүд мөн агуулагддаг. Эдгээр дэгдэмхий бүрэлдэхүүнүүдийг хроматографийн аргаар харьцангуй амархан ялгаж болох бөгөөд мэдрэхүйн шинж чанарыг үнэлэхээс гадна будааны хуурамч байдлыг илрүүлэх үзүүлэлтүүдийг тодорхойлоход ашиглаж болно. Мөн headspace solid-phase microextraction (HS-SPME) буюу хатуу фазын микрохандлалтын аргыг



нэвтрүүлснээр дээж бэлтгэлийн ихэнх үйл явцыг хялбаршуулдаг.

The Agilent 1290 Infinity II LC system with an Agilent 6546 LC/Q-TOF.

Үр дүнгийн тогтвортой байдлыг хадгалах

Давтагдах боломжтой урьдчилан таамаглах загваруудыг бий болгохын тулд MS-д суурилсан ЕМА буюу эдийн засгийн зорилгоор хуурамч нэмэлтүүдийг илрүүлэх аргууд нь бүх боломжит маркеруудыг ашиглахаас илүү найдвартай, тогтвортой маркеруудыг илрүүлэхэд анхаарах хэрэгтэй. Үүний жишээ нь LC/Q-TOF төхөөрөмжийг бүтэн спектрийн горимд ашиглан мангогийн сортуудыг ялган таних боломжийг харуулсан судалгаа юм. Энэ арга нь шинэ үеийн программ хангамжийг ашиглан найдвартай ангилагч (classifier)-уудыг тодорхойлж, ангиллын урьдчилан таамаглах загваруудыг бий болгодог. Хамгийн сүүлийн үеийн

программ хангамж ашигласан ч найдвартай урьдчилан таамаглах арга боловсруулахад мэдлэг, туршлага шаардлагатай хэвээр байна. Харин нэгэнт боловсруулсан загварыг ашиглах шатанд өндөр түвшний техникийн ур чадвар тийм ч шаардлагагүй. Иймээс шинж чанарыг илрүүлэх арга болон дээжийн ангиллын загваруудыг агуулсан программ хангамжийн автоматжуулалтын хэрэгсэл боловсруулагдсан.

Энэ нь үйлдвэрлэлийн өгөгдлийн файлуудыг өмнө нь боловсруулсан MS-д суурилсан загвартай уялдуулан илүү үр ашигтайгаар боловсруулах боломжийг олгодог

Газарзүйн заалтад зориулсан элементэн “хурууны хээ” (elemental fingerprinting)-ний арга

Элементийн шинжилгээ (elemental fingerprinting) нь үйлдвэрлэлийн чанарын хяналт, элементээс үүдэлтэй бохирдуулагчийг илрүүлэх, мөн ул мөр төдий элементийн найрлагаар нь дээжийг ангилах зэрэг олон хэрэглээнд ашиглагддаг. Гарал үүслээр нь тодорхойлох шаардлагатай, хязгаарлагдмал хэмжээгээр үйлдвэрлэдэг өндөр үнэ цэнэтэй хүнс, ундаанууд нь эдийн засгийн зорилгоор хуурамч хүнс үйлдвэрлэх (ЕМА) гол шалтгаан бай нь болдог. Газарзүйн заалт (GI)-ын тодорхойлолтыг тодруулахын тулд Дэлхийн Худалдааны Байгууллагын Оюуны өмчийн эрхийн худалдаатай холбоотой хэлэлцээр (TRIPS)-ийг 164 гишүүн орон баталсан. Энэ нь голчлон 22-р зүйлтэй холбоотой бөгөөд улс орон бүр барааны гарал үүслийн талаар хэрэглэгчдийг төөрөгдүүлэх тэмдэглэгээг ашиглахаас сэргийлэх хуультай байх ёстой. Мөн 23-р зүйлд, дарс болон спиртийн ундааны газарзүйн заалттай зөрчилдсөн барааны тэмдгийг, хэрэглэгчийг төөрөгдүүлэх эсэхээс үл хамааран, бүртгэхээс татгалзах эсвэл хүчингүй болгох эрхийг Засгийн газарт олгожээ. Хүнс, ундааны гарал үүслийг элементэн найрлагаар нь

тодорхойлох боломжтой. Ул мөр болон газрын ховор элементүүдийн эх үүсвэр нь түүхий эд, тухайн бүс нутгийн хөрс, байгаль орчин, бордоо, хөдөө аж ахуйн бодисуудаас үүсэлтэй байж болно. Түүнчлэн үйлдвэрлэлийн явцад, жишээлбэл, дарснаас тиолыг арилгах зорилгоор нэмдэг CuSO_4 , ферментацийн ган тоног төхөөрөмжөөс шингэсэн Zn, Fe, эсвэл нэрэх төхөөрөмжөөс ялгарсан зэс зэрэг нь нөлөөлдөг. Мөн савлах, хадгалах үед дарсны шилний тагнаас хар тугалга шингэх боломжтой байх зэрэг нь бүгд энэ төрлийн шинжилгээнд ашиглагдаж болно. Хүнсэн дэх ул мөр хэмжээний металлыг тодорхойлох нийтлэг аналитик аргууд нь ион хроматографи, электрохимийн шинжилгээ, эсвэл атом шингээлтийн спектрометр зэрэг харьцангуй энгийн аргуудаас бүрдэж болно. Электрохимийн аргууд нь энгийн, зардал багатай боловч цөөн тооны тодорхой металлыг илрүүлэхэд л тохиромжтой. Харин илүү өндөр өртөгтэй атомын спектрометрийн (AES), ICP OES, ICP MS зэрэг багажууд нь илрүүлэх элементийн доод хязгаар бага нөхцөлд ул мөр болон ховор газрын элементүүдийг нэгэн зэрэг илрүүлэх чадвартай байдаг.¹⁹



The Agilent 7900 ICP-MS System
Изотопын харьцааны масс спектрометр (IR-MS) нь тогтвортой изотопын харьцааг ашиглан газарзүйн гарал үүслийг тодорхойлоход үр дүнтэй болох нь батлагдсан. Дээжийг эхлээд устөрөгч, нүүрсхүчлийн хий, нүүрстөрөгчийн дан исэл, азот, хүчилтөрөгч, хүхрийн давхар исэл зэрэг энгийн хийнүүдэд хувиргах ба үүнийг элемент анализатортой холбосон тогтвортой IR-MS-ээр шинжилдэг. $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ болон $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ зэрэг изотопын харьцаануудыг хамтад нь

графикаар дүрслэн газарзүйн ялгааг тодорхойлох боломжтой. $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ харьцаа нь голчлон ургамлын биохимийн төрлөөс хамаардаг бол азотын харьцаа нь тухайн газрын хөрсний нөхцөлийг илэрхийлдэг. Азотын харьцаа нь хэрэглэсэн бордооны төрлөөс ихээхэн хамаарах ба атмосферийн азотоос гарган авсан эрдэс бордооны хувьд харьцаа 0-д ойр байдаг бол органик бордоонд $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ харьцаа өндөр байдаг.

ICP-MS арга нь элементийн шинжилгээ хийхэд маш хүчирхэг багаж бөгөөд 70-аас дээш элементийн шинжилгээний илрүүлэх доод хязгаарыг тэрбумын нэг хэсэг буюу ppb, их наядын нэг хэсэг ppt түвшинд хүртэл хангах чадвартай. Ул мөр төдий элементүүдийн тархалт, хүртээмж нь хөрсний pH, чийгшил, шаврын агууламж, гумин хүчлийн комплекс зэрэг газарзүйн олон хүчин зүйлээс хамаардаг.²¹ Үүний нэг жишээ нь Хятадын Yunnan мужийн Pu-erh цайны жинхэнэ эсэхийг тодорхойлох шинжилгээ юм. Энэхүү судалгаанд ICP-MS аргыг ашиглан 30 цайны дээжид 29 элементийг гурван давталттайгаар шинжилсэн. Шинжилгээний үр дүнг хяналттай сургалтын (supervised learning) арга бүхий олон хувьсагчийн статистик шинжилгээгээр боловсруулсан. Олон элементийн мэдээлэл ашиглаад дээжүүдийг ямраар нь ялгаатай байгааг харуулдаг статистик арга болох Каноник өөрчлөлт (Canonical variate analysis) анализын үр дүнд ялгааг харуулах хоёр чиглэл илэрсэн. Эхний чиглэл нь Na, Mg, Ca зэрэг макро элементүүд болон Sr, Zr, Mo зэрэг микро элементүүд, мөн ул мөр элементүүдэд суурилсан бөгөөд энэ үндсэн чиглэл нь цай тариалсан бүс нутгуудаас хамааран ялгаатай байжээ. Хоёр дахь чиглэл нь ногоон цайг хар болон исгэсэн цайнаас ялгаж харуулсан. Энэхүү чиглэл нь Rb, Mn, W, Re, Ti элементүүдийн агууламжаас хамаарч байсан бөгөөд эдгээр элементүүд хар болон исгэсэн цайнд илүү өндөр хэмжээгээр агуулагдаж байв.²² ICP MS анализын үед үүсдэг саад нөлөөнүүдийн ихэнх нь олон атомт ионууд байдаг бөгөөд тэдгээр нь нэг атомт ионуудтай харьцуулахад илүү их ионы огтлолын талбайтай байдаг. Энэхүү шинж чанарыг идэвхгүй хийтэй мөргөлдүүлэх замаар суурь саад нөлөөг (background interferences) арилгах

зорилгоор ашиглаж болдог. Үүнийг кинетик энергийн ялгалтаар ангилах (kinetic energy discrimination) гэж нэрлэдэг бөгөөд энэ процессын явцад бүх ионууд мөргөлдөөний огтлолын талбайгаасаа хамааран энерги алдана. Процесс тодорхой түвшинд хүрэхэд олон атомт ионууд хангалттай хэмжээний энерги алдаж, масс спектрээс зайлуулагддаг. Гели зэрэг идэвхгүй мөргөлдөөний хий ашиглах үед ямар нэгэн дагалдах урвал эсвэл шинэ бүтээгдэхүүн хэлбэрийн саад нөлөө үүсдэггүй.²³ Гурвалсан квадрополь ICP MS төхөөрөмж нь мөн кинетик энергийн ялгалтын давуу талыг ашигладаг. Үүнээс гадна мөргөлдөөний камерт урвалж хий ашигласнаар нэг атомт (mono atomic) саад нөлөөг ч арилгах боломжтой.²² Эдгээр хоёр тохиолдлын аль алинд нь орчин үеийн ICP MS багажууд нь өмнөх үеийн төхөөрөмжүүдтэй харьцуулахад сонгомол чанар (selectivity) болон мэдрэмж (sensitivity) ийн хувьд мэдэгдэхүйц сайжирсан байдаг.

Жинхэнэ байдлыг шалгахад ашиглах спектроскопийн аргууд

Дарс болон согтууруулах ундааны худалдаанд эдийн засгийн шалтгаант хуурамч хүнс (ЕМА)-ний асуудал нь хэд хэдэн хэлбэртэйгээр илэрдэг. Энэ нь жинхэнэ бүтээгдэхүүнийг олж авч, түүнийг хямд орлуулагчтай шингэлэхээс эхлээд чанартай бүтээгдэхүүнийг хямд спирт болон нэмэлт бодис ашиглан дуурайлган хуурамчаар үйлдвэрлэх, цаашлаад татвараас чөлөөлөгдсөн денатурат буюу техникийн спиртийг шингэлж ашиглан аюултай хуурамч бүтээгдэхүүн үйлдвэрлэх зэрэг ноцтой хэлбэрт хүрч болзошгүй.²⁴

Фурьегийн хувиргалттай хэт улаан туяаны (FTIR), ойрын хэт улаан туяаны (NIR) болон Раман спектроскопийн аргуудыг бүтээгдхүүний жинхэнэ байдлыг шалгахад өргөн ашигладаг.

Фурьегийн хувиргалттай хэт улаан туяаны (FTIR), ойрын хэт улаан туяаны (NIR) болон Раман спектроскопийн аргуудыг бүтээгдхүүний жинхэнэ байдлыг шалгахад өргөн ашигладаг. NIR (ойрын инфра улаан туяа) муж нь $13,300\text{--}4,000\text{ см}^{-1}$ -ийн хүрээг хамардаг. Энэ энергийн муж нь электроныг өдөөхөд хангалттай их биш боловч молекулыг хамгийн бага чичиргээний төлөвт хүргэхэд хангалттай байдаг. NIR спектрүүд нь молекулын хэт авиа (overtone) болон хосолсон (combination) зурвасуудаас бүрддэг бөгөөд эдгээр нь сул дохио бөгөөд квант механикийн хувьд зөвшөөрөгдсөн шилжилт биш байдаг. NIR-ийн давуу тал нь шингээлт багатай тул MIR-тай харьцуулахад дээж рүү илүү гүн нэвтрэх чадвартай байдаг. Ялангуяа, NIR аргаар шинжилсэн хуурамч сүүний дээжүүдэд $7,700$ болон $5,000\text{ см}^{-1}$ дээр тодорхой шингээлтийн зурвасууд ажиглагдсан. MIR болон NIR багажууд аль аль нь хуурамч хүнсийг илрүүлэхэд тохиромжтой боловч PCA-д суурилсан хемометрикийн боловсруулалтын дараа MIR нь ангилал болон тоон тодорхойлолтын хувьд илүү сайн үр дүн үзүүлсэн. UV-Vis болон IR аргууд нь аль аль нь шингээлт дээр суурилдаг бөгөөд шингээгдсэн гэрлийн хэмжээ нь абсолют хэмжилт болдог. Гэсэн хэдий ч эдгээр аргууд нь физик параметрээс бүрэн хамаарахгүй гэсэн үг биш юм. Жишээлбэл, дээжийн ширхэглэлийн хэмжээ (granularity) маш чухал нөлөөтэй. Үүнийг будааны жишээн дээр харуулсан бөгөөд ширхэглэг шинж чанараас үүдэлтэй тархалтын нөлөөг засахын тулд multiplicative scatter correction (MSC) ашиглах шаардлагатай болсон. Дэлхийн хүн амын талаас илүү хувь нь цагаан будааг үндсэн хүнсээ болгодог бөгөөд жилд ойролцоогоор 480 сая тонн цагаан будаа хураан авдгаас 85% нь хүний хүнсэнд хэрэглэгддэг. Харамсалтай нь,

эдийн засгийн шалтгаанд хуурамч хүнсний (ЕМА) асуудал цагаан будаан дээр түгээмэл гардаг бөгөөд чанартай будааг чанар муутай будаатай холих, эсвэл гадны бодис нэмэх нь харьцангуй хялбар байдаг. Талбайн нөхцөлд шууд ашиглах боломжтой ойрын хэт улаан туяаны буюу NIR аргуудыг будааг газарзүйн гарал үүсэл эсвэл чанарын үзүүлэлтээр ангилахад хөгжүүлсэн. Эдгээр NIR судалгаанд нормчлол нь урьдчилан таамаглах чадварт маш чухал үүрэгтэй байдаг. Будааны чанарын судалгаанд multiplicative scatter correction (MSC) арга нь дээжийг ялган ангилахад үр дүнтэй байсан бол detrend болон дундаж дээр төвлөрөх аргууд хангалттай тохирч байгаагүй. Энэхүү MSC арга нь NIR-д суурилсан будааны жинхэнэ эсэхийг тодорхойлох судалгаанд өргөн хэрэглэгддэг нийтлэг хандлага юм. Spatially offset Raman spectroscopy (SORS) нь Европын нисэх онгоцны буудлуудад аюулгүй байдлын шалгалт хийх үед ашигладаг арга юм. Технологийн хувьд энэ нь эдийн засгийн шалтгаант хуурамч хүнсний илрүүлэхэд боломжийн ирээдүйг харуулж байгаа бөгөөд флуоресценц зэрэг хязгаарлалтуудыг шинжлэх ухааны нээлт, хөгжлийн үр дүнд шийдвэрлэх боломж бүрдэж байна. Уламжлалт Раман систем нь ойролцоогоор 785 нм-ийн лазер ашигладаг бөгөөд мэдрэмж сайтай боловч флуоресценцийн нөлөөнд их өртдөг. Шинэ үеийн Раман системүүд урт долгионы уртыг ашигладаг. Жишээлбэл, Agilent Resolve гар мэдрэгч бүхий SORS төхөөрөмж нь лазерын долгионы уртыг 830 нм болгон нэмэгдүүлснээр флуоресценцийн нөлөөг бууруулж, харьцангуй бага дохиотой боловч илүү найдвартай хэмжилт хийх боломжийг бүрдүүлсэн. Мөн SORS арга нь өнгөт хуванцар, шил зэрэг сав баглаа боодлоос үүсэх флуоресценцийг багасгадаг. SORS-ийн ажиллагаанд спектрийн нормчлолын шат багтдаг. Эхлээд багаж нь гадаргын нөлөө давамгайлсан уламжлалт, буцах сарнилттай (backscatter) төстэй “zero mode” буюу тэг төлөв спектрийг

хэмждэг. Дараа нь лазерын байрлалыг автоматаар шилжүүлж, оффсет хэмжилт хийснээр сав баглаа боодлын спектрт үзүүлэх нөлөөг засварладаг. SORS аргаар үнэлгээ хийхэд зориулж эдийн засгийн шалтгаантай хуурамч хүнс (ЕМА)-ний дээжүүдийг бодит нөхцөлд хэрэглэгддэг денатурант спиртүүд болон хуурамч нэмэлт бодисын агууламжтайгаар Шотландын Виски Судлалын Хүрээлэнгээс (Scotch Whiskey Research Institute)-ээс бэлтгэн нийлүүлсэн. Түгээмэл хэрэглэгддэг зургаан төрлийн денатуран спиртэд: метил этил кетон, изопропил спирт, метил изопропил кетон, этил сек-амил кетон, метанол, болон денатониум бензоат орно. Эдгээрийг гар мэдрэгч SORS төхөөрөмжөөр ppm болон sub ppm түвшинд илрүүлсэн. Виски хуурамчаар үйлдвэрлэхэд түгээмэл ашиглагддаг амт оруулагч бодисуудад ваниллин, сахароз, лимонен, транс-анетол ордог бөгөөд эдгээрийг мөн бага ppm түвшинд илрүүлсэн. Эдгээр зургаан бодисыг бүгдийг нь битүүмжилсэн шилэн саванд туршсан. Энэхүү аргын бодит нөхцөл дэх хэрэглэх боломжийг үнэлэхийн тулд дэлгүүрээс худалдан авсан дээжүүдийг ашиглан, дарс болон спиртийн ундаанд түгээмэл хэрэглэгддэг сав баглаа боодлын төрөл болох тунгалаг, ногоон, хүрэн шилэн саванд туршилт хийсэн. Харанхуй шил нь гэрлийн нэвтрэлтийг бууруулдаг тул өндөр дохио/шуугианы харьцаа (S/N) авахын тулд илүү олон хэмжилт шаардлагатай болсон. Эдгээр нөхцөлийг харгалзан үзэхэд метанолыг 250 ppm хүртэл (зөвшөөрөгдөх дээд хэмжээ 20,000 ppm буюу 2%-аас хавьгүй бага түвшинд) илрүүлсэн бөгөөд бусад бүх хуурамч бодисуудыг мөн ppm түвшинд илрүүлсэн. Agilent Resolve төхөөрөмж нь мансууруулах бодис, тэсрэх бодис, аюултай материал илрүүлэхэд ажлын

талбар дахь хэрэглээнд зориулагдсан систем байдлаар худалдаалагддаг. Дээрх судалгаанд гарсан илрүүлэх доод хязгаар (LOD)-уудыг одоогоор Agilent Resolve гар төхөөрөмжид байхгүй, оффлайн боловсруулалтын аргаар тооцоолсон болно.

Гарал үүслийн үнэн зөв байдлын шинжилгээг генийн мэдээллээр тайлах



Agilent 2100 Bioanalyzer төхөөрөмж Загасны жинхэнэ эсэхийг тодорхойлох уламжлалт арга нь гаднаас харж шалгах байдлаар хийдэг байсан. Гэвч олон төрлийн загасыг амьд үед нь хараагаар ялгаж танихад хүндрэлтэй байдаг бөгөөд боловсруулах явцад сэрвээ, хайрсыг нь авч хаяснаар гаднаас нь таньж ялгах аргаар таних боломж бүрэн алддаг. Эсрэг бие (antibody)-д суурилсан аргыг талбайн нөхцөлд ашиглах боломжтой ч махыг болгосны дараа энэ арга үр дүнгүй болдог. Учир нь уургууд халууны явцад денатурацид ордог. Өөр нэг арга болох ДНХ шинжилгээ нь хүнсний боловсруулалтын явцад илүү тогтвортой байдаг. Мөн мах болон уураг зэрэг энгийн холимгийг нэмснийг илрүүлэх боломжтой боловч мэдээллүүд давхцах үед тайлбарлахад төвөгтэй болдог. ДНХ шинжилгээ найдвартай ч анхаарах зарим сул талуудтай. Цөмийн генийн хэмжээ маш их бөгөөд ихэнхдээ хадгалагдсан (conserved) байдаг. Харин митохондрийн ДНХ (mtDNA) нь харьцангуй хурдан

мутацид ордог, нэг эцэг эхээс удамшдаг, мөн хэмжээний хувьд ойролцоогоор 100,000 дахин жижиг байдаг.36 Эхний үед mtDNA-д суурилсан аргуудыг митохондрийн цитохром b болон c бүсүүдэд хөгжүүлсэн.37 Дараа нь Barcode of Life Data System (BOLD) буюу Амьдралын Дата Системийн Баркодын стандартыг нэвтрүүлсэн. Амьтныг тодорхойлох стандартад цитохром C оксидаз I (COI) генийн 684 суурийн хосыг гол болгож үздэг болсон.37 Загас тодорхойлох протоколыг энэ стандартад тохируулан нэвтрүүлсэн.38 Загасны митохондрийн mtДНК шинжилгээний хөгжил тоног төхөөрөмжийн сайжруулалттай уялдан улам сайжирч байна. Эхэн үед туршилтуудыг полимеракийн гинжин урвалын—restriction fragment length polymorphism (PCR-RFLP) аргыг капилляр гель электрофорез ба будагч бодис ашиглан илрүүлэлтийг хамгийн эцэст нь хийдэг байдлаар хэрэгжүүлж байсан. Дараа нь энэхүү гелийн электрофорезийн үе шатыг чипэн дээрхи лаб буюу lab-on-a-chip капилляр электрофорезийн системийг орлуулснаар энэ арга улам сайжирсан. Харин хуурай газрын ургамлын хувьд Barcode of Life арга удаан хөгжсөн. Учир нь ургамлын генетикийн олон янз байдал хамаагүй их байдаг. Иймээс цөмийн геномын хадгалагдсан транскрипцлэгддэг бүсийг чиглэсэн аргыг найдвартай гэж үзсэн. CBOL (Barcode of Life консорциум)-ын Ургамлын ажлын хэсэг 2009 онд rbcL болон matK генийн дарааллыг ашиглахыг зөвлөсөн. Энэ стандарт батлагдахаас өмнө PCR-RFLP-тэй хамт янз бүрийн микросателлит маркеруудыг ашиглаж байсан. Үүний нэг жишээ нь Basmati будааны жинхэнэ эсэхийг батлах туршилтын судалгаа юм. Тэр судалгаагаар ДНХ шинжилгээ ашиглан 10–20% хүртэлх хэмжээтэй Basmati бус будааны холимгийг хурдан илрүүлэх боломжтой болохыг харуулсан. PCR-RFLP арга нь жинхэнэ эсэхийг тодорхойлох стандарт арга гэж тооцогддог бөгөөд Barcode of Life дээр суурилсан нээлттэй мэдээллийн сантай харьцуулах нэг

удаа генийн дарааллыг тогтооход тохиромжтой.44 Сүүлийн үед тодорхойгүй олон төрлийн хольцыг илрүүлэх шинэ арга хөгжиж байгаа бөгөөд энэ нь дараагийн үеийн секвенсчлэл буюу генийн дарааллыг тогтоох NGS (Next-Generation Sequencing, NGS)-д суурилдаг.45 NGS нь ДНХ-ийн хэсгүүдийг бактер ашиглан хувилах шаардлагыг үгүй болгодог. Үүний оронд эсийн оролцоогүйгээр, нэг удаагийн хэмжилтээр олон дээжний генийн дарааллыг зэрэг тогтоож, үр дүнг гел электрофорез ашиглахгүйгээр шууд харах боломжийг олгодог. Загас болон эмгэн хумсны төрөл зүйлүүдийг хооронд нь ялгахын тулд туршилтад тухайн төрөл зүйлд тохирч таарсан универсаль праймеруудыг ашиглан метабаркодчиллын аргыг хэрэглэж, загас болон эмгэн хумсыг төрөл, зүйлээр нь ангилна. Үр дүнг тааруулж, үнэлэхэд зориулсан тусгай The Basic Local Alignment Tool (BLAST) – программ байдаг.

Бусад тэмдэглэх шаардлагатай аргууд

Электрон хамар (e-Nose) нь дэгдэмхий нэгдлүүдийг химийн (амперометр, кондуктометр), пьезоэлектрик, оптик (үнэр мэдрэгч) мэдрэгчүүд, мөн GC болон MS-д суурилсан системүүдээр илрүүлдэг.47, 48 Хамгийн түгээмэл хэрэглэгддэг e-Nose мэдрэгчүүд нь электрохимийн мэдрэгчүүд юм. Мэдрэгчийн тоо, төрөл, мөн тэдгээрийн сонгон мэдрэх чадвар (selectivity) ба мэдрэмж (sensitivity) нь e-Nose-ийн хэрэглээний зорилгоос хамаарна. e-Nose төхөөрөмжүүд нь хурдан скрининг хийх чадвартай тул уламжлалт GC аргын оронд ашиглагдах боломжтой. Жишээлбэл, Emmentaler бяслагийг өөр өөр газарзүйн бүс нутгаас ялган танихад амжилттай ашигласан.49 Гэхдээ энэ аргын сул тал нь хроматографийн салгалт эсвэл спектрийн мэдээлэлгүйгээр тодорхой дэгдэмхий

нэгдлүүдийг нарийвчлан тодорхойлох боломжгүй байдаг. Өндөр нарийвчлалтай 1D болон 2D NMR (HR-NMR) анализыг олон хувьсагч статистик боловсруулалттай хослуулан ашиглахад зөгийн балны үйлдвэрлэл дэх хуурамч нэмэлт, эсвэл бүтээгдхүүнийг илрүүлэх, мөн сахар, амин хүчил зэрэг олон үзүүлэлтийг тодорхойлох, тоон үнэлгээ хийхэд үр дүнтэй болох нь тогтоогдсон. Чанарын хяналтыг хангахын зэрэгцээ аюулгүй байдлын эрсдэлийг бууруулах зорилгоор шинжилсэн хүнсний бүтээгдэхүүний мэдээллүүдийг жинхэнэ бүтээгдэхүүний өргөн мэдээллийн сантай харьцуулан үнэлдэг.

Ерөнхий, зорилтот бус шинжилгээний ажлын урсгал

Хроматографийн бус аргууд, жишээлбэл спектрометрийн шинжилгээний үед бид бүрэлдэхүүн хэсэг тус бүрийг тодорхойлоход анхаардаггүй. Ийм туршилтуудад бид дээжийн төрлүүдийг хооронд нь ялгаж өгч буй спектрийн онцлогуудыг л илрүүлэхийг зорьдог. Харин масс спектрометр (MS)-д суурилсан аргуудын хувьд дээжийг тодорхойлох протоколын дагуу боловсруулах боломжтой байдаг. Энэ нь өгөгдлийг баяжуулж, мэдэгдэж буй хуурамч нэмэлт бодисууд, мэдрэхүйн буруу үзүүлэлтүүд болон болзошгүй бохирдуулагчидтай харьцуулах боломжийг олгодог. Иймээс зорилтот бус аргачлалыг зорилтот шинжилгээний үзүүлэлтүүдтэй хослуулан үнэ цэнтэй ойлголтуудыг өгөх боломжтой.

Шинжилгээний үзүүлэлтийг буруу гаргаснаар туршилтын үр дүнгийн статистик ач холбогдлыг бууруулдгийг ойлгох нь чухал. Тиймээс буруу (хуурамч) тодорхойлолтуудыг оруулснаас илүүгээр үр дүнг тодорхойлолтог үлдээх нь дээр байдаг. Та тодорхой нэг (зорилтот, мэдэгдэж буй) бүрэлдэхүүн хэсгийг туршилтад зөвхөн тогтмол, найдвартай тодорхойлж чадна гэдэгтээ итгэлтэй үедээ л оруулах хэрэгтэй.

Хроматографийн аргаар салгагдсан химийн нэгдлүүдийг тодорхойлоход дараах хүндрэлүүд ихэвчлэн тулгардаг. Үүнд: баригдах хугацааны тогтворгүй байдал, пикүүдийн бүрэн биш салгалт, изомер болон изобар нэгдлүүд, ялгарч чадаагүй пикүүд. Эдгээр хүндрэлүүдийн улмаас илрүүлэлтүүдийг нийтэд нь нэгтгэж харуулах, худлаа пик үүсэх, (хуурамч эерэг болон хуурамч сөрөг), тодорхойлсон химийн нэгдлүүдийг буруу гаргах зэрэг алдаанд хүргэдэг. Хамгийн сайн нөхцөлд ч гэсэн өгөгдлийг хянах нь ажлын урсгалын чухал алхам хэвээр байдаг.

Хуурамч бүтээгдхүүнийг илрүүлэх ихэнхи химийн шинжилгээнүүд нь цөөхөн хэдэн маш сайн сайн тодорхойлогдсон цөөн хэдэн шинж чанарыг шалгадаг. Жишээлбэл, жинхэнэ оливын тос (EVOO)-ыг авч үзвэл дээжийн чанарыг илтгэх задралын химийн нэгдлүүд болох хлорофиллын задралын бүтээгдэхүүн ругорpheophytin, мөн хөгцөрсөн үнэрт нөлөөлдөг 1-octen-3-ol зэрэг орно. Мөн өөр зарим мэдэгдэж буй нэгдлүүдэд исэлдэлтийн, муудсаны (rancid) эсвэл хөгцөрсөн шинж чанаруудыг үзүүлэгч нэгдлүүд ордог. Бид химийн шинжилгээг туршлагатай шинжээчдийн мэдрэхүйн үнэлгээний (сенсор панел) аргаар баяжуулж болно. Гэвч энэ аргын хамгийн том сул тал нь ихээхэн хөдөлмөр шаарддаг (өртөг өндөр) бөгөөд удаан байдаг (шинжээчид нарийн ялгааг таних чадвар нь буурахаас өмнө зөвхөн богино хугацаанд ажиллах боломжтой). Харин мэдрэхүйн сургалтын өгөгдөл болон олон хувьсагчтай статистикийг хослуулснаар хүнсний жинхэнэ байдлыг тодорхойлох илүү хямд, үр ашигтай, дахин давтагдах боломжтой арга бий болдог.

Олон хувьсагчтай статистикийн туршилтын гол хүчин зүйлс

Хамгийн тохиромжтой нь, хуурамч хүнсийг шалгахын тулд боловсруулалтын урсгалын сүүлийн бүтээгдхүүн дээр биш харин түүхий эд дээр шалгах явдал юм. Учир нь дараагийн шатны бүтээгдэхүүнд эдгээр нь илрэхэд хэцүү болж, далдлагдах магадлалтай байдаг. Боломжтой бол өөр өөр аналитик

аргуудыг зэрэгцүүлэн үнэлж, таны шаардлагад аль нь хамгийн сайн нийцэж байгааг тодорхойлох хэрэгтэй. Спектроскопи, масс спектрометр, мөн цөмийн соронзон резонанс (NMR) зэрэг аргууд нь хүнсний залилан, хуурамч хүнсийг илрүүлэх тусгай шинжилгээнд ашиглагдах боломжтой. Арга сонголтод өртөг, нарийн төвөгтэй байдал, мэдрэмж (sensitivity), болон зөөвөрлөх боломж зэрэг хүчин зүйлс нөлөөлдөг.

Жинхэнэ болон хуурамч дээжүүдийн бүлгийн хэмжээг ойролцоо байхаар тэнцвэржүүлэх нь чухал. Хэрэв дээжийн хэмжээ жигд бус байвал статистикийн үр дүн гажих эрсдэлтэй. Учир нь нэг хүчин зүйлийн вариацийн шинжилгээ (ANOVA)-д дисперсийн жигд бус байдалд (heterogeneity of variance) чухал нөхцөл болдог. Орчин үеийн статистикийн программ хангамж зарим гажуудлыг засах боломжтой боловч өгөгдлийг цуглуулсны дараа багасгах гэж оролдсоноос анхнаасаа ийм асуудлаас зайлсхийх нь илүү үр дүнтэй.

Олон хувьсагчтай статистикийн дээж ангиллын урьдчилан таамаглах аргыг тохируулах нь амархан бөгөөд туршилтын өгөгдөл дээр сайн таамаглаж байгаа мэт үр дүн гарч болдог. Гэвч хэт олон бие даасан хувьсагч ашиглах нь сургалтын өгөгдөлд сайн тохирч байгаа ч шинэ дээжийг зөв ангилж чадахгүй загварыг бий болгодог. Үүнийг ихэвчлэн өгөгдөлд хэт тааруулах (overfitting) гэж нэрлэдэг. Ийм нөхцөл үүсэх магадлалыг бууруулахын тулд хоёр хэмжээст PCA (Үндсэн бүрэлдэхүүний шинжилгээ)-д хялбаршуулж, дээжийн ангиллыг ялгах боломжтой эсэхийг шалгах хэрэгтэй. Ерөнхийдөө ангиллын ялгааг тодорхойлоход цөөн бие даасан хувьсагч шаарддаг урьдчилан таамаглах загварууд илүү хүчтэй бөгөөд өгөгдөлд хэт тааруулах эрсдэл багатай байдаг. Дээжийн ангиллыг урьдчилан

таамаглах нь хяналтын доор явуулж буй сургалтын хэлбэр юм. Урьдчилан таамаглах аргаар аль болох цөөн хамааралтай хувьсагч ашиглах нь сайн практик бөгөөд нэг аргачлалд нэг хувьсагч байхаар хязгаарлах нь зүйтэй. Жишээлбэл, “дээжийн төрөл” нь хувьсагч болж, хоосон хяналтын дээж (vehicle blank), хяналтын дээж (control), болон мэдэгдэж буй хуурамч нэмэлтүүд нь тухайн хувьсагчийн жишээнүүд (instance) байж болно. Сүүг жишээ болгон авч үзвэл, хуурамч нэмэлтүүдэд ус, шар сүү (whey), натрийн гидроксид, мочефин, мелафин, устөрөгчийн хэт исэл зэрэг багтаж болно. Ийм илэрхий хуурамч нэмэлтүүдийн хувьд шаардлагатай бол дээж бүрийг 3 удаагийн техникийн давталтаар шинжилж, хроматографийн давтагдах чанарыг баталгаажуулж болно. Мөн нөхцөл бүрт 5 дээж байхад статистикийн ач холбогдлыг хангахад хангалттай гэж үздэг. Боломжтой тохиолдолд, тухайн хольц бүр нь дээжний спектрийн шингээлтийн давтамжаараа хангалттай ялгарахуйц байж болно. Ийм үед, спектроскопийн аргыг ашиглан гар FTIR төхөөрөмжөөр газар дээр нь хольц байгаа эсэхийг илрүүлэх боломжтой бөгөөд заавал лабораторид нарийн шинжилгээ хийх шаардлагагүй байж болно. Бусад тохиолдлуудад, жишээлбэл EVOO буюу өндөр зэрэглэлийн оливын тосны зэрэглэлийг буруу тогтоосон жишээ их тархмал бөгөөд зарим орлуулалт нь илүү нарийн, далд шинжтэй байдаг тул илрүүлэхэд илүү хэцүү байдаг. Ийм тохиолдолд залиланг илрүүлэхийн тулд хроматографи болон дээжийн ангиллыг урьдчилан таамаглах ажлын урсгалыг хэрэглэх шаардлагатай. Аргачлалын хүрээг эхний шатанд тодорхойлох нь чухал. Жишээлбэл, хөгцөрсөн чийгтэй хөгцөрсөн, муудсан, цууны амттай зэрэг шинжүүд нь, ялангуяа буруу хадгалсан зэрлэг өндөр

зэрэглэлийн оливын тосонд нийтлэг тохиолддог бөгөөд үүнээс болж чанарын ангилал буурч, “virgin olive oil” буюу түүнээс доогуур ангилалд ороход хүргэдэг. Эдгээр дөрвөн доголдол сайн судлагдсан боловч өндөр зэрэглэлийн оливын тосны ангилалд тэнцэхгүй болоход нөлөөлөх өөр олон хүчин зүйлс байдаг бөгөөд тэдгээр нь фенотип буюу харагдах байдлын онцлогоос хамаардаг. Иймд хамгийн түгээмэл амт үнэрийн шинжүүдэд нөлөөлдөг гол хүчин зүйлсийг тодорхойлоход хангалттай, найдвартай сайн арга боловсруулах шаардлагатай ба мөн сургалтын өгөгдөлд хэдэн төрлийн оливын сорт хамруулах вэ гэдгийг урьдчилан шийдэх нь чухал юм.

Нарийн төвөгтэй ангиллын урьдчилан таамаглах туршилтуудын чухал хүчин зүйлс

Нарийн ялгаатай ангиллын урьдчилан таамаглах туршилтын сургалтын өгөгдөлд биологийн өөр өөр байдал хангалттай хэмжээнд орж чадсан эсэхийг тодорхойлох нь маш чухал. Өөрөөр хэлбэл фенотипийн ялгаа болон зорилтот шинж чанаруудыг бүрэн хамарч чадахуйц өгөгдөл байгаа эсэхийг үнэлэх хэрэгтэй. Мөн статистикийн хангалттай чадамжтай байхын тулд дээжийн тоо хүрэлцээтэй эсэхийг шалгах шаардлагатай. Урьдчилсан туршилтын үр дүнд үндэслэн дараах шатны чадамжийн шинжилгээний хүрээнд (Post hoc power analysis) шаардлагатай хамгийн бага дээжийн хэмжээг тодорхойлж болно.⁵¹ Хроматографийн давтагдах чанар нь, ялангуяа масс спектрометрийн аргуудын хувьд, маш чухал хүчин зүйл юм. Хэдийгээр хроматографийн гажилтыг засах пикийн тохируулгын байдаг ч, баригдах хугацаа туршилтын явцад хэлбэлзэж байвал бараг зэрэг ялгарч буй бүтцийн изомеруудыг пикүүдийн жигд байдал зөв тодорхойлохгүй байх магадлалтай. Иймээс хроматографийн асуудлыг дараа шийдвэрлэхээс илүүтэйгээр анхнаасаа зайлсхийх нь илүү оновчтой. Шинжилгээний явцад дарааллын нөлөө нийт үр дүнд

нөлөөлөхөөс сэргийлэхийн тулд сорьцуудыг санамсаргүй дарааллаар шинжлэх хэрэгтэй. Жишээлбэл, матрицын нөлөөлөл нь сигналын хүчийг багасгах эсвэл ихэсгэх шалтгаан болдог. Энэ нь ихэвчлэн нэг багцийн шинжилгээний явцад аажмаар үүсдэг. Өгөгдлийг цуглуулсны дараа үр дүнг гажуудуулж болзошгүй хроматографийн эсвэл спектрийн хэт ялгаралтай утгуудыг илрүүлэхийн тулд заавал хянах хэрэгтэй. Эхний энгийн арга нь өгөгдлийг нүдээр шалгах явдал юм. Хэрэв асуудал нь багцад суурилсан хроматографийн нөлөөлөлтэй холбоотой байвал байршил болон хэмжээсийг хэвийн болгох аргаар засварлах боломжтой. Онлайнд өргөн хэрэглэгддэг Combat алгоритм нь онлайнаар бэлэн байдаг, олон хувьсагчтай статистикийн янз бүрийн программ хангамжуудын багцанд орсон байдаг.⁵² Мөн сайн багц доторх муу чанарын дээжийг илрүүлэхийн тулд дараах аргуудыг ашиглаж болно. Үүнд: PCA (Үндсэн бүрэлдэхүүний шинжилгээ)-д муу кластер үүсэхийг ажиглах, нэг бүлгийн доторх корреляци сул байх, графикаар хэвийн бус тархалт байгаа эсэхийг шалгах, илүү системтэй үнэлэхийн тулд Mahalanobis зайг тооцоолж, тухайн утга дундаж утгаас хэдэн стандарт хазайлтаар хол байгааг харуулна.⁵³ Спектрометрийн аргаар суурилсан дээжийн ангиллын урьдчилан таамаглах арга боловсруулах үед өгөгдлийг боловсруулахад давталтат ажлын урсгалыг ашиглах нь бас нэгэн хэрэгтэй хандлага юм. Энэ нь аналитик өгөгдөл дэх хуурамч сөрөг болон хуурамч эерэг үр дүнгийн асуудлыг багасгахад тусалдаг. Хроматографийн шилжилт болон багажийн хариу өөрчлөгдөхийг арилгах зорилгоор олон төрлийн шинж илрүүлэх болон өгөгдөл тааруулах протоколуудыг тохируулж оруулсан байдаг. Эдгээр

хэрэгслүүд нь шинж чанарыг ялгах явцад зэрэгцүүлэлтийг гүйцэтгэж, янз бүрийн шалтгаанаас үүсдэг хроматографийн тогтворгүй байдлаас шалтгаалах дээжийн хэлбэлзлийг зохицуулахад тусалдаг. Хэрэв давталтат арга ашиглах боломжгүй бөгөөд өгөгдөл хэт их тул гараар шалгах боломжгүй бол статистикийн программд дутуу утгуудыг тэг гэж авч үзэхээс илүүтэйгээр “дутуу” гэж шууд тэмдэглэхийг зөвлөж байна. Энэ нь ихэнх олон хувьсагчт статистикийн програмд өгөгдөл импортлох үндсэн тохиргоо байх ёстой. Эцэст нь, бүх боломжит мета өгөгдлийг бүртгэж хадгалах нь маш чухал. Учир нь өгөгдлийг тайлбарлахад хүндрэл учруулж болох хөндлөнгийн хүчин зүйлсийг илрүүлэх шаардлага гарч болно. Спектрометрийн туршилтын дизайн болон чанарын хяналтын талаар илүү гүнзгий тайлбарласан эх сурвалжийг Warwick Dunn болон хамтран зохиогчид бичсэн байдаг.

Олон хувьсагчтай статистик бодолтууд, шинжилгээний ач холбогдол ба баталгаажуулалт

Хэдийгээр энэ нь шууд хэмжилтийн багаж хэрэгсэл биш боловч олон хувьсагчтай статистик бодолтуудыг хийснээр хүнсний хуурамч байдлыг илрүүлэхэд чухал үүрэг гүйцэтгэдэг. Энэ нь газарзүйн гарал үүслийн баталгаажуулалт, хүнсний чанарын үнэлгээ, эсвэл хуурамч нэмэлтийг илрүүлэхэд өргөн хэрэглэгддэг. Ямар ч төрлийн Туршилтын хэмжилтийн аргачлал буюу EMA (Experimental Measurement Approach)-г үнэлж байгаа тохиолдолд биологийн болон жишиг дээжийн өгөгдлийг хоёуланг нь авч үзэн хүлээн зөвшөөрөгдөх, шинж чанарыг тодорхойлогч (тэдгээрийн суурь нэгдлүүдийг) үзүүлэлтүүд, түүний дотор шаардлага хангахгүй болгож

буй үзүүлэлтүүдийг харьцуулж шалгана. Өмнө нь ийм ажлыг ихэвчлэн гараар хийдэг байсан бөгөөд стандарт (жишиг) дээж болон шаардлага хангаагүй дээжийн хоорондох ялгааг маш нарийн, хөдөлмөр их шаардан хайж тодорхойлдог байсан. Илүү олон шаардлага хангаагүй дээжийг шинжилж, илүү олон шинж чанарыг тогтоох тусам зорилтот нэгдлүүдийн жагсаалтыг улам баяжуулан мэдээллийн санд нэмдэг байв. Өнөөгийн байдлаар олон лабораториуд яг ийм байдлаар ажиллаж байна, мэдэгдэж буй задралын бүтээгдэхүүнүүдийг илрүүлэх химийн шинжилгээг мэдрэхүйн үнэлгээтэй хослуулан ашиглаж байна. Зөвхөн химийн шинжилгээ эсвэл зөвхөн мэдрэхүйн үнэлгээ ч тэр дангаараа төгс шийдэл биш юм.

Agilent Profinder ба MPP программын өгөгдөл боловсруулах онцлогууд

Agilent-ийн Profinder программ нь массын болон баригдах хугацааны хоорондын тохируулгыг хоёуланг нь хийдэг. Иймээс энэ нь дундаж (median) баригдах хугацаа болон масс утгуудыг импортлох боломжтой бөгөөд өгөгдлийг Profinder-ийн архив файл хэлбэрээр импортлох үед Agilent Mass Profiler Professional (MPP) программд баригдах хугацааг дахин тохируулах алхам шаардлагагүй болдог. Гэсэн хэдий ч MPP программд массыг тохируулах (mass alignment) сонголт хэвээр байдаг бөгөөд энэ нь CEF файлуудыг импортлох боломжийг олгодог. CEF файлуудтай ажиллах үед Profinder болон MPP программд массыг тодорхойлох арга бага зэрэг ялгаатай байдаг тул MPP дотор масс тохируулгын цонхыг (mass alignment window) нэмэгдүүлэх нь зүйтэй байдаг. Харин гуравдагч талын багаж төхөөрөмжөөс өгөгдөл импортлохын тулд тухайн файлыг текст файл хэлбэрээр оруулж, зорилтот ажлын урсгалыг (targeted workflow) ашиглах шаардлагатай.

Олон хувьсагчтай статистикт зориулсан програм хангамж ба хэрэгслэлүүд

Мөн шинж чанар тодорхойлох болон энгийн химийн өгөгдлийг статистик

аргаар шинжлэх хемометрийн шинжилгээ хийх боломжтой онлайн статистикийн хэрэгслүүд байдаг бөгөөд эдгээр нь зөвхөн нэг бие даасан хувьсагчтай хос туршилтад тохиромжтой. 55,56 Туршилтад нэгээс олон бие даасан хувьсагч оролцсон тохиолдолд илүү дэвшилтэт статистикийн хэрэгслүүд бас бий. Судлаачид өгөгдлийн кластерчлал (data clustering), ангилалыг урьдчилан таамаглах (class prediction), олон-омик (multi-omic) шинжилгээ, эсвэл замналын дагуух (pathway) шинжилгээ зэрэг нарийн төвөгтэй аргачлалуудыг ашиглахыг сонирхож байвал тохирох програмуудыг ашиглаж болно. Ийм нөхцөлд нарийн төвөгтэй өгөгдлийн ялгааг тодорхойлох (differential analysis) болон дүрслэх (visualization) зориулалттай хэрэгслүүд байдаг. Жишээлбэл, Agilent-ийн MPP, IBM-ийн SPSS, мөн Waters компанийн Progenesis Q1 зэрэг програмууд орно. Зорилтот бус шинжилгээ болон дээжний дэлгэрэнгүй мэдээллийг гаргах сонирхолтой боловч нарийн төвөгтэй статистикийн програм ашиглахыг төдийлөн хүсдэггүй хэрэглэгчид олон байгааг харгалзан Agilent компани MPP-ийг хэрэглэхэд хялбар, багажинд суурилсан (instrument-centric) байдлаар хөгжүүлсэн. Өмнө дурдсанчлан, найдвартай урьдчилан таамаглах загвар боловсруулахад шинжлэх ухааны мэдлэг болон аналитик ур чадвар зайлшгүй шаардлагатай хэвээр байна. Харин дараагийн шат болох ангиллын урьдчилан таамаглах загварыг ажиллуулах үйл явц нь төвөгтэй байх ёсгүй. Ийм зорилгоор LC/Q-TOF ангиллын загварын шинжилгээг автоматжуулах “Classifier” хэрэгслийг боловсруулсан. Эцэст нь, гаргасан үр дүнгийн статистикийн хүчин чадлыг (statistical power) бие даан шалгах нь маш чухал юм. Туршилтын үр дүнгийн статистикийн хүчин чадлыг баталгаажуулахад зориулсан бие даасан power analysis програмууд байдаг. Post-hoc power analysis нь

туршилтад ашигласан дээжийн хэмжээнээс хамааран үр дүнгийн статистикийн хүчин чадлыг тооцоолдог. Энд “хүчин чадал” гэдгээр тухайн тодорхой альтернатив таамаглал үнэн байх үед тэг таамаглалыг (null hypothesis) няцаах магадлалыг ойлгоно.

Ангиллыг урьдчилан таамаглах / ангилах

Нэгдүгээрт, олон хувьсагчтай статистик нь дээжийн ангиллуудын хооронд ялгааг хамгийн сайн гаргаж өгөх өгөгдлүүдийг (бүлгээр эсвэл шинж чанараар) тодруулж өгдөг. Үүний дараа эдгээр урьдчилан таамаглах шинжүүдийг ашиглан дээжийн ангиллыг урьдчилан таамаглах (SCP, Sample Class Prediction) загварыг боловсруулдаг. Ийм учраас SCP-г “хяналттай сургалт” (supervised learning) гэсэн өөр нэршлийг өгсөн нь ойлгомжтой. Зарим тохиолдолд ангиллуудыг ялгаж байгаа мэт харагдах нэгжүүдийн жагсаалт байж болох ч бодит SCP загвар байгуулахад тохиромжгүй байх боломжтой. Загвар нь дээж хоорондын жинхэнэ хамаарлыг илэрхийлэхийн оронд сургалтын өгөгдлийн санамсаргүй алдааг тайлбарлаж байгаа нөхцөлийг өгөгдөлд хэт тааруулах (overfitting) гэж нэрлэдэг.

Ангиллын урьдчилан таамаглах (SCP) загварын чанар ба өгөгдөл боловсруулах

Ангиллын урьдчилан таамаглах (SCP) загварын чанар ба өгөгдөл боловсруулах

Хамгийн өндөр нарийвчлалтай SCP (Sample Class Prediction) загвар гаргахын тулд өгөгдлийн чанар маш чухал үүрэгтэй. Өндөр чанартай өгөгдөл нь дээжүүдэд тохирсон зөв шүүлт болон урьдчилан таамаглах загварыг бүтээх боломжийг бүрдүүлдэг. SCP загвар нь өгөгдлийг зөв шүүж

боловсруулсан нөхцөлд хамгийн сайн үр дүнг өгдөг. Олон хувьсагчт статистикийн хэсэгт дурдсанчлан Agilent компани Profinder програмыг давталтат (recursive) өгөгдөл ялган авахад зориулан хөгжүүлсэн бөгөөд энэ нь судлаачийн үнэлэх шаардлагатай хуурамч сөрөг болон хуурамч эерэг үр дүнгийн тоог бууруулахад тусалдаг. Энэхүү хэрэгсэл нь скан болон бүрэн спектрийн (full-spectrum) масс спектрийн өгөгдөлтэй ажиллах боломжтой. Үүнтэй адил, 4300 гар буюу зөөврийн FTIR-ээс эхлээд 8700 LDIR химийн дүрслэлийн систем хүртэлх инфра улаан (IR) өгөгдөлд Agilent компани MicroLab Expert програмд хемометр болон урьдчилан таамаглах нэмэлт модулиудыг санал болгодог. Эдгээр нь өгөгдлийг боловсруулах, шинжилгээ хийх, загварчлах үйл явцыг илүү үр ашигтай болгоход чиглэгдсэн байдаг.

Олон төрлийн урьдчилан таамаглах загваруудыг ашигласнаар үнэлгээ хийх болон тохируулга (customization) хийх боломж бүрддэг. Учир нь загвар бүр тодорхой нөхцөлд илүү тохиромжтой онцлог шинжүүдтэй байдаг:

•**Partial Least Squares Discriminant Analysis (PLS-DA)** буюу Статистик болон машин сургалтын арга бөгөөд **өгөгдлийг ангилах (classification)** зорилготой ашиглагддаг, **хэсэгчилсэн, бага квадратыг ялгаварлах шинжилгээ**. Хэт ялгаралтай утгууд (outliers) нь үр дүн дээр ихээхэн нөлөө үзүүлж, загварын ажиллагааг алдагдуулах эрсдэлтэй. Өгөгдлийн чанар тогтвортой, мөн энгийн загвараар ангиллуудыг ялгах боломжтой нөхцөлд сайн ажилладаг.

•**Support Vector Machine (SVM)** Энэ арга нь давхцаж буй (overlapping) дээжийн ангиллуудтай ажиллахад тохиромжтой. Алгоритм нь дээж бүрийг 2 буюу 3 хэмжээст орон зайд цэг болгон дүрслэн авч үздэг. Хэрэв ангиллуудыг тусгаарлах олон хавтгай боломжтой бол тэдгээрийн хоорондох заагийг хамгийн их болгох байдлаар хамгийн оновчтойг тодорхойлж гаргадаг.

•**Naïve Bayesian (Наив Байесийн арга)** Энэ арга нь ангиллууд бие биенээсээ үл хамааралтай (class conditional independence) гэж үздэг. Ангилал тус

бүрийн дотоод хэлбэлзлийг тодорхойлоход л хангалттай тул цөөн шинжтэй өгөгдөл дээр ажиллах боломжтой.

Шийдвэрийн мод ба нейрон сүлжээ, мөн загвар баталгаажуулалт

•Шийдвэрийн мод (Decision Tree): Энэ арга нь шинж чанарууд ихэнх эсвэл бүх дээжид илэрдэг тохиолдолд сайн ажилладаг. Ангиллуудыг ялгахдаа “хэрэв–тэгвэл–эсвэл” (if–then–else) дараалсан шийдвэрүүдээр дамжуулан ангилдаг.

•Neural Network: Ангиллуудын хоорондын хамаарал нарийн төвөгтэй эсвэл тодорхойгүй үед ашиглахад тохиромжтой. Өгөгдөлд хоёр ба түүнээс дээш ангилал байгаа нөхцөлд ангилал хийхэд сайн сонголт болдог.

Ерөнхийдөө урьдчилан таамаглах загварыг бүтээсний дараа баталгаажуулах хоёр үндсэн арга байдаг: Leave-one-out арга: Ангилал бүрээс нэг өгөгдлийн файлыг сургалтын багцаас хасна. Дараа нь тэр файлыг боловсруулсан загвараар ангилна. Энэ үйл явцыг бүх файлуудад давтан хэрэглэнэ. Үр дүнд нь confusion matrix (ангиллын гүйцэтгэлийн хүснэгт) үүсч, сургалтын өгөгдөл загварт хэр сайн тохирч байгааг харуулна. Нөгөө аргыг нь N-fold cross validation арга буюу Сургалтын өгөгдлийг санамсаргүйгээр N бүлэгт хувааж ээлжлэн тест хийж баталгаажуулах арга гэдэг. Энэ үед сургалтын өгөгдлийг санамсаргүйгээр N бүлэгт хуваана. Нэг бүлгийг тестэд ашиглаж, бусдыг нь загвар сургахад ашиглана. Энэ процессыг N удаа давтаж, эцэст нь confusion matrix гаргана. Ерөнхийдөө $N = 3$ байхад хангалттай гэж үздэг.

Загварыг бүтээж, сургаж, баталгаажуулсны дараа заавал мэдэгдэж буй (known) дээжүүдээр дахин баталгаажуулах хэрэгтэй. Учир нь эдгээр дээжүүд нь сургалтын өгөгдлөөс бүрэн хараат бус байх ёстой бөгөөд загвар бодит нөхцөлд зөв ангилж чадах эсэхийг баталгаажуулдаг.

Олон үе шат байдаг бөгөөд энэ бүх үйл явц нь олон хувьсагчийн статистикийн туршлагагүй судлаачдад нэлээд төвөгтэй мэт санагддаг. Ийм хүмүүст зориулж, хяналттай сургалтын загвар боловсруулахад шинж чанарыг илрүүлэх, ач холбогдлыг шинжлэх, загвар байгуулах, шалган баталгаажуулах зэрэг үйл явцыг нэг дор нэгтгэсэн удирдамж бүхий ажлын урсгалын хувилбарууд болон хэрэгслүүд байдаг.

Agilent-ийн зорилго нь хэрэглэгчдэд дээж бэлтгэх бүтээгдэхүүн, аналитик багаж хэрэгсэл, программ хангамж, ажлын урсгал, дэмжлэгийг багтаасан цогц шийдлүүдийг хүргэхэд оршдог. Энэхүү гарын авлага нь хүнсний луйврыг илрүүлэхэд хамгийн түгээмэл хэрэглэгддэг аргуудыг үнэлэхэд академик судлаачдад туслах зорилготой бичигдсэн. Үүнд Agilent Resolve Raman систем болон 4300 зөөврийн FTIR зэрэг гар буюу зөөврийн, авч явах боломжтой төхөөрөмжүүдийг ашигласан, талбайд шууд хэрэглэх спектрометрийн аргуудыг хамарсан. Мөн Agilent 2100 Bioanalyzer системийг лабораторид суурилсан геномын шинжилгээний аргыг тайлбарлаж, ДНХ нь аль хэдийн гэмтсэн, боловсруулсантад орсон дээжийг шинжилж загасыг нарийвчлалтай тодорхойлох боломжтой гэдгийг харуулсан. Түүнчлэн ул мөр элементүүдийн шинжилгээнд үндэслэн гарал үүслийг тогтоох шинжилгээнд 7900 ICP-MS болон зардал багатай 5110 ICP-OES зэрэг багажуудын ачаар урьд өмнөхөөс илүү хялбар болсон гэдгийг онцолсон. Agilent нь нэгж түвшний болон өндөр нягтралтай масс спектрометрийн (MS) суурьтай хүнсний ангиллын аль алинд нь тохирсон шийдлүүдийг санал болгодог.

Agilent нь нэгж болон өндөр нягтралтай масс спектрометр (MS)-д суурилсан хүнсний ангилалд аль алинд нь тохирсон сайн шийдлүүдийг санал болгодог. 8890 GC-ийг 5977B нэг квадрополь MS-

тэй хослуулснаар спектрийн санг ашиглан дэгдэмхий болон хагас дэгдэмхий хольц бодисуудыг илрүүлэх боломжтой. Agilent 6546 LC/QTOF нь дэгдэмхий бус бохирдуулагчдыг шинжлэхэд зориулагдсан өндөр нарийвчлалтай, үнэн зөв масс тодорхойлолттой судалгааны багаж юм. Agilent нь мөн квадрополь болон Time-of-Flight дээр суурилсан багажуудад тохирсон масс спектрометрийн өгөгдлийг давтан шинжлэх боломжтой MassHunter Profinder програм хангамжийг багтаасан дээж ангилах ажлын урсгалын шийдлийг санал болгодог. Түгээмэл тохиолддог хүнсний хольц болон харшил үүсгэгчдэд зориулсан боловсруулсан, үнэн зөв масс болон нэгж массын сангууд бий. Agilent-ийн нь Mass Profiler Professional зэрэг багаж төвтэй статистикийн хэрэгслүүд болон хэрэглэгчдэд ээлтэй MassHunter Classifier програмыг санал болгож, судлаачдад өөрсдийн дээжийн ангиллын загварыг боловсруулах, мөн дээжийн чанар зэрэг үзүүлэлтүүдийг урьдчилан таамаглах боломжийг олгодог.

Ишлэлүүд

1. Barboza, D.; Barrionuevo, A. Filler in Animal Feed Is Open Secret in China. *The New York Times* 30 April **2007**.
2. Litzau, J. J.; Mercer, G. E.; Mulligan, K. J. GC-MS Screen for the Presence of Melamine, Ammeline, Ammelide, and Cyanuric Acid. v. 2.1, *FDA Center for Veterinary Medicine*, original posting May 5, **2007**.
3. Bhalla, V.; *et al.* Melamine Nephrotoxicity: an Emerging Epidemic in an Era of Globalization *Kidney International* **2009**, 75, 774–779.
4. GC-MS Screen for the Presence of Melamine, Ammeline, Amelide, and Cyanuric Acid. *U.S. Food and Drug Administration*, LIB No. 4423, vol. 4, October **2008**.
5. FDA Notice of Public Meeting on Economically

- Motivated Adulteration. *74 Fed. Reg.* 15,497 (April 6, **2009**).
6. Frankel, E. N.; *et al.* Tests Indicate That Imported “Extra Virgin” Olive Oil Often Fails International and USDA Standards. *UC Davis Olive Center*, July **2010**.
7. Cord, C. 80 Percent is the New 69 Percent. *Olive Oil Times* Nov. 30, **2016**.
8. Ayton, J.; Mailer, R. J.; Graham, K. The Effect of Storage Conditions on Extra Virgin Olive Oil Quality. *RIRDC* April **2012**, 12/024.
9. Morales, M. T.; Luna, G.; Aparicio, R. S. Comparative Study of Virgin Olive Oil Sensory Defects. *Food Chem.* **2005**, 91(2), 293–301.
10. Stein, S. E.; Scott, D. R. Optimization and Testing of Mass Spectral Library Search Algorithms for Compound Identification. *J. Amer. Soc. Mass Spectrom.* **1994**, 5(9), 859–866.
11. Taro, Q.; *et al.* New Investigator Tools for Finding Unique and Common Components in Multiple Samples with Comprehensive Two-Dimensional Chromatography. *Chromatography Today* **2018**, 13–18.
12. Smith, C. A.; *et al.* XCMS: Processing Mass Spectrometry Data for Metabolite Profiling Using Nonlinear Peak Alignment, Matching, and Identification. *Anal. Chem.* **2006**, 78(3), 779–782.
13. Hjelmeland, A. K.; *et al.* Characterizing the Chemical and Sensory Profiles of United States Cabernet Sauvignon Wines and Blends. *Am. J. Enol. Vitic.* **2013**, 64(2), 169–179.
14. Bradbury, L. M.T.; *et al.* The Gene for Fragrance in Rice. *Plant Biotechnol. J.* **2005**, 3, 363–370.
15. Bergman, C. J.; *et al.* Rapid Gas Chromatograph Technique for Quantifying 2-Acetyl-1-Pyrroline and Hexanal in Rice (*Oryza sativa*, L). *Cereal Chem.* **2000**, 77(4), 454–458.
16. Grimm, C. C.; *et al.* Screening for 2-Acetyl-1-Pyrroline in the Headspace of Rice using SPME/GC-MS. *J. Agric. Food Chem.* **2001**, 49, 245–249.
17. Yannell, K. E.; Cuthbertson, D. Food Authenticity Testing with the Agilent 6546 LC/Q-TOF and MassHunter Classifier. *Agilent Technologies Application Note*, publication number 5994-0694EN, March **2019**.
18. WTO Analytical Index, *TRIPS Agreement Articles* **2018** 22, 23.
19. Ibanez, J. G.; *et al.* Metals in Alcohol Beverages: A Review of Sources, Effects, Concentrations, Removal, Speciation, and Analysis. *J. Food Compos. Anal.* **2008**, 21, 672–683.
20. Förstel, H. The Natural Fingerprint of Stable Isotopes – Use of IRMS to Test Food Authenticity. *Anal. Bioanal. Chem.* **2007**, 388, 541–544.
21. Drivelos, S. A.; Georgiou, C. A. MultiElement and Multisotope-Ratio Analysis to Determine the Geographic Origin of Foods in the European Union. *Trends Anal. Chem.* **2012**, 40, 38–51.
22. Nelson, J.; Hopfer, H. Authentication of Specialty Teas: An Application Note. *Food Qual. Saf.* **2019**, December/January, 32–33.
23. Woods, G. Measurement of Trace Elements in Malt Spirit Beverages (Whisky) by 7500cx ICP-MS. *Agilent Technologies Application Note*, publication number 5989-7214EN, August **2007**.
24. Ellis, D. I.; *et al.* Through-Container, Extremely Low Concentration Detection of Multiple Chemical Markers of Counterfeit Alcohol Using a Handheld SORS Device. *Sci. Rep.* **2017**, 7, 12082.
25. Moore, J. C.; Spink, J.; Lipp, M. Development and Application of a Database of Food Ingredient Fraud and Economically Motivated Adulteration from 1980 to 2010. *J. Food Sci.* **2012**, 77(4), R118–R126.
26. Santos, P. M.; Pereira-Filho, E. R.; Rodriguez-Saona, L. E. Application of Hand-Held and Portable Infrared Spectrometers in Bovine Milk Analysis. *J. Agric. Food Chem.* **2013**, 61, 1205–1211.
27. Pasquini, C. New Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications. *J. Braz. Chem. Soc.* **2003**, 14(2), 198–219.
28. Muthayya, S.; *et al.* An Overview of Global Rice Production, Supply, Trade, and Consumption. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* **2014**, 1324, 7–14.
- Vemireddy, L. R.; *et al.* Review of Methods for the Detection and Quantification of Adulteration of Rice: Basmati as a Case Study. *J. Food Sci. Technol.* **2015**, 52(6), 3187–3202.
29. Kim, S. S.; *et al.* Authentication of Rice Using Near-Infrared Reflectance Spectroscopy. *Cereal Chem.* **2003**, 80(3), 346–349.
30. Teye, E.; *et al.* Innovative and Rapid Analysis for Rice Authenticity Using Hand-Held NIR Spectrometry and Chemometrics. *Spectrochim. Acta A* **2019**, 217, 147–154.
31. Yu, Y.; *et al.* Accuracy and Stability Improvement in Detecting Wuchang Rice Adulteration by Piece-Wise Multiplicative Scatter Correction in the Hyperspectral Imaging System. *Anal. Methods* **2018**, 10, 3224–3231.
32. Izake, E. L. Forensics and Homeland Security Applications of Modern Portable Raman Spectroscopy. *Forensic Sci. Int.* **2010**, 202(1-3), 1–8.
33. Dooley, J.; *et al.* Improved Fish Species Identification by the Use of Lab-on-a-Chip Technology. *Food Control* **2005**, 16, 601–607.
34. Dooley, J. J.; *et al.* Fish Species Identification Using PCR-RFLP

- Analysis and Lab-on-Chip Capillary Electrophoresis: Application to Detect White Fish Species in Food Products and an Interlaboratory Study. *J. Agric. Food Chem.* **2005**, 53, 3348–3357.
35. Hebert, P. D.; *et al.* Biological Identifications Through DNA Barcodes. *Proc. Biol. Sci.* **2003**, 270(1512), 313–21.
36. Ratnasingham, S.; Hebert, P. D. BOLD: The Barcode of Life Data System (www.barcodinglife.org). *Mol. Ecol. Notes* **2007**, 7, 355–364.
37. Handy, S. M.; *et al.* Evaluation of the Agilent Technologies Bioanalyzer-Based DNA Fish Identification Solution. *Food Control* **2017**, 73, 627–633.
38. Cespedes, A.; *et al.* Identification of Flatfish Species Using Polymerase Chain Reaction (PCR) Amplification and Restriction Analysis of the Cytochrome b Gene. *J. Food. Sci.* **1998**, 63, 206–209.
39. Dooley, J. J.; *et al.* Improved Fish Species Identification by the Use of Lab-on-a-Chip Technology. *Food Control* **2005**, 16, 601–607.
40. Wattoo, J. I.; *et al.* DNA Barcoding: Amplification and Sequence Analysis of *rbcl* and *matK* Genome Regions in Three Divergent Plant Species. *Adv. Life Sci.* **2016**, 4(1), 3–7.
41. CBOL Plant Working Group. A DNA barcode for land plants. *PNAS* **2009**, 106(31), 12794–12797.
42. Garrett, S.; Clarke, M. Use of the Agilent 2100 Bioanalyzer for Basmati Rice Authenticity Testing. *Agilent Technologies Application Note*, publication number 5989-6836EN, **2007**.
43. Wong, E. H.; Hanner, R. H. DNA Barcoding Detects Market Substitution in North American Seafood. *Food Res. Int.* **2008**, 41(8), 828–837.
44. Xing, R-R; *et al.* Application of Next Generation Sequencing for Species Identification in Meat and Poultry Products: A DNA Metabarcoding Approach. *Food Control* **2019**, 101, 173–179.
- Giusta, A.; *et al.* Seafood Identification in Multispecies Products: Assessment of 16S rRNA, *cytb*, and COI Universal Primers' Efficiency as a Preliminary Analytical Step for Setting Up Metabarcoding Next-Generation Sequencing Techniques. *J. Agric. Food Chem.* **2017**, 65(13), 2902–2912.
45. Dymerski, T.; Chmiel, T.; Wardencki, W. Invited Review Article: An Odor-Sensing System—Powerful Technique for Foodstuff Studies. *Rev. Sci. Instrum.* **2011**, 82, 111101–111132.
46. Śliwińska, M.; *et al.* Food Analysis Using Artificial Senses. *J. Agric. Food Chem.* **2014**, 62, 1423–1448.
47. Pillonel, L.; *et al.* Analytical Methods for the Determination of the Geographic Origin of Emmental Cheese: Volatile Compounds by GC/MS-FID and Electronic Nose. *Eur. Food Res. Technol.* **2003**, 216, 179–183.
48. Bertelli, D.; *et al.* Detection of Honey Adulteration by Sugar Syrups Using One-Dimensional and Two-Dimensional High-Resolution Nuclear Magnetic Resonance. *J. Agric. Food Chem.* **2010**, 58, 8495–8501.
49. Faul, F.; *et al.* Statistical power analyses using G*Power 3.1: Tests for Correlation and Regression Analyses. *Behav. Res. Methods* **2009**, 41(4), 1149–1160.
50. Johnson, W. E.; Li, C. Adjusting Batch Effects in Microarray Expression Data Using Empirical Bayes Methods. *Biostatistics* **2007**, 8:1, 118–127. Schultz-Trieglaff, O.; *et al.* Statistical Quality Assessment and Outlier Detection for Liquid Chromatography-Mass Spectrometry Experiments. *BioData Mining* **2009**, 2:4.
51. Dunn, W.; *et al.* The Importance of Experimental Design and QC Samples in Large-Scale and MS-Driven Untargeted Metabolomic Studies of Humans. *Bioanalysis* **2012**, 4:18, 2249–2264.
52. Tautenhahn, R.; *et al.* XCMS Online: A Web-Based Platform to Process Untargeted Metabolomic Data. *Anal. Chem.* **2012**, 84(11), 5035–5039.
53. Styczynski, M. P.; *et al.* Systematic Identification of Conserved Metabolites in GC/MS Data for Metabolomics and Biomarker Discovery. *Anal. Chem.* **2007**, 79, 966–973.
54. Smilde, A. K.; *et al.* Metabolomics in Practice: Successful Strategies to Generate and Analyze Metabolic Data. M. Lämmerhofer; W. Weckwerth, Eds. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag & Co., 2013, p. 266.

www.agilent.com/chem

This information is subject to change without notice.