

Multivariate curve resolution (MCR)

روش MCR به خانواده‌ای از روش‌های تفکیک گفته می‌شود که برای توصیف اطلاعات مربوط به هر جزء، در سیستم‌های چند جزئی به کار می‌روند و در واقع این توانایی را دارد که اطلاعات خالص مربوط به هر جزء را از مجموعه‌ی مخلوط اطلاعات استخراج کند.

در این روش تلاش می‌شود تا یک مدل خطی از مشارکت هر کدام از اجزای مجزا، تنها با کمک اندازه‌گیری‌های خام آزمایشگاهی به دست آید و نوع و اثر هر جزء تعیین شود. با وجود تمام تفاوت‌ها در ذات سیستم‌های چند جزئی، تغییرات در اطلاعات خروجی آزمایشگاهی از چنین سیستمی می‌تواند به عنوان یک ترکیب خطی از پاسخ اجزای خالص در نظر گرفته شود. برای توصیف سیستم‌های چند جزئی با کمک ریاضی و آمار به نوعی از داده‌های ریاضی مورد نیاز است که به اندازه کافی بین اجزاء اختلاف‌گذار باشد. این نوع اطلاعات به شکل داده‌های درجه دوم معروفند و معمولاً از تلفیق سیستم‌های کروماتوگرافی با سیستم‌هایی چون طیف سنج جرمی، آشکارسازهای آرایه دیودی و یا FT-IR بدست می‌آیند. اطلاعات در این گونه سیستم‌ها در دو جهت دریافت می‌شود. معمولاً به علت پیچیدگی نمونه‌ها و یا حتی نیاز به انجام آنالیزهای سریع تر، مشکل همپوشانی طیفی در این نوع آنالیزها وجود دارد. در مورد این گونه از نمونه‌ها، تفکیک طیفی برای به وجود آمدن امکان شناسایی کیفی و اندازه‌گیری اجزاء، به عنوان هدف اصلی در آنالیز این نمونه‌ها در نظر گرفته می‌شود. اطلاعات جمع‌آوری شده از چنین سیستم‌هایی به صورت یک ماتریس اطلاعات جمع‌آوری می‌شود. در چنین ماتریسی یک جهت مربوط به تغییر ترکیب در سیستم است که جهت شستشو یا فرایند نیز نامیده می‌شود و جهت دیگر مربوط به تغییر پاسخی است که از سیستم دریافت می‌شود.

در روش MCR یک پاسخ دستگاهی کلی مربوط به چند جزء که با همدیگر همپوشانی کرده‌اند به پاسخ‌های خالص مربوط به هر جزء شکسته شده و تجزیه می‌شوند. پاسخ کلی به دست آمده به شکل ماتریس X به دو ماتریس محصول C و S^T شکسته می‌شود. هر کدام از این ماتریس‌ها مربوط به پاسخ‌های خالص اجزای تشکیل دهنده سیستم می‌باشد. ماتریس C به عنوان پروفایل غلظتی شناخته شده و پروفایل غلظتی هر جز را نسبت به زمان نشان می‌دهد که در واقع به شکل کروماتوگرام اجزای مخلوط است. ماتریس S^T پروفایل طیفی هر کدام از اجزاء را نشان می‌دهد. به طور کلی این روش شامل مراحل پیش پردازش داده‌های اولیه، تخمین تعداد اجزاء و به دست آوردن یک برآورد اولیه از یکی از ماتریس‌های C یا S^T می‌باشد. سپس مراحل بهینه سازی برای به دست آوردن ماتریس‌های C یا S^T با کمک روش حداقل مربعات تکرار شونده انجام می‌شود. در نهایت می‌توان از ماتریس C برای آنالیز کمی و از ماتریس S^T برای آنالیز کیفی اجزاء استفاده کرد.