

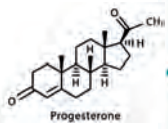
Example	Identification confidence	Minimum data requirements
 Progesterone	Level 1: Confirmed structure by reference standard	MS, MS ² , RT, Reference Std.
	Level 2: Probable structure a) by library spectrum match b) by diagnostic evidence	MS, MS ² , Library MS ² MS, MS ² , Exp.data
	Level 3: Tentative candidate structure, substituent, class	MS, MS ² , Exp. data
	Level 4: Unequivocal molecular formula <chem>C21H30O2</chem>	MS isotope/adduct
	Level 5: Exact mass of interest [M+H] ⁺ at 315.2324 m/z	MS

FIGURA 4. Nivells de confiança en la identificació de compostos en espectrometria de masses d'alta resolució.

FONT: Elaboració de Cristina Balcells Nadal.

la computació avançada i l'aprenentatge automàtic, per a ajudar a identificar els compostos descoberts en anàlisis no dirigits (Dührkop *et al.*, 2015).

2.2. L'EXPOSOMA URBÀ

L'any 2030, més del 80 % de la població europea viurà en un entorn urbà. A mesura que la urbanització s'accelera a tot el món, cada cop esdevé més crucial entendre la complexa xarxa d'exposicions dins de l'entorn urbà. L'exposoma urbà encapsula la infinitat de factors que configuren la salut dels habitants de les ciutats, més enllà de les avaluacions de risc ambientals tradicionals. En l'enrenou de la vida urbana, els individus estan sotmesos a una gran varietat d'exposicions, des de la contaminació de l'aire i el soroll, fins al desert alimentari (zona on l'accés a aliments assequibles i saludables és limitat) i les disparitats socioeconòmiques. Tradicionalment, la investigació sanitària en entorns urbans ha destacat exposicions com l'entorn social, la contaminació de l'aire interior i exterior, el soroll, la calor, la manca d'espais verds i blaus o la contaminació de l'aigua i els aliments. L'aplicació del concepte *exposoma* al domini de l'entorn urbà ofereix l'oportunitat d'establir les interrelacions entre aquestes característiques i les seves causes i investigar com aquestes contribueixen conjuntament a la salut individual.

L'avaluació de les exposicions exògenes en la població pot proporcionar estimacions d'exposició a escala local en àrees geogràfiques àmplies, la qual cosa permet grans investigacions epidemiològiques que vinculen les exposicions amb els resultats de salut. En general, l'avaluació de l'exposició en la població es basa en la

integració de tecnologies de sensors amb enfocaments de modelització matemàtica.

Teledetecció

La teledetecció és la ciència d'obtenir informació sobre objectes o àrees des de la distància, normalment des d'avions o satèl·lits. Les tècniques de teledetecció poden identificar exposicions relacionades amb l'entorn urbà, com ara la contaminació de l'aire, la temperatura i els espais verds. Les noves tecnologies, com el TROPOspheric Monitoring Instrument, proporcionen dades amb més resolució espacial i temporal sobre la qualitat de l'aire, a més de dades sobre components atmosfèrics específics (per exemple, formaldehid, metà i diòxid de nitrogen). Els satèl·lits també poden estimar l'índex de vegetació de diferència normalitzada, un indicador de l'espai verd —que es pot integrar amb imatges de Google Street View per a una avaluació exhaustiva de la qualitat, l'accessibilitat i l'estètica de l'entorn urbà— i l'exposició nocturna a la llum artificial exterior. Tot i que les dades de teledetecció estan cada cop més disponibles a resolucions temporals i espacials més altes, aquestes mesures no es tradueixen necessàriament en l'exposició des del punt de vista individual, la qual cosa requereix validació i integració amb informació de cada individu.

Detecció mòbil i fixa

La informació de l'exposició externa sovint es mostra en un nombre limitat d'ubicacions, generalment com a part d'una xarxa nacional d'estacions de mesura o mitjançant campanyes de mesura dissenyades específicament en estudis. Tots dos enfocaments tenen limitacions: les xarxes nacionals (per exemple, les de la contaminació de l'aire) tenen una cobertura geogràfica limitada, mentre que les mesures específiques d'estudi se solen dur a terme durant un període curt. Per a proporcionar informació espacial densa durant un període llarg, una solució és utilitzar xarxes de sensors distribuïts, que consisteixen en sensors de baix cost despleats en gran nombre en entorns urbans. Tot i que l'aplicació d'aquestes xarxes encara és limitada a causa de la validesa insuficient dels sensors de baix cost, per a millorar la validesa i els preus, els avenços tecnològics permetran obtenir informació detallada sobre la qualitat de l'aire, el soroll i la temperatura en entorns urbans. Amb aquesta finalitat també s'han proposat plataformes mòbils de monitoratge, que es poden proveir d'equips de mesura d'alta qualitat que cobreixin àrees geogràfiques grans. Fins ara, les campanyes de mesura mòbils han estat petites, però diverses iniciatives recents han instal·lat sensors en vehicles de flota conduïts per professionals, inclosos els tramvies de Karlsruhe (Alemanya) i

Zúric (Suïssa), i els cotxes de Google Street View a ciutats europees, inclosa Barcelona. Aquesta darrera iniciativa va donar lloc a mapes de concentració diürna anuals sense precedents a tota la ciutat de Barcelona, incloent-hi de monòxid i diòxid de nitrogen i de carboni negre a una escala espacial de 30 m.



FIGURA 5. Campanya del cotxe AirView, feta per Google, per a recollir dades d'alta resolució de contaminació atmosfèrica a tot tipus de carreteres de Barcelona en el marc del projecte EXPANSE, liderat per la Universitat d'Utrecht en col·laboració amb ISGlobal. Aquesta campanya contribueix a crear un mapa hiperlocal que proporcioni la distribució espacial de diferents contaminants: diòxid de nitrogen, partícules ultrafines (UFP) i carboni negre (BC).
 FONT: Cathryn Tonne i Mark Nieuwenhuijsen (2021), «El cotxe de Google arriba a Barcelona per mesurar la qualitat de l'aire», *Blog ISGlobal* (en línia), (20 desembre), <<https://www.isglobal.org/ca/healthisglobal/-/custom-blog-portlet/google-s-car-arrives-in-barcelona-to-measure-air-quality>>.

Modelatge

La disponibilitat de mesures de satèl·lit i informació geoespacial permet estimacions cada vegada més precises de les exposicions en la població. Ara bé, aquestes dades sovint són incompletes en temps i espai i es recullen a diferents resolucions geoespacial. Com a tals, els enfocaments de modelatge són necessaris per a concatenar informació i identificar patrons espacials estables a llarg termini a partir de dades resoltes en el temps. S'han considerat models empírics i geoestadístics, com ara models de regressió de l'ús del sòl, el krigatge i els models d'entropia màxima, i caldrà més elaboració, especialment a mesura que la resolució de dades en el temps i l'espai augmenti.

Sensors i monitors personals

Els avenços recents en tecnologies de sensors i monitors personals permeten mesures més precises i àmplies de tot l'exposoma en l'entorn extern. Les mesures personals tenen la capacitat única de quantificar amb precisió els nivells reals i la variabilitat de l'exposició de les persones. Tanmateix, fins fa poc, el cost, els inconvenients i les molèsties dels mètodes d'avaluació personal n'han impedit l'ús extensiu en la recerca.

Un estudi recent va demostrar que és possible recollir informació sobre compostos biòtics (biològics) i abiòtics (químics) simultàniament a partir d'exposicions ambientals en l'aire, en participants amb dispositius portàtils amb bomba d'aire, que van ser analitzats mitjançant tecnologies de seqüenciació de nova generació i LC-MS (Jiang *et al.*, 2018). Van trobar 2.796 fórmules úniques de l'exposoma químic, incloent-hi el repellant d'insectes dietiltoluidina (DEET), el plaguicida ometoat i el carcinogen dietilenglicol (DEG), que estaven presents a cada mostra. L'extensió de la diversitat biològica de l'aire observada en aquest estudi va ser enorme, amb més de 2.500 espècies identificades, 5,11 milions de polimorfismes d'un sol nucleòtid (SNP) en 108 espècies del sistema de tres dominis en totes les mostres. Aquest nombre és comparable al nombre de SNP avaluats al microbioma intestinal humà (101 espècies bacterianes; 3,98 milions de SNP des del punt de vista individual, 10,3 milions per a totes les mostres) (Schloissnig *et al.*, 2013).

A partir dels mateixos avenços analítics exposats a la secció anterior en metabolòmica en mostres biològiques, l'exposoma extern també es beneficia de les tecnologies LC-MS no dirigides. Permet perfilar de manera global els compostos químics presents a l'aire, l'aigua i les superfícies de l'hàbitat humà o lloc de treball (McCall *et al.*, 2019). Fins i tot s'ha proposat com una eina per a la ciència forense (Kaponi *et al.*, 2018).