

Hurtigere og bedre aroma-analyser

Aroma-analyser, som tidligere krævede dagevis af databehandling, kan nu håndteres med software, hvor AI står for det hårde arbejde.

Automatisk analyse

Gaskromatografi er et vigtigt redskab til at forstå f.eks. aroma, og det bliver anvendt i stor stil i blandt meget andet mejeribrugget. I projektet AUROMA, som er støttet af Arla Foods og af Mælkeafgiftsfonden, har vi brugt AI (kunstig intelligens) til at automatisere behandlingen af kemiske målinger fra gaskromatografi så meget som muligt. Hvad der tidligere tog en kemiker dagevis, kan nu klares på en time og med langt bedre resultater til følge. Vi har også udviklet en softwareplatform kaldet PARADISE, som industrien umiddelbart kan tage i brug.

Problemet – teknisk set

Gaskromatografi med massespektrometrisk detektion er blandt de mest almindelige teknikker til avanceret kemisk analyse. Det er f.eks. ideelt til at måle hundredvis af aromakomponenter og er dermed essentielt, hvis man ønsker at forstå kvaliteten af komplekse fødevarer. Desværre er selve behandlingen af de data, der kommer ud af et sådant

instrument, meget tidskrævende, og det er ikke usædvanligt, at det tager en til to dage at lave målinger om til det, man egentlig ønsker: koncentrationer af usynlige kemiske komponenter. Arbejdet er manuelt, og resultatet vil ofte variere kraftigt alt efter, hvem som laver det.

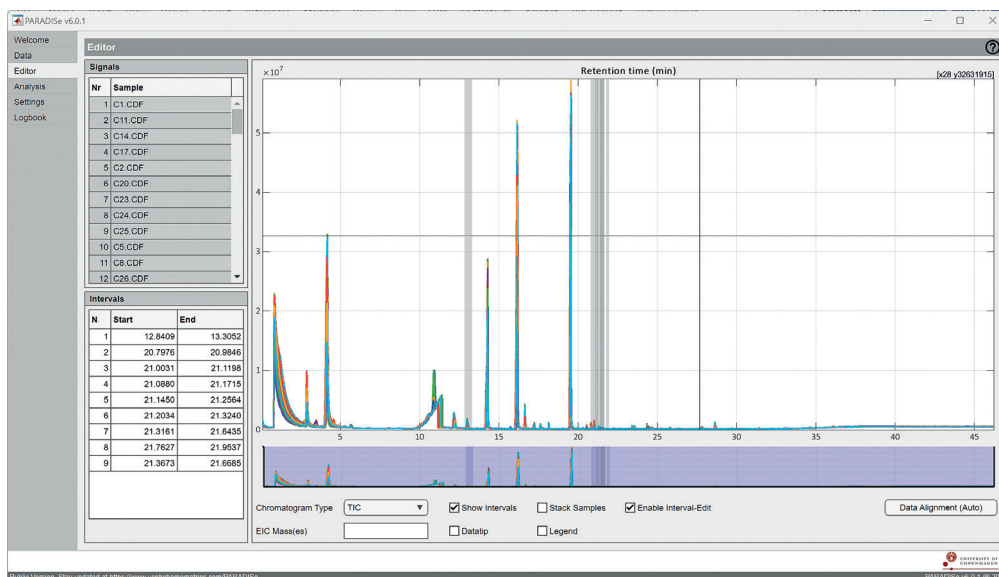
Op løsningen – teknisk set

Vi har kombineret en række datavidskabelige teknikker, der delvist er udviklet af os og delvist af andre. Ved at integrere disse teknikker kan vi automatisere databehandlingen næsten fuldstændigt. Vi har lavet et stykke software, der gør vores metode tilgængelig for alle. I softwaren kan man importere sine data fra det gaskromatografiske system. Dernæst skal man angive, hvor man mener, der er toppe i kromatogrammerne – altså hvor man mener, de kemiske komponenter kommer ud.

Dernæst starter en række beregninger, hvor matematiske modeller bruges til at adskille signalerne fra de kemiske komponenter. Resultatet



AF JESPER LØVE HINRICH OG RASMUS BRO, POSTDOC OG PROFESSOR PÅ INSTITUT FOR FØDEVARER, KØBENHAVNS UNIVERSITET. VALENTIN RAUH SENIOR RESEARCH SCIENTIST, ARLA INNOVATION CENTRE



Et kig på det nye program til at håndtere kromatografiske data. En række kromatogrammer kan ses i hovedplottet og en række intervaller er blevet valgt og vist med gråt. Programmet beregner spektre og koncentrationer i alle de intervaller, der er valgt.

Resume

Vi har udviklet matematik og software, som kan bruges til at forbedre kvaliteten af de data, man får fra gaskromatografiske analyser, og som samtidig er størrelsesordener hurtigere end de metoder, man anvender i dag.

er, at man får den relative koncentration (arealet af toppen) og massespektret af hver eneste komponent. Udover at man skal udvælge, hvor man ser toppe, skal man også angive, hvilke af de adskilte komponenter, der repræsenterer reel kemi, og hvilke der f.eks. er en basislinje. Når dette er angivet, er det blot at bede om en rapport, og så får man et excelark med alle de komponenter, man har fundet, og deres koncentration, og det vel at mærke for samtlige prøver, man har.

Og hvad betyder det?

Vi har i en tidligere artikel vist, hvordan det med traditionelle metoder tog 36 timer at påvise 48 kemiske stoffer. Med vores software kunne vi finde 135 stoffer med to timers arbejde. Men ikke nok med, at vi ofte finder to til fire gange flere stoffer med den nye metode. Vi har også eftervist, at kvaliteten af kvantificeringen samt kvaliteten af de fundne spektre er bedre, og dermed er de data, vi får ud, generelt af en bedre kvalitet. Så hvis man skal sige det meget kort, så giver PARADISE-metoden mere og bedre data end gængse alternativer og på kortere tid. ●

Gaskromatografi

Grundprincippet i gaschromatografi er det samme som i tyndtlagschromatografi nemlig at adskille indholdsstoffer i en sammensat prøve. Gaskromatografi (GC) er en ekstrem effektiv metode, der kan separere meget sammensatte prøver dog under den forudsætning, at prøven kan bringes på gasform. En anden afledt forudsætning er, at indholdsstoffernes ikke nedbrydes ved opvarmningen. Metoden er destruktiv, men til gengæld kræves kun meget små prøvemængder (mikroliter).



Projektinfo

Titel: AUROMA – Automatic analysis of aroma profiles using machine learning

Projektleder: Rasmus Bro, Institut for Fødevarevidenskab, Københavns Universitet

Deltagere: Valentin Rauh, Arla Innovation Centre

Jesper Løve Hinrich, Dillen Augustijn & Huiwen Yu, Institut for Fødevarevidenskab, Københavns Universitet

Projektperiode: 2018-2022

Hovedformål: At forbedre kvaliteten af de kemiske data, man får ud af gaskromatografi

PROJEKTER UNDER
MEJERIBRUGETS FORSKNINGSFOND