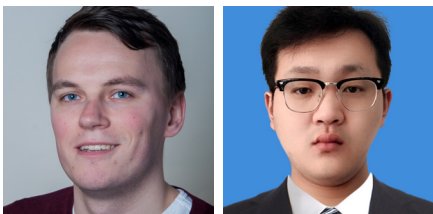


Nye projekter under Mejeribrugets Forskningsfond.

Få styr på ostens aromaprofil

Kunstig intelligens gør det muligt at automatisere og forbedre kemiske analyser dramatisk.



AF RASMUS BRO, DILLEN AUGUSTIJN, JESPER LØVE HINRICH, HUIWEN YU, MIKAEL AGERLIN PETERSEN
INSTITUT FOR FØDEVAREVIDENSKAB, KØBENHAVNS
UNIVERSITET.
VALENTIN RAUH, ARLA INNOVATION CENTRE

Når man eksempelvis udvikler nye mejeriprodukter eller ønsker at forstå, hvordan et produkt ændrer sig over tid, så er aroma ofte en central parameter. Og det er sjældent blot ét aromastof. Der kan være mange hundrede stoffer, som bidrager til at give den samlede aroma-profil, som kendetegner et produkt. For at forstå aromaen, må man først og fremmest kunne måle den; det vil sige måle mængderne af de mange kemiske komponenter.

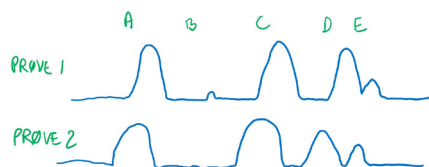
For at bestemme aroma anvender man typisk en gaskromatograf koblet til et massespektrometer – GC-MS. Det er et relativt kompliceret instrument, som på en lille time kan detektere aromastoffer fra en prøve eller fra luften omkring prøven. Desværre er målingerne som sådan ikke direkte anvendelige. For at lave målingerne om til navngivne kemiske aromakomponenter og for at bestemme mængden af hver enkelt, skal der laves et større manuelt stykke arbejde. Dette arbejde kan nemt tage dage at gennemføre, og det er selvsagt dyrt, men faktisk også uheldigt, fordi den manuelle natur gør, at resultaterne kan svinge fra gang til gang og fra person til person.

Et lille eksempel

At følge aromaprofiler over tid er et vigtigt værktøj, når vi undersøger ostemodning for at ramme den smagssammensætning, som forbrugerne ønsker. I eksemplet vi viser her, har vi analyseret tres gule oste, som blev produceret med en kombination af forskellige kulturer og tilsatte enzymer. Resultaterne bliver brugt til at undersøge, om man kan opnå den samme smagsprofil som nuværende produkter, men ved kortere modningsperioder. Dermed kan der spares både tid og penge, og samtidig åbnes muligheden for at udforske nye smagsprofiler.

Hvad gør man i dag?

Den nuværende arbejdsgang kræver, at man manuelt går igennem hver eneste potentielle kemiske komponent i hver eneste prøve. Et signal ('kromatogram') ser typisk ud, som vist her



Hver prøve giver målinger på en tidsakse hvor hver top svarer til et kemisk stof. Stofferne kommer ud fra gaskromatografens kolonne til forskellige tidspunkter og bliver detekteret af massespektrometeret. Massespektrometeret giver et 'fingerprint', som kan fortælle hvilket stof, det er. Over en times målinger kommer der i størrelsesordenen hundrede toppe ud. For hver prøve og hver top er der så nogle korrektioner såsom at fjerne baggrundsstøj, tidlige forskelle og så videre. Dette kræver en del manuelt arbejde med indstillinger, og det gør at forskellige brugere ofte får forskellige resultater. Og så er det ganske tidskrævende. Det tog halvanden dag at analysere det ovennævnte datasæt, og det resulterede i information om 48 kemiske komponenter. Der var tegn på, at der var op imod hundrede komponenter, men det ville have taget omkring tre dage yderligere at finde resten. Udover det høje tidsforbrug, er der visse problemer, som er svære at håndtere, især for mennesker. For eksempel, er det vanskeligt at se om prøve to indeholder stof B. Den slags problemer klarer computeren nemt.



Traditionelle metoder



Med kunstig intelligens



Efter projekt

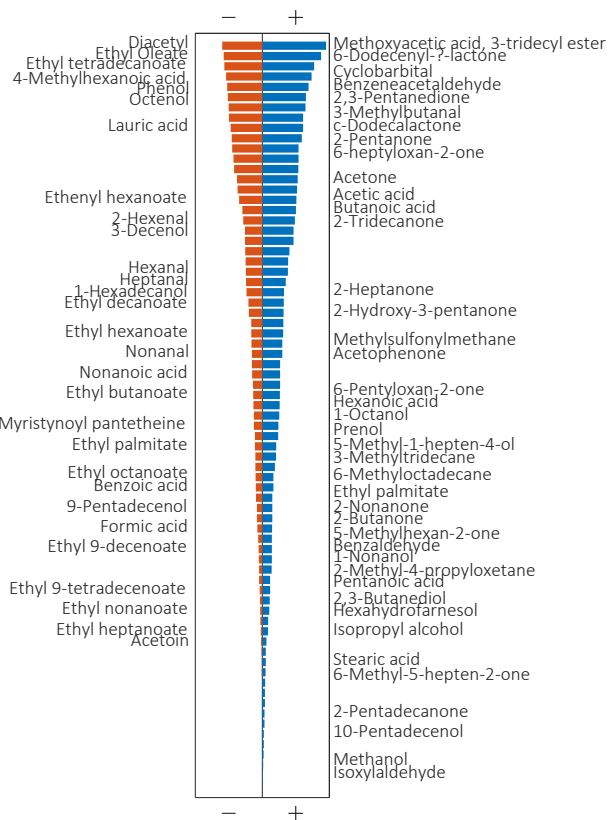


Med kunstig intelligens

Vi har udviklet en metode baseret på kunstig intelligens, der analyserer data mere automatisk end de gængse metoder. I dette projekt vil vi prøve at automatisere metoden fuldstændigt, men for indeværende kræves der stadig lidt brugeraktivitet. Dog langt mindre end de vanlige metoder. I denne nye metode, skal man ikke gå igennem sine prøver én efter én. Tværtimod, så udnytter metoden, at jo flere prøver der er, desto mere sikre resultater kan man få. For hver kemisk komponent beregnes en matematisk model, der korrigerer for tidlige forskelle, baggrundsstøj, overlap med mere. Dette er baseret på, at massespektrets fingerprint gør det muligt at skelne de forskellige bidrag selvom de kommer ud af kolonnen samtidig. Som systemet fungerer nu, kræver dette trin en vurdering af brugeren for at finde den rette model, og det kræver lidt tid – og øvelse. Men dog er det kun få beslutninger og indstillinger, som skal vurderes. For ovennævnte data kunne hele sættet analyseres på to timer. Og får vi så mere information ud af det? Det må man sige! Vi finder nu 135 i stedet for 48 stoffer. Det vil sige mere end dobbelt så meget information på langt kortere tid.

Hvad kan vi se?

Vi lavede en analyse af de 135 stoffers koncentrationer og kunne se en række interessante ting blandt andet omkring de forskellige enzymbehandlinger. Som et eksempel kan vi ud fra aromaprofilen alene bestemme, hvor lang tid prøven har været lagret. Og ikke nok med det – vi får også en forklaring på, hvad der rent faktisk sker over lagringstiden med hensyn til alle 135 aromakomponenter, som vist i figuren til højre. I figuren er de meste interessante komponenter navngivet, og det er angivet om koncentrationen stiger (+) eller aftager (-) med tiden. For aroma-komponenter i toppen af plottet ses den største effekt. Det ses for eksempel, at diacetyl (tydelig smørlugt) falder. Dette skyldes at den omdannes til acetoin (svag smørlugt). Denne falder imidlertid også, da den videreomdannes til 2,3-butanediol (ingen lugt). Dette er et typisk forløb ved lagring af ost. Ligeledes ses det, at smørsyre (butanoic acid) og valeriansyre (pentanoic acid) stiger. Begge disse stoffer bidrager til den typiske ostelugt. Men det er vigtigt at tage hensyn til, at den 'gode ostelugt' er et samspil mellem disse stoffer og mange af de andre nævnte, uden at vi nødvendigvis ved præcis hvilke. Det er derfor vigtigt, at så mange stoffer som muligt inddrages i analysen.



Summa summarum

Allerede på dette tidlige stadie i projektet, har vi fået forbedret håndtering af aromadata betragteligt. Vi arbejder i øjeblikket på at lave et brugerprogram, så alle, der ønsker det, kan anvende vores metode, og vi arbejder også på fuldstændigt at automatisere vores metode. Dette foregår i samarbejde med forskere fra Milano (Università degli Studi di Milano-Bicocca).

Projektinfo

Titel: AUROMA - Automatiseret analyse af aromaprofiler med machine learning

Projektleder: Professor Rasmus Bro, Institut for Fødevidenskabsforskning, Københavns Universitet

Projektdeltagere: Institut for Fødevidenskabsforskning, Københavns Universitet og Arla Foods.

Projektperiode: 1. marts 2019-31. marts 2021.

Formål: At automatisere dataanalysen fuldstændig ved hjælp af machine learning og kemometrisk dataanalyse. Den automatiserede metode vil ekstrahere langt mere information fra hver måling og samtidig være mere nøjagtig, fordi en automatiseret metode ikke afhænger af brugeren, som det p.t. er tilfældet.