

INTELIGENTNE RAČUNALNIŠKE METODE ZA UGOTAVLJANJE PRISTNOSTI IN DRUGIH LASTNOSTI AROM

Mitja LUŠTREK¹, Marko BOHANEČ², Biljana Mileva BOSHKOSKA², Matej CIGALE¹,
Anton GRADIŠEK¹, Lidija STROJNIK³, Bernard ŽENKO², Martin ŽNIDARŠIČ², Nives OGRINC³

Povzetek: Jabolčna aroma se zelo pogosto uporablja v mlečnih, pekovskih in žitnih izdelkih, pa tudi v pijačah in prehranskih dodatkih. Naravna aroma nastane pri proizvodnji jabolčnih koncentratov iz soka, je pa lahko proizvedena tudi umetno – z mešanjem sintetičnih spojin. Pridobivanje naravne arome je pogosto deset- in večkrat dražje od umetne, saj naravne surovine dostikrat vsebujejo nizke koncentracije zelenih spojin, poleg tega pa je njihova kakovost odvisna od dejavnikov, ki jih je težko nadzorovati, kot so vremenske razmere in bolezni rastlin. Zaradi te cenovne razlike in težavnosti razlikovanja naravnih arom od umetnih se (delno) umetne arome včasih prodajajo kot naravne. Zato smo razvili postopek za ugotavljanje pristnosti, ki temelji na koncentracijah aromatičnih spojin vzorca arome, pridobljenih s plinsko kromatografijo z masno spektrometrijo (GC-MS), in razmerjih izotopov ogljika, pridobljenih s plinsko kromatografijo, ki je prek sežigne enote sklopljena z masnim spektrometrom za analizo stabilnih izotopov lahkih elementov (GC-C-IRMS). Postopek je sestavljen iz več korakov, kjer v vsakem s pomočjo inteligentnih računalniških metod izračunamo pokazatelje »sumljivosti«. V prvem koraku preprosto preverimo odstopanje koncentracij spojin in izotopskih razmerij testnega vzorca od referenčnih vrednosti. V drugem koraku preverimo, ali se medsebojne korelacije koncentracij in izotopskih razmerij spojin v testnem vzorcu skladajo z referenčnimi. V tretjem koraku na referenčnih vzorcih zgradimo regresijske modele za koncentracijo in izotopsko razmerje vsake spojine iz koncentracij in izotopskih razmerij ostalih spojin. Napake teh modelov na testnem vzorcu so pokazatelj sumljivosti. V četrtem koraku pa na referenčnih vzorcih zgradimo klasifikacijske modele za pristnost in jih uporabimo na testnem vzorcu. Postopek preizkušamo na 33 vzorcih jabolčnih arom, od tega 18 lastne pridelave in 15 komercialnih deklariranih kot naravnih. Uspešno smo ga uporabili za določanje časa skladiščenja ter razlikovanje med aromami iz lastne pridelave in komercialnimi. Da bi ga izboljšali in preizkusili za ugotavljanje pristnosti, pa potrebujemo več vzorcev, predvsem zanesljivo potvorjenih arom.

Ključne besede: arome, kromatografija, izotopska razmerja, pristnost, regresija, klasifikacija

INTELLIGENT COMPUTER METHODS TO DETECT ADULTERATION AND OTHER PROPERTIES OF AROMAS

Abstract: Apple aroma is commonly used in dairy and bakery products, cereals, drinks and dietary supplements. Natural aroma is recovered during the production of apple juice concentrate. However, it can also be manufactured artificially, by mixing synthetic compounds. Natural aromas are often ten times or more expensive than synthetic ones, since natural raw materials commonly contain low concentrations of the desired compounds, and their quality depends on difficult-to-control factors such as weather and plant disease. Because of the price difference and difficulty of distinguishing between natural and artificial aromas, (partially) artificial aromas are sometimes sold as natural. This led us to develop a procedure to detect adulteration of aromas, which is based on the concentrations of aromatic compounds in an aroma sample as determined by gas chromatography with mass spectrometry (GC-MS), as well as carbon isotope ratios as determined by gas chromatography coupled to isotope ratio mass spectrometry by combustion unit (GC-C-IRMS). The procedure consists of multiple steps, in each of which intelligent computer methods compute indicators of "suspiciousness". In the first step, we simply compare compound concentrations and isotope ratios in a test sample with reference values. In the second step, we test whether pairwise correlations of concentrations and isotope ratios in the test sample correspond to reference values. In the third step, we use reference samples to build regression models for the concentration and isotope ratio of each compound from the remaining compounds. The errors of these models on the test sample indicate how suspicious it is. In the fourth step, we build classification models for authenticity on reference samples and test them on the test sample. The procedure was evaluated on 33 apple aroma samples, 18 from own production and 15 commercial ones declared as natural. It successfully recognized which apples were stored before processing, and distinguished own from commercial aromas. To improve the procedure and use it to detect adulteration, we need more samples, particularly samples known not to be authentic.

Key words: aromas, chromatography, isotope ratios, adulteration, regression, classification

¹ Institut »Jožef Stefan«, Odsek za inteligentne sisteme, Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, {mitja.lustrek, matej.cigale, anton.gradisek}@ijs.si

² Institut »Jožef Stefan«, Odsek za tehnologije znanja, Jamova cesta 39, 1000 Ljubljana, {marko.bohanec, biljana.mileva, bernard.zenko, martin.znidarsic}@ijs.si

³ Institut »Jožef Stefan«, Odsek za znanosti o okolju, Reaktorski center, Brinje 40, 1000 Ljubljana, {lidija.strojni, nives.ogrinic}@ijs.si