

DIY Machine Olfaction

- anvendt køkkenbordskemometri

Kemometri og gassensorer danner et godt makkerpar, som besidder interessante perspektiver inden for bl.a. kvalitetskontrol i fødevareproduktion og procesovervågning. Hardwaredelen er ikke mere kompliceret, end at den kan tilvirkes på køkkenbordet med frit tilgængelige lavpriskomponenter.

Af Michael Madsen, VoodooMetrics

Der er tidligere hér i bladet argumenteret for, at teknikken aktuelle stude for elektroniske næser næppe betyder enden på klassiske olfaktometriske analyser efter anerkendte internationale standarder foreløbig [1].

Men hvad dækker begrebet *elektronisk næse* egentlig over?

Elektroniske næser udspringer af den tekniske disciplin *machine olfaction*, som er en biologisk inspireret tilgang til analytisk vurdering/klassifikation af simple såvel som komplekse gasblandinger [2]. Typisk udgøres sensordelen i en elektronisk næse af et antal primitive gassensorer eller mere sofistikerede detektorer kendt fra det analytisk-kemiske laboratorium.

Man kan med rette spørge sig selv, hvilke praktiske anvendelser man kan forvente af disse betagende noninvasive måleinstrumenter, de elektroniske næser, der for nogle produkters vedkommende hævdes at kunne levere lugtsignaturer i nærreal-tid. Lyder identifikation af fordærvede fødevarer, monitorering af gasemissioner fra biogasanlæg eller tidlig diagnosticering af forstadier til alvorlige sygdomme tillokkende? Det er blot nogle få eksempler på de mange teknisk relevante applikationer, som er beskrevet i litteraturen. For overblikkets skyld har undertegnede samlet en del referencer til inspiration [3].

Forskere og udviklingsingeniører har været fulde af forventning siden den første egentlige elektroniske næse så dagens lys i de spæde 1980'ere. Udviklingen har i mellemtiden mestendels stået i stampe, men med de teknologiske landvindinger, der er gjort i de senere år inden for sensortechnologi, så tegner det lyst for den nærmeste fremtid. De klassiske gassensorer baseret på teknologi så som *coated polymer* (CP), *surface acoustic wave* (SAW), *quartz crystal micro balance* (QMB), samt metaloxid-halvledere (MOS) bestående af doped tin-dioxid (SnO_2) er på vej til at få følgeskab af blandt andet *micro electronic mechanical systems* (MEMS) og nanoteknologi i forskellige afskygninger. Fysikken i mange af disse sensorer er ganske fængslende, om end selv de mest udbredte gassensorer, de SnO_2 -baserede, endnu ikke er fuldt dokumenterede efter mere end fire årtier på det kommercielle marked.

Virksomheder, der beskæftiger sig professionelt med megatrenden *Internet of Things* (IoT), finder det særdeles attraktivt at inkludere en MEMS-gassensor eller to i deres IoT-enhed, der alligevel er forbundet til internettet. Data kan man altid finde et marked for. Ellers skaber man det ved at generere flere data.

Elektroniske næser

Hvor vanskeligt er det egentlig at kreere et elektronisk næseinstrument, der kan levere data af en rimelig kvalitet for overkommelige midler? Emnet er belyst ganske grundigt i den tekniske litteratur siden de tidlige 1980'ere med mere end 2.000 artikler, rapporter og datablade for de underliggende sensorteknologier. Til trods herfor er der forbavsende få kommercielle løsninger på markedet, om end talrige forsknings- og udviklingsmiljøer har været travlt beskæftigede med emnet.

En analyse af de i litteraturen beskrevne sensorteknologier afslører, at langt størsteparten af studierne er baseret på sofistikeret analyseudstyr såsom gaschromatografi koblet med massespektrometri (GC-MS), der ganske vist kan aftaste en hel del molekylære signaturer, men også er forbundet med betragtelige kalibrerings- og vedligeholdelsesomkostninger. Kan en GC-MS betragtes som en elektronisk næse, der kan implementeres uden for et laboratoriemiljø, hvor der ikke er adgang til højt specialiseret arbejdskraft? Næppe. Den afgørende parameter er enhedsprisen, der skal ned i ganske få tusinde kroner for, at industrien overhovedet gider overveje (distribuerede) elektroniske næser som erstatning for de omkostningstunge analysemetoder, der for nuværende er i anvendelse. Det kan umiddelbart virke kontraintuitivt, men det er forholdene. Vejen til design af en elektronisk næse er i forfatterens optik ganske ligetil. Det gælder om at konstruere et instrument hovedsageligt bestående af nogle gassensorer (samlet i et *array*). Gassensorerne giver hver især anledning til et respons, når de udsættes for et stimulus. Det bemærkes, at gassensorerne ikke er selektive¹ over for specifikke analytter/gasser, men udviser en høj grad af krydsfølsomhed. Kemometrien kommer derfor til undsætning, da klassiske metoder til dataanalyse sjældent bryder sig om korrelerede variable (kollinearitet i data).

Resultater fra proof-of-concept-studier

Metoden er i høj grad inspireret af arbejdsflowet for en konventionel gaschromatografisk analyse med få afgørende afvigelser:

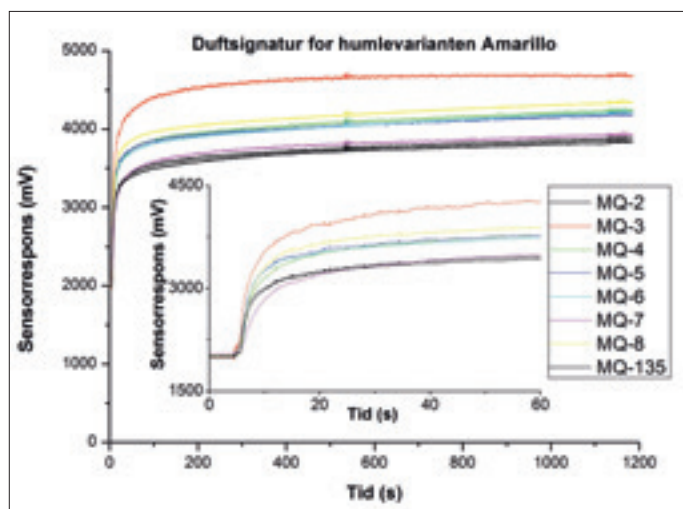
1. Gassensorarrayet tempereres i en lukket, termisk isoleret beholder for at opnå en stabil basislinje.
2. Prøven tilføres beholderen (i reglen er ingen prøveforberedelse nødvendig).
3. Der optages en lugtsignatur.
4. Prøven fjernes.
5. Beholderen ventileres.
6. Stabil basislinje retableres.

¹ Som et kuriosum bemærkes det, at konventionelle metoder i analyselaboratoriet for størstepartens vedkommende netop søger at eliminere/neutralisere tilstedeværende interferencer ud fra en univariat kalibreringsbetragtning: ét stimulus, x, giver anledning til responset, y. Kemometriske metoder tillader flere stimuli, flere x'er, at bidrage til samme målte respons, y, uanfægtet af x'ernes indbyrdes datastruktur.

Med simpel hardware for samlet EUR 75 er der udført en række proof-of-concept-studier på forskellige prøvematrixer, herunder humle, krydderier og olivenolie. De nærmere detaljer er afrapporteret andetsteds sammen med udførlig dokumentation for det samlede tekniske setup, herunder udfærdigelse af trykte kredsløbskort [4].

Case: Råvarekontrol på mikrobryggerier

En kombineret ferie- og studietur til et par mikrobryggerier i Dalarna-regionen tilbage i august belyste nogle af de problemstillinger, som den almindelige mikrobrygger i Sverige dagligt slås med. Der findes omtrent 240 bryggerier i Sverige og de 200 kan betragtes som mikrobryggerier, der med stor ildhu og ditto engagement har kastet sig over et teknisk emne, som de ingen erfaring har med. Blandt mikrobryggerens største tekniske udfordringer, efter forfatterens opfattelse, findes rengøringsvalidering og råvarekontrol. Her kommer prisbillige, noninvasive, distribuerede elektroniske næser til deres ret.

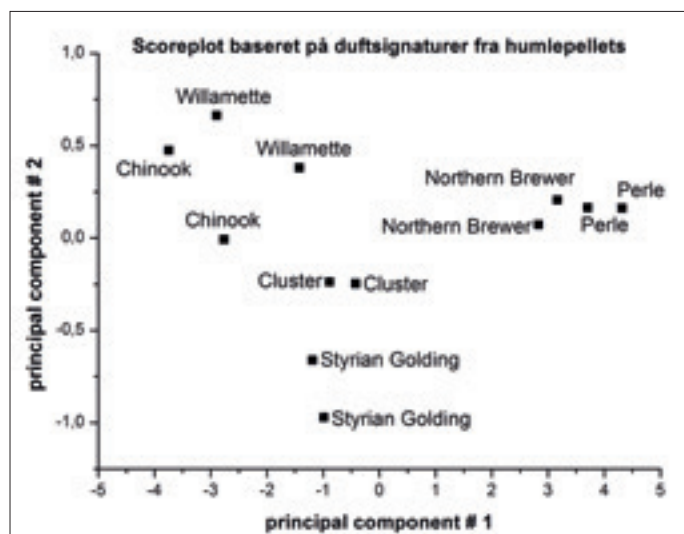


Figur 1.



Figur 3. Elektronisk næse.

Humle er en afgørende ingrediens i ølbrygning. Kvaliteten af humle er derfor relevant at kende. Imidlertid er de nødvendige kemiske analyser forbundet med omkostninger, som mikrobryggerier ikke har interesse i at afholde. Det gør imidlertid ikke problemstillingen mindre aktuel.



Figur 2.

Metodemæssigt er der flere parametre, som kan optimeres, men som et indledende proof-of-concept er klassifikationsstyrken overbevisende. Principperne for tolkning af scoreplot er grundlæggende, at similaritet mellem observationer er karakteriseret ved, at de enkelte datapunkter er tæt på hinanden. Således er det ønskeligt, at dobbeltbestemmelser er nærmest overlappende, at grupper er klart afgrænsede samt at grupper kan separeres, hvis råvareidentifikation skal muliggøres. Alle tre forudsætninger er opfyldt.

Efterskrift

Interessen for elektroniske næser startede egentlig som et hobbyprojekt den 9. januar 2013. Et projekt, der er investeret små 200 timer i over en knap fireårig periode. Men en konkret henvendelse fra en ansat ved et privat universitet i Florida førte til, at forfatteren valgte at opgive sit gode job og forfølge en karriere som selvstændig inden for *machine olfaction*. Første projekt er et dedikeret forsøg på kommerialisering af en open hardware-prototype målrettet uddannelsessegmentet.

E-mail:

Michael Madsen: mm@voodoometrics.eu

Referencer

1. Arne Oxbøl, Måling af lugt, Dansk Kemi, vol. 96, nr. 5, 2015.
2. Handbook of Machine Olfaction: Electronic Nose Technology, redigeret af Pearce, Schiffman, Nagle & Gardner, 2003, Wiley, ISBN: 3-527-30358-8.
3. Mendeley Research Networks, privat samling af artikler om machine olfaction, www.mendeley.com/groups/2952311/electronic-noses.
4. Forfatterens personlige hjemmeside, www.maskau.dk/projects/electronic-nose.