

SZAKDOLGOZAT

Kiss Ágoston Richárd

2023

Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem Élelmiszertudományi és Technológiai Intézet
Biomérnöki Alapképzés, Alkalmazott Biotechnológia modul
Élelmiszerkémia és -Analitika Tanszék

Kiss Ágoston Richárd

Poloska szaganyaggal módosított málnakészítmény vizsgálata elektronikus orr készülékkel

Dolgozatom során poloska szaganyaggal dúsított málnakészítményeket vizsgáltam. A kísérlet tervezésénél célom volt a poloska szagért felelős aromakomponensek beazonosítása és a lehető legpontosabb mennyiségi meghatározása. A célt szem előtt tartva alakítottam ki a mérésemet, a „poloska koncentrációt” egyenletesen növeltem málnaszörp mátrixban.

A standardizálás érdekében a rovarfajta tanszék által egységesen teleltetett és takarmányozott, kizárólag hím ivarú állatokat használtam fel. Az egyedeket a szörp főtömegében vegyszereskanállal szétnyomtam a szaganyag kinyerése érdekében, majd 2-2perces standardizálási idő után minden poloskaszámbhoz 3-3 párhuzamos mintát vettem. A fentiek szerint a poloskák számát egyesével növelve 0-tól 15-ig terjedő poloskaszámnál vettem mintát.

A mintákat Heracles NEO 300 ultra-fast GC analyzer elektronikus-orr készülékkel vizsgáltam. A készülék három részből áll, első a mintavevő, majd ezt követi a jelfeldolgozó rész, végül az algoritmus, amely a kapott GC kromatogram retenciós indexeihez tartozó csúcsokat értelmezi virtuális szenzorokként, így képes azonosítani az illatokat. Valójában csak a virtuális szenzor által mért értéket kapjuk, a tényleges azonosítást egy adatbázis segítségével (esetemben AroChemBase) kell elvégezni. Fontos megjegyezni, hogy a készülék a koncentrált illatanyagokat két, különböző összetételű oszlopba injektálja, ebből kifolyólag az egyes vegyületek retenciós indexei eltérőek lehetnek a két oszlopon.

A kapott adatokat többféle statisztikai módszerrel vizsgáltam, először megvizsgáltam koncentráció és a poloska aromakomponenseit alkotó szenzorok értékei közötti korrelációt. A poloska aromaprofiljának ismert alkotóit az AroChemBase nyilvántartás alapján azonosítottam be, ezek minden esetben markánsan korreláltak a koncentrációval. Azért is volt fontos elsőként elvégezni a korreláció elemzést mert a későbbiekben alkalmazott statisztikai módszerek feltételeként szokás megadni, hogy korreláló változók esetében futtathatóak.

Az általam alkalmazott statisztikai módszerek a PCA a DFA és a PLSR voltak. A DFA-t az összes szenzorra, ezt követően csak a kiválogatott szenzorokra, majd kizárólag a T2D és a 3D szenzoraira végeztem el. A legnagyobb vizuális csoportosulást az összes szenzor esetében tapasztaltam, azonban a kiválogatott szenzoroknál és a T2D és 3D szenzorainál a DF1 önmagában leírja a

koncentrációt, ezen ábrák esetében a szenzorok varianciáját a feltüntetett %-át DF1 írja le. A PLS regresszióta az összes szenzorra alkalmazva pontos kalibrációs modell jött létre, amely alapján a minták sikeres osztályozásához legnagyobb részben hozzájáruló szenzorokat kiválogattam. A PLS regresszióon alapuló szenzorválasztás azért előnyös, mert lehetővé teszi az olyan releváns aromakomponens alkotó vegyületek megtalálását amelyek nagyon kis válaszjelet szolgáltatnak a detektorban.

A kiemelt szenzorok közül a Tridekán vegyülethez rendelhető szenzor szolgáltatja a legnagyobb válaszjelet a detektorban, a T2D vegyülethez rendelhető szenzor rendelkezik a legnagyobb korrelációs együtthatóval a koncentrációval összevetve. Így a Tridekán és a T2D vegyületekhez rendelhető szenzorokat választottam ki és mért értékeik átlagát és szórását dobozdiagramokon és vonaldiagramokon ábrázoltam mindkét oszlopon. Eredményeim alapján a T2D kimutatási értéke megbízhatóbb, ugyanis a Tridekánhoz rendelhető szenzor levegőmintái is szolgáltatnak válaszjelet a detektorban a T2D mintáival ellentétben. Az értékek szórása is kisebbnek bizonyult a T2D esetében. Ezek alapján a poloska illatanyagának jelenlétét megbízhatóbban monitorozza a T2D-hez rendelhető szenzor. Egy még ismeretlen szenzor (963.44-1-Area) azonban minden tekintetben jobb tulajdonságokkal bír mint a T2D. Esetleges jövőbeli tervnek látom a 963.44-1-Area szenzorhoz rendelhető vegyület meghatározását GC-MS készülékkel.

Lehetőségem adódott egy már meglévő szoftver fejlesztésébe becsatlakozni és a szoftvert kísérleti jelleggel kipróbálni a szakdolgozatom témájára vonatkoztatva. A szoftver célja, a málna minél pontosabb minőségi állapotítélete különböző súllyal figyelembevett paraméterek jelenlétében.

A minősítés azonban relatív, egymáshoz viszonyítások alapján végezhető el. A paraméterek egy része számszerűsíthető, így összemérhetők egymással, más részük azonban egyáltalán nem mérhető, így az összehasonlítások rangsorolása csakis szubjektív alapon végezhető el. További mérések szükségesek a paraméterek rangsorolásának pontosítására.