

Aleksander Kubiak^{*}, Zbigniew Mikrut^{**}

Ocena jakości nasion rzepaku z wykorzystaniem sztucznego nosa i sieci neuronowych***

1. Wstęp

Możliwość wykorzystania nasion rzepaku nie tylko do produkcji produktów spożywczych, ale również do produkcji biokomponentów paliw stała się czynnikiem sprzyjającym poszukiwaniom rozwiązań umożliwiających szybką ocenę tego surowca. Ocena ta powinna decydować o odpowiednim wykorzystaniu danej partii nasion rzepaku tak, aby do produkcji produktów spożywczych wykorzystywać tylko surowiec o najwyższej jakości. Wykorzystanie do tego celu matrycy sensorów wykonanych z przewodzących polimerów, reagujących selektywnie na wybrane składniki mieszaniny gazów (tzw. elektronicznych nosów), umożliwi uniknięcie pracochłonnych i kosztownych analiz laboratoryjnych dużej liczby próbek. Elektroniczne nosy coraz częściej zastępują narządy węchu człowieka, a ich wybrane aplikacje w technologii żywności przedstawiono w tabeli 1.

Jednym z głównych kryteriów oceny nasion rzepaku jest ocena sensoryczna, której zadaniem jest identyfikacja próbek charakteryzujących się zapachem stęchłym lub fermentacyjnym. Zapach stęchły spowodowany jest rozwojem pleśni i grzybów na powierzchni nasion, natomiast zapach fermentacyjny wiąże się z rozwojem mikroflory bakteryjnej. Oba tym procesom sprzyja duża wilgotność nasion rzepaku (powyżej 6%), czas i odpowiednia temperatura. W niniejszej pracy podjęto próbę identyfikacji jakości nasion rzepaku w oparciu o analizę jego zapachu, jak również identyfikację obu typów zapachu: stęchłego i fermentacyjnego za pomocą elektronicznego nosa i sztucznych sieci neuronowych.

* Katedra Inżynierii i Aparatury Procesowej, Wydział Nauki o Żywności, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski, Olsztyn; Aleksander.Kubiak@uwm.edu.pl

** Katedra Automatyki, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków; zibi@agh.edu.pl

*** Niniejszą pracę wykonano w ramach projektu badawczego Komitetu Badań Naukowych nr 3 PO6T 028 25

Tabela 1
Zestawienie wybranych zastosowań elektronicznego nosa wykorzystującego matrycę sensorów wykonanych z przewodzących polimerów

Aplikacja	Metoda analizy danych	Uwagi	Publikacja
Identyfikacja wybranych szczepów bakterii	Zmodyfikowany algorytm genetyczny i sztuczne sieci neuronowe	Matryca sensorów składająca się z 32 polimerów	[4]
Identyfikacja zapachu węglowodorów aromatycznych	Analiza składowych głównych (PCA)	Matryca sensorów składająca się z 8 polimerów	[1]
Ocena jakości, odmiany i regionu pochodzenia oliwy z oliwek	Analiza składowych głównych (PCA)	Matryca sensorów składająca się z 16 polimerów	[6]
Ocena zapachu wstępnie przetworzonego mięsa wołowego przechowywanego w niskich temperaturach	Sztuczne sieci neuronowe oraz analiza składowych głównych (PCA)	Matryca sensorów składająca się z 32 polimerów	[5]
Ocena zmian zapachu pomarańczy uszkodzonych przez przymrozki	Kanoniczna analiza dyskryminacyjna	Matryca sensorów składająca się z 32 polimerów węglowych	[8]
Ocena zapachu orzeszków ziemnych suszonych w różnych temperaturach	Analiza statystyczna	Matryca sensorów składająca się z 32 polimerów węglowych, z których do dalszej analizy wykorzystano sygnały generowane przez 20 sensorów	[7]

2. Metodyka badań

2.1. Materiał badań

Materiałem badań były próbki nasion rzepaku (200 g) o zróżnicowanej wilgotności zmieniającej się od 5% dla kontroli, poprzez 13%, 24%, 30% i 34%. Próbki przechowywane były w polipropylenowych pojemnikach o objętości 0,5 dm³ przez 24, 72 i 240 godzin w temperaturze 20°C. Zmiana wilgotności próbek rzepaku dokonywana była poprzez dodanie do przechowywanej próbki rzepaku odpowiednio 25, 50, 75 i 100 g wody na początku eksperymentu. Wilgotność badanych próbek rzepaku określono metodą wagową za pomocą wagi suszarkowej PJ3000MB (Mettler-Toledo AG, Germany) po 10 dniach od dnia rozpoczęcia eksperymentu. Próbki rzepaku o zróżnicowanej wilgotności wykonano w 24 powtórzeniach.

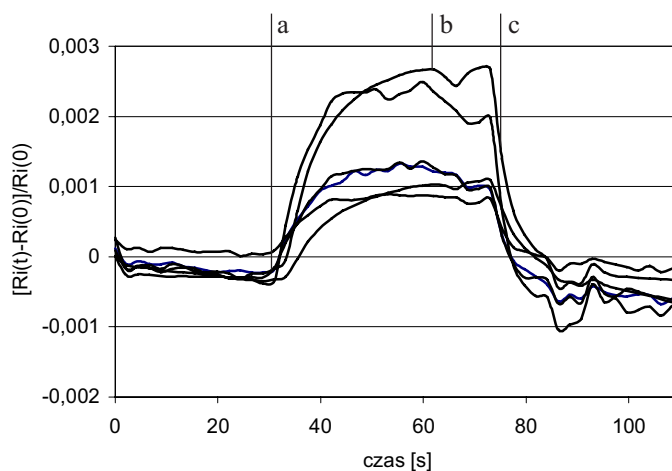
2.2. Elektroniczny nos

Do badań oceny zapachu nasion rzepaku wykorzystano elektroniczny nos Cyrano-se320 (Cyrano Science, Pasadena, California, USA) wyposażony w 32 sensory wykonane z przewodzących polimerów węglowych. W trakcie badań rejestrowano zmiany rezystancji każdego z sensorów (polimerów) w bezpośrednim sąsiedztwie badanej próbki gazu. Para-

metry przepływu gazu dla poszczególnych trybów pracy przedstawiono w tabeli 2. Przykładowy wykres zmiany rezystancji dla 6 wybranych sensorów z zaznaczonymi zmianami trybu pracy sztucznego nosa przedstawiono na rysunku 1.

Tabela 2
Parametry przepływu powietrza i czasu dla kolejnych trybów pracy elektronicznego nosa

Tryb pracy	Czas [s]	Wydajność pompy
Rejestracja parametrów odniesienia 32 sensorów	30	110 cm ³ /min
Pomiar zmiany rezystancji sensorów pod wpływem badanej próbki gazu	30	110 cm ³ /min
Czas na usunięcie igły pomiarowej	5	
Usunięcie próbki gazu z przestrzeni pomiarowej	20	180 cm ³ /min
Usunięcie próbki gazu z układu pomiarowego	5	180 cm ³ /min
Powtórne usunięcie próbki gazu z przestrzeni pomiarowej	20	180 cm ³ /min



Rys. 1. Wykres zmiany rezystancji R dla 6 sensorów: a – rozpoczęcie pobierania próbki gazu; b – zakończenie pobierania próbki gazu; c – wyprowadzenie próbki gazu z układu pomiarowego

2.3. Ocena zapachu nasion rzepaku wykonana przez panel ekspertów

Ocenę zapachu nasion rzepaku przeprowadziła grupa 5 przeszkolonych ekspertów. Ich zadaniem była ocena zapachu próbek rzepaku i zakwalifikowanie ich do jednej z 3 klas:

- 1) zapach naturalny,
- 2) zapach stęchły,
- 3) zapach fermentacyjny.

Dodatkowo eksperci mieli za zadanie ocenić intensywność każdego rodzaju zapachu w skali od 1 do 10. Dla próbek o zapachu stęchłym wartości 1 odpowiadał zapach naturalny rzepaku, natomiast wartości 10 odpowiadał zapach nasion rzepaku o wilgotności 13%, przechowywanych przez okres 10 dni. Dla próbek o zapachu fermentacyjnym wartości 1 odpowiadał również zapach naturalny, a wartości 10 odpowiadał zapach nasion rzepaku o wilgotności 30%, przechowywanych przez okres 10 dni. Każdy z 5 ekspertów otrzymał do oceny 5 próbek oznaczonych A, B, C, D i E.

Próbkami kontrolnymi były 3 próbki oznaczone:

- 1N – dla zapachu naturalnego,
- 10S – dla zapachu stęchłego,
- 10F – dla zapachu fermentacyjnego.

Wyniki oceny nanoszone były na odpowiednio przygotowaną skalę.

2.4. Ocena zapachu za pomocą sieci neuronowych

Zmianę zapachu gazu znajdującego się w bezpośrednim otoczeniu przygotowanych próbek rzepaku badano za pomocą elektronicznego nosa po 24 i 72 godzinach przechowywania. Zmianę rezystancji każdego z 32 sensorów rejestrowano w pamięci komputera, a następnie obliczano maksymalną odpowiedź każdego z sensorów [2]

$$\frac{\Delta R}{R_0} = \frac{(R_{\max} - R_0)}{R_0},$$

gdzie:

- R_{\max} – maksymalna wartość rezystancji sensora podczas pobierania próbki gazu,
- R_0 – minimalna wartość rezystancji podczas pobierania próbki odniesienia (powietrze).

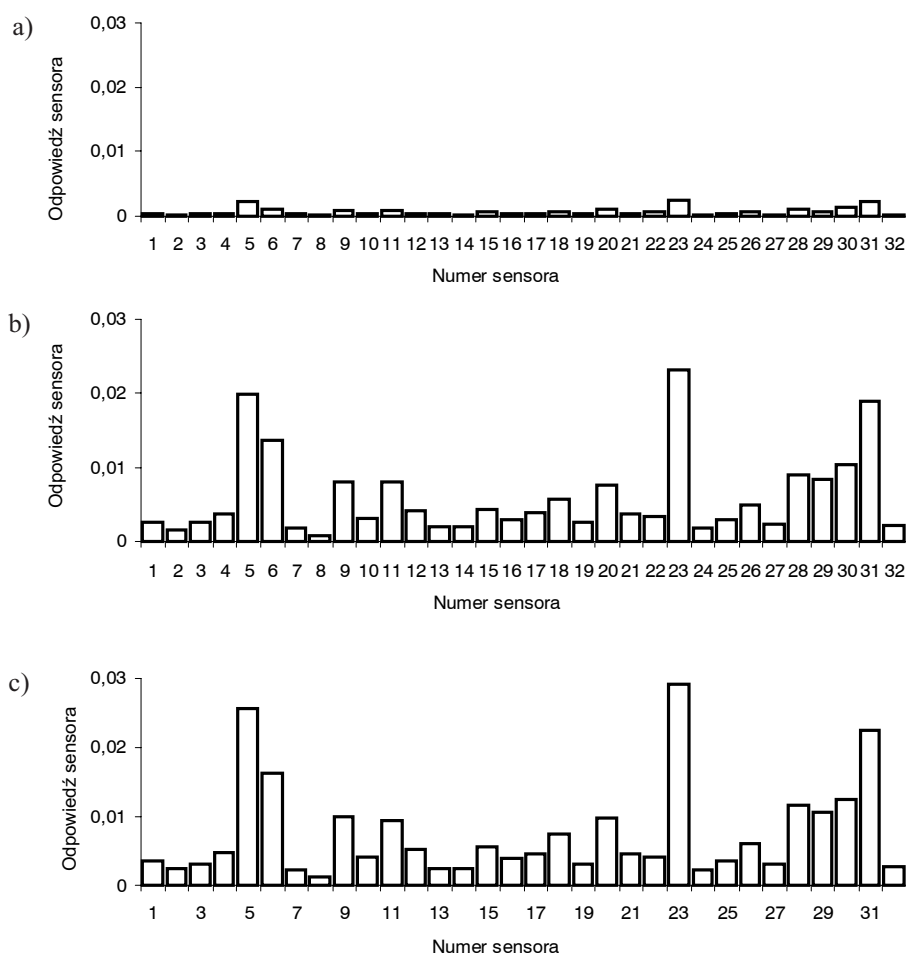
Wartości te wyznaczono dla wszystkich 32 sensorów, tworząc widmo sensoryczne każdego z badanych zapachów (rys. 2).

Widma te wykorzystano do budowy ciągów: uczącego oraz testowego, wykorzystanych do obliczeń z zastosowaniem sieci neuronowych i metody najbliższego sąsiada. Ciągi te składały się z trzech klas oznaczonych w następujący sposób:

- 1) 1 0 0 – zapach swoisty (naturalny),
- 2) 0 1 0 – zapach stęchły,
- 3) 0 0 1 – zapach fermentacyjny.

Zapach swoisty reprezentowany był przez 24 wektory odpowiedzi 32 sensorów próbek o wilgotności 5%, przechowywanych przez 24 godziny i odpowiednio 72 godziny. Zapach stęchły reprezentowany był przez 24 wektory odpowiedzi 32 sensorów próbek o wilgotności 13%, przechowywanych przez 24 godziny i 24 wektory odpowiedzi 32 sensorów próbek o tej samej wilgotności przechowywanych przez 72 godziny. Natomiast zapach fermentacyjny reprezentowany był przez 24 wektory odpowiedzi 32 sensorów próbek o wilgotności 30% przechowywanych przez 24 godziny i przez 24 wektory odpowiedzi 32 sen-

sorów próbek o tej samej wilgotności przechowywanych przez 72 godziny. Zapachy generowane przez próbki o wilgotności 24% przechowywane przez 24 godziny wstępnie zakwalifikowano jako stęchłe i reprezentowane były przez 24 wektory odpowiedzi 32 sensorów. Natomiast zapach generowany przez próbki rzepaku o wilgotności 34% przechowywane przez 24 godziny zakwalifikowano jako próbki o zapachu fermentacyjnym, reprezentowane były przez 24 wektory odpowiedzi 32 sensorów.



Rys. 2. Widma sensoryczne badanych zapachów rzepaku otrzymanych po 24 h: a) próbka kontrolna o wilgotności 5%; b) próbka o wilgotności 13%; c) próbka o wilgotności 30%

Sieci neuronowe zaimplementowane zostały za pomocą oprogramowania PRTools [3], z którego wykorzystano opcje uczenia i rozpoznawania badanych obiektów siecią *backpropagation* z jedną warstwą ukrytą i ze zmieniającą się liczbą elementów w warstwie ukrytej od 3 do 30.

Warstwa wyjściowa sieci składała się z trzech neuronów odpowiadających liczbie klas, które dana sieć powinna rozpoznać (nasiona rzepaku: zdrowe, stęchłe i sfermentowane). Dodatkowo w celu porównania uzyskanych wyników z metodami klasycznymi wykorzystano opcję oprogramowania PRTools umożliwiającą rozpoznawanie tych samych danych za pomocą metody najbliższego sąsiada (k -NN).

3. Wyniki badań

3.1. Ocena sensoryczna próbek rzepaku wykonana przez panel ekspertów

Wyniki opisowej oceny zapachu próbek rzepaku przedstawiono w tabeli 3. Wszyscy eksperci już po 24 godzinach przechowywania próbek sklasyfikowali zapach próbek o wilgotności 5% jako zapach swoisty (naturalny), próbki o wilgotności 13% jako zapach stęchły, natomiast zapach próbki o wilgotności 30% jako fermentacyjny oceniło dwóch ekspertów, a trzech pozostałych oceniło zapach jej zapach jako stęchły. Te same próbki oceniane po 72 godzinach były oceniane przez wszystkich ekspertów jako próbki o zapachu fermentacyjnym. Ocena intensywności badanych zapachów przeprowadzona po 24 i 72 godzinach jednoznacznie wykazała, że każdy z badanych typów zapachów z czasem staje się coraz bardziej intensywny. Trudności w jednoznacznej ocenie zapachu przez ekspertów wystąpiły w przypadku oceny zapachu próbek o wilgotności 24% i 34% zarówno po 24, jak i 72 godzinach przechowywania. Większość ekspertów (3) oceniła zapach próbek o wilgotności 24% przechowywanych przez 24 godziny jako stęchły, by następnie po 72 godzinach przechowywania te same próbki zostały ocenione przez trzech ekspertów jako próbki o zapachu fermentacyjnym, a jako próbki o zapachu stęchłym przez pozostałych dwóch. Rozbieżności w ocenie próbek spowodowane były ich wysoką wilgotnością, która w początkowym stadium mogła sprzyjać rozwojowi pleśni i bakterii równocześnie. Biorąc pod uwagę, że rozwój procesów fermentacyjnych trwa odpowiednio dłużej, może to tłumaczyć pojawienie się zapachu fermentacyjnego dopiero po 72 godzinach.

Tabela 3
Wyniki opisowej oceny zapachu próbek rzepaku dokonanej przez ekspertów

Wilgotność badanej próbki	Rodzaj zapachu po 24 h	Rodzaj zapachu po 72 h
5%	normalny (5 [*])	normalny (5)
13%	stęchły (5)	stęchły (5)
13%	fermentacyjny (0)	fermentacyjny (0)
23%	stęchły (3)	stęchły (2)
23%	fermentacyjny(2)	fermentacyjny (3)
30%	stęchły (2)	stęchły (0)
30%	fermentacyjny (3)	fermentacyjny (5)
34%	stęchły (2)	stęchły (0)
34%	fermentacyjny (3)	fermentacyjny (5)

* W nawiasie podano liczbę ekspertów oceniających daną próbkę jako próbkę o zapachu stęchłym lub fermentacyjnym.

Wyniki oceny ekspertów stanowiły podstawę klasyfikacji próbek, których widma sensoryczne wykorzystano do budowy ciągu uczącego i testowego wykorzystanych do obliczeń za pomocą sieci neuronowych.

3.2. Ocena zapachu za pomocą sieci neuronowych

Na podstawie oceny sensorycznej dokonanej przez panel ekspertów oraz pomiarów dokonanych za pomocą elektronicznego nosa do obliczeń wykorzystano trzy rodzaje ciągów uczących:

- 1) ciąg, w którym wykorzystano widma sensoryczne uzyskane dla ziaren rzepaku o wilgotności 5%, 13% i 30% po 24 godzinach przechowywania, a ziarnom przyporządkowano odpowiednio 3 typy zapachów: normalny, stęchły i fermentacyjny;
- 2) ciąg, w którym wykorzystano widma sensoryczne uzyskane dla ziaren rzepaku o wilgotności 5%, 13% i 30% po 72 godzinach przechowywania, a ziarnom przyporządkowano odpowiednio 3 typy zapachów: normalny, stęchły i fermentacyjny;
- 3) ciąg, w którym wykorzystano widma sensoryczne uzyskane dla ziaren rzepaku o wilgotności 5%, 24% i 34% przechowywanych przez 24 godziny, a ziarnom przyporządkowano odpowiednio 3 typy zapachów: normalny, stęchły i fermentacyjny.

Obliczenia wykonano kolejno dla każdego z trzech ciągów wykorzystanego jako ciąg uczący. Ciągami testowymi były pozostałe dwa ciągi.

Dla ciągu nr 1 rozpoznanie zapachu nasion rzepaku przy użyciu sieci o zmieniającej się liczbie elementów w warstwie ukrytej od 3 do 30 wynosiło średnio 99,9% \pm 0,4, a rozpoznanie ciągu testowego nr 2 wynosiło średnio 92,1% \pm 2,8, natomiast dla ciągu nr 3 odpowiednio 62,4% \pm 1,2.

Najwyższą skuteczność rozpoznania ciągu testowego uzyskano dla ciągu nr 2 (94,4%) dla 18 elementów w warstwie ukrytej. Skuteczność rozpoznania zapachu nasion rzepaku znajdujących się w ciągu uczącym nr 2 wynosiła 97,6% \pm 1,3, rozpoznanie zapachu dla ciągu nr 1 (ciągu testowego) wynosiło średnio 98,2% \pm 1,4, a dla ciągu nr 3 – 68,1% \pm 2,5. Najwyższą skuteczność rozpoznania ciągu testowego uzyskano dla ciągu nr 1 (100%) i 12 elementów w warstwie ukrytej.

Skuteczność rozpoznania zapachu nasion rzepaku znajdujących się w ciągu uczącym nr 3 wynosiło średnio 95,4% \pm 4,4, rozpoznanie zapachu ciągu nr 1 (ciągu testowego) wynosiło średnio 74,2% \pm 4,5, a ciągu nr 2 odpowiednio 76,1% \pm 3,8. Najwyższą skuteczność rozpoznania ciągu testowego uzyskano dla ciągu nr 2 (80,6%) dla 21 elementów w warstwie ukrytej. Na podstawie uzyskanych wyników do dalszych badań wybrano ciąg nr 2 jako ciąg uczący i sieć o strukturze 32-12-3. Stabilność wybranej sieci obliczona na podstawie wyników pięciu kolejnych powtórzeń wynosiła 97,2% \pm 1,4.

Zestawienie najlepszych wyników skuteczności rozpoznania badanych zapachów dla ciągu uczącego oraz ciągów testowych otrzymanych dla sieci neuronowej typu *bp* i najbliższego sąsiada przedstawiono w tabeli 4. Rozpoznanie zapachu nasion rzepaku dla ciągu uczącego nr 2 przy użyciu sieci *bp* o strukturze 32-12-3 wynosiło 98,6%. Rozpoznanie ciągu testowego nr 1 (tą samą siecią) wynosiło 100%, podczas gdy rozpoznanie ciągu testowe-

go nr 3 wynosiło 66,7%. Rozpoznanie zapachu nasion rzepaku dla tych samych danych metodą k-najbliższego sąsiada wynosiło 91,7% dla ciągu uczącego i odpowiednio 94,4% i 75,0% dla ciągu testowego nr 1 i nr 3.

Tabela 4

Zestawienie wyników rozpoznania dla ciągu uczącego nr 2, ciągów testowych otrzymanych dla sieci neuronowych i metody najbliższego sąsiada

Metoda rozpoznania	Ciąg uczący nr 2 [%]	Ciąg testowy nr 1 [%]	Ciąg testowy nr 3 [%]
Sieć neuronowa <i>bp</i> 32-12-3	98,6%	100%	66,7%
Najbliższego sąsiada <i>k</i> -NN	91,7%	94,4%	75,0%

Wyniki rozpoznania dla poszczególnych typów zapachu otrzymanych dla ciągu testowego nr 1 i 3 dla sieci neuronowej i metody najbliższego sąsiada przedstawiono w tabeli 5. Wszystkie typy zapachów zdefiniowane w ciągu testowym nr 1 zostały poprawnie zidentyfikowane przez wybraną sieć neuronową. Dla ciągu testowego nr 3 nie uzyskano takiej skuteczności rozpoznania. Na 24 próbki nasion rzepaku o zapachu swoistym rozpoznano 23. Spośród 24 próbek zdefiniowanych jako próbki o zapachu stęchłym – 22 rozpoznane były jako próbki o zapachu fermentacyjnym, a tylko 2 jako próbki o zapachu stęchłym. Spośród 24 próbek zdefiniowanych jak próbki o zapachu fermentacyjnym poprawnie rozpoznano 23, podczas gdy tylko jedna próbka została rozpoznana jako próbka o zapachu stęchłym.

Tabela 5

Zestawienie wyników rozpoznania poszczególnych typów zapachu dla ciągów testowych otrzymanych dla sieci neuronowych i metody najbliższego sąsiada

Metoda rozpoznania	Typ zapachu nasion rzepaku	Ciąg testowy nr 1			Ciąg testowy nr 3		
		001	010	001	001	010	001
Sieć neuronowa <i>bp</i> 32-12-3	swoisty	24	0	0	23	1	0
	stęchły	0	24	0	0	2	22
	fermentacyjny	0	0	24	0	1	23
Najbliższego sąsiada <i>k</i> -NN	swoisty	23	1	0	24	0	0
	stęchły	0	23	1	0	6	18
	fermentacyjny	0	2	22	0	0	24

W przypadku metody najbliższego sąsiada na 24 próbki zdefiniowane w ciągu nr 1, jako próbki o zapachu swoistym rozpoznano poprawnie 23, na 24 próbki zdefiniowane jako próbki o zapachu stęchłym rozpoznano poprawnie również 23, a na 24 próbki o zapachu fermentacyjnym rozpoznano poprawnie 22. Dla ciągu testowego nr 3 wszystkie 24 próbki

o zapachu swoistym zostały poprawnie rozpoznane. Z 24 próbek zdefiniowanych jako próbki o zapachu stęchłym poprawnie rozpoznano 6. Z nasion rzepaku o zapachu fermentacyjnym poprawnie rozpoznano wszystkie 24 próbki. Źle rozpoznane próbki nasion rzepaku w ciągu nr 3 o zapachu stęchłym zostały rozpoznane jako próbki o zapachu fermentacyjnym.

4. Wnioski

Zaproponowana w pracy sieć neuronowa typu *backpropagation* o strukturze 32-12-3, uczona ciągiem uczącym powstałym w oparciu o widma zapachów rzepaku o zróżnicowanej wilgotności, uzyskane po 72 godzinach przechowywania, z powodzeniem rozpoznawała próbki rzepaku przechowywane w krótszym czasie, np. po 24 godzinach (ciąg testowy nr 1), jak również próbki rzepaku, o których zapachu decydowała inna wilgotność wyjściowa nasion rzepaku niż wilgotność próbek wykorzystanych do budowy ciągu uczącego (ciąg testowy nr 3). Skuteczność rozpoznania trzech rodzajów zapachów nasion rzepaku: swoistego, stęchłego i fermentacyjnego uzyskana przez sieć neuronową dla ciągu testowego o tej samej wilgotności wynosiła 100% i była zdecydowanie lepsza niż w przypadku wykorzystania metody najbliższego sąsiada. Skuteczności rozpoznania trzech rodzajów zapachu uzyskana przez sieć neuronową dla ciągu uczącego o innej wilgotności (wyższej) niż wykorzystana do budowy ciągu uczącego była nieznacznie mniejsza niż w przypadku wykorzystania metody najbliższego sąsiada. Błędne rozpoznania sieci neuronowej tylko w jednym przypadku dotyczyło rozpoznania nasion o zapachu swoistym jako nasiona o zapachu stęchłym. We wszystkich pozostałych przypadkach błędne rozpoznania dotyczyły zapachów nasion stęchłych i sfermentowanych.

Literatura

- [1] Barisci J.N., Wallace G.G., Andrews M.K., Partridge A.C., Andrews P.K.: *Conducting polymer sensors for monitoring aromatic hydrocarbons using an electronic nose*. Sensor and Actuators B, 84, 2002, 252–257
- [2] Cyrano Science, Inc.: *The practical guide to the Cyranose 320™*. 2001
- [3] Duin, R.P.W.: *PRTools Version 3.0 – a Matlab Toolbox for Pattern Recognition*. Delft University of Technology, 2000, <http://www.ph.tn.tudelft.nl/prtools>
- [4] Gardner J.W., Boilot P., Hines E.L.: *Enhancing electronic nose performance by sensor selection using a new integer-based genetic algorithm approach*. Sensor and Actuators B, 106, 2005, 114–121
- [5] Grigioni G.M., Margaria C.A., Pensel N.A., Sanchez G.: *Warmed-over flavour analysis in low temperature-long time processed meat by an “electronic nose*. Meat Science, 56, 2000, 221–228
- [6] Guadarrama A., Rodriguez Mendez M.L., Sanz C., Rios J.L., de Saja J.A.: *Electronic nose based on conducting polymers for the quality control of olive oil aroma-discrimination of quality, variety of olive and geographic origin*. Analytica Chimica Acta, 432, 2001, 283–292
- [7] Osborn G.S., Lacey R.E., Singleton J.A.: *A method to detect peanut off-flavors using an electronic nose*. Transaction of the ASAE, 44(4), 2001, 929–938
- [8] Tan E.S., Slaughter D.C., Thompson J.F.: *Freeze damage detection in oranges using gas sensors*. Postharvest Biology and Technology, 35, 2005, 177–182

