

Olfactory Data Interpreter (ODI)

NEU!

GC/O-Daten bewerten leicht gemacht

GERSTEL hat mit dem „Olfactory Data Interpreter“ (ODI) eine Softwarelösung entwickelt, mit der sich GC/O-Daten einfacher als bisher analysieren und bewerten lassen.

Der GERSTEL-Olfactory-Data-Interpreter (ODI) erlaubt eine schnelle und zuverlässige Auswertung olfaktorischer Informationen und damit die Identifizierung unbekannter geruchsaktiver Verbindungen. Chromatographie-Daten, die in Kombination eines Massenspektrometers (MSD) oder eines Flammenionisationsdetektors (FID) mit einem GERSTEL-OlfactoryDetectionPort (ODP, s. S. 4) beziehungsweise einer vergleichbaren Gerätekonstellation aufgezeichnet wurden, werden nach dem Starten der Software ins Programm geladen.

Der ODI überprüft, erkennt und importiert passende Datenformate automatisch. Importiert werden auch die vom Anwender mit dem „Olfactory Intensity Device“ (im Zuge des Abriechnens mit dem ODP) manuell registrierten Einschätzungen der Geruchsintensitäten sowie die zeitgleich von einer Spracherkennungssoftware aufgezeichneten verbalisierten Geruchseindrücke. Dieser ganze Strauß an Informationen wird von der ODI-Software übersichtlich dargestellt, und zwar sowohl als Olfaktogramm und Chromatogramm als auch tabellarisch.

Der Anwender erhält einen detaillierten Überblick über die während der Geruchsanalyse aufgezeichneten Signale, über die für die Bewertung der GC/O-Daten erforderlichen Parameter wie Retentionszeiten, Retentionsindices (RI) und GC/O-Intensitäten sowie über die olfaktorischen Deskriptoren, also die aufgezeichneten verbalisierten Geruchseindrücke.

Die gespeicherten Audiofiles lassen sich im Nachhinein aufrufen und anhören. Sofern sich Veränderungen zum ersten Geruchseindruck ergeben haben, können die verschrifteten Geruchsimpessionen editiert und modifiziert werden. Ähnlich verhält es sich mit den MS-Scan-Daten. Das Resultat der Datenbanksuche lässt sich mit den von der ODI-Software errechneten Retentionsindices (RIs) abgleichen.

Zur Bewertung olfaktorischer Informationen und zur Ermittlung von Schlüsselverbindungen eines Geruchseindrucks stellt der Olfactory Data Interpreter dem Anwender mehrere hilfreiche Funktionen zur Verfügung.

Kumulative Olfaktogramme: Wird eine Probe in verschiedenen Verdünnungen mit der GC/O vermessen, lassen sich die resultierenden Olfaktogramme komfortabel in der ODI-Software kumulieren, sprich der ODI addiert die jeweiligen Geruchsintensitäten zu einem Gesamtwert. Die Substanzen, die auch in der höchsten Verdünnung noch geruchsaktiv respektive oberhalb der Geruchsschwelle wahrgenommen werden, liefern im kumulativen Olfaktogramm die größten Signalhöhen. Die Funktion „Kumulative Olfaktogramme“ gibt dem Anwender also auf schnelle und zuverlässige Weise Auskunft darüber, welche Verbindungen auch in geringer Konzentration den Geruchseindruck prägen und somit zu den potentesten geruchsaktiven Komponenten in der Probe zählen.



Aromaextraktverdünnungsanalyse (AEDA): Die ODI-Software ermöglicht die effiziente Auswertung der klassischen Aromaextraktverdünnungsanalyse (Aroma Extract Dilution Analysis, AEDA) mit definiertem Verdünnungsfaktor (Flavor Dilution, FD). Der ODI führt alle Berechnungen durch und ermittelt den FD, dessen Höhe der Intensität einer am Geruch beteiligten Substanz entspricht. Die Software überführt die ermittelten Informationen in einen druckfähigen Report.

Panel-Analyse: Wird eine Probe von mehreren Anwendern im Rahmen einer Panel-Analyse olfaktorisch untersucht, lässt sich aus dem vorhandenen Datenmaterial ermitteln, welcher Geruchseindruck von allen Panellisten wahrgenommen wurde. Diese Information kann sich bei der weiteren Analyse und Aromaidentifizierung als sehr hilfreich erweisen; sie von Hand zu generieren, ist mit einem erheblichen Arbeits- und Zeitaufwand verbunden. Der Olfactory Data Interpreter führt die Auswertung der Panel-Analyse auf Mausklick durch und liefert im Nu die Detektionsfrequenz jeder Verbindung.

MS-Bibliothekssuche: Die ODI-Software integriert zahlreiche Funktionen bezüglich Extraktion, Aufreinigung und Interpretation von Massenspektren. Die Spektrenerkennung erfolgt unter Hinzuziehung existierender Bibliotheken unterschiedlicher Dateiformate. Das GERSTEL-Applikationslabor empfiehlt die NIST-AMDIS-Software, die aus der ODI-Software heraus aufgerufen wird; sie erlaubt eine Dekonvolution der Daten.

Multivariate Datenanalyse: Um bei einem großen Probenaufkommen rasch eine Klassifizierung nach Geruchseindrücken vornehmen zu können, bietet die ODI-Software die Option der multivariaten Datenanalyse auf Basis der Hauptkomponentenanalyse (Principal Component Analysis, PCA).

Der GERSTEL-ODI unterstützt auf einfache und effiziente Weise die rasche Aufklärung und Identifizierung unbekannter, mittels GC/O-Analyse ermittelter geruchsaktiver Verbindungen. In Bezug auf die Handhabung und Verarbeitung von GC/O-Daten bietet der Olfactory-Data-Interpreter (ODI) jene Toleranzbreite und Flexibilität, die erforderlich ist, um die analytischen Unschärfen wirksam und zielgerichtet zu handhaben, die sensorischen Analysen typischerweise innewohnen.

Fazit der Experten: Für die Auswertung von GC/O-Daten sowie für die Bestimmung und Identifizierung unbekannter geruchsaktiver Verbindungen erweist sich die ODI-Software von GERSTEL als nützliches, wirksames und effizientes Tool.

Weitere Informationen unter www.gerstel.de/de/ODI.htm