Workshop Sartec «Innovazione tecnologica, sviluppo normativo e caratterizzazione su tematiche odorigene»



Un Sistema Integrato Intelligente per la Caratterizzazione Strumentale e Sensoriale delle Molestie Olfattive

PIERLUIGI BARBIERI*, SABINA LICEN

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche , Università degli Studi di Trieste,

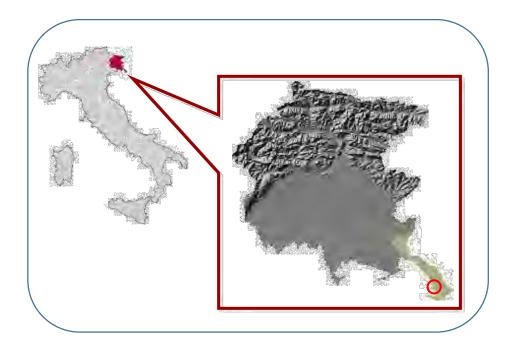
Via L. Giorgieri 1,34127 Trieste

*barbierp@units.it

Mercoledì 12 dicembre 2018 Sala Conferenze Saline Conti Vecchi Assemini (Ca)

Pierluigi Barbieri

Professore associato di Chimica dell'Ambiente e dei Beni Culturale Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste



- Presidente dell'Ordine Regionale dei Chimici e dei Fisici del Friuli Venezia Giulia
- Consulente del Sindaco di Trieste per problemi di inquinamento e di chimica ambientale;
- Referente per la convenzione tra DSCF e Regione Autonoma FVG su tematiche di inquinamento industriale
- Rappresentante dell'Università di Trieste @ Comitato scientifico di ARPA FVG
- Esperto di UNI nel "gruppo ad hoc sull'impatto odorigeno" e nei CEN / TC264 / WG2 e WG41
- Componente del gruppo di odori di AIDIC
- Già co-fondatore di ARCO SolutionS srl «Centro Odori», spin off di Univ. di Trieste
- Già consulente (CTU) per la Procura della Repubblica di Trieste

APPROCCIO INTRODOTTO CON

S. Licen, G. Barbieri, F. Stel, M. Strappini, P. Barbieri

Molestie olfattive, nasi elettronici e sistemi integrati intelligenti per la caratterizzazione strumentale e sensoriale degli impatti odorigeni nell'aria ambiente

BEA-Il Bollettino degli Esperti Ambientali - 67, 2016, 7-18

ARTICOLATO IN

S. Licen, G. Barbieri, A. Fabbris, S.C. Briguglio, A. Pillon, F. Stel, P. Barbieri,

Odor control map: Self organizing map built from electronic nose signals and integrated by different instrumental and sensorial data to obtain an assessment tool for real environmental scenarios,

Sensors and Actuators B: Chemical, 263, 2018, 476-485, https://doi.org/10.1016/j.snb.2018.02.144.

OGGETTO DI APPROFONDIMENTI PRESENTATI A CONGRESSI

S. Licen, S. Cozzutto, G. Barbieri, P. Barbieri

Prediction of odour concentration by use of Supervised Kohonen Networks on electronic nose signal records of odorant samples and real environment air samples

XXVII Congress of the Analytical Chemistry Division of the Italian Chemical Society, Bologna, September 16-20, 2018

IN SVILUPPO...

ODORE: *ODOUR:* <u>SENSAZIONE</u> PERCEPITA TRAMITE L'ORGANO DELL'OLFATTO NELL'ANNUSARE ALCUNE SOSTANZE VOLATILI [EN ISO 5492:2009 Sensory analysis - Vocabulary]

Effetti di sostanze volatili sulla fisiologia umana:

percezione olfattiva (<u>I stadio percettivo</u>, <u>II cognitivo</u>), irritazione, stimolazione endocrina (tossicità a concentrazioni critiche)



Ca.350 tipi di neuroni olfattivi diversi (L.Buck e R.Axel Nobel 2004)



Ognuno di noi ha, nel proprio naso, circa sei milioni di recettori di odori di circa trecentocinquanta tipi diversi. La distribuzione di questi recettori varia da persona a persona, al punto che l'olfatto di ciascuna persona può essere considerato come "impronta olfattiva".

E' impatto soggettivo, oggettivabile/misurabile

1. SE NON C'E' PRESENZA DI INDIVIDUI «SENZIENTI», NON C'E' ODORE

Keyword

2. Risulta quindi rilevante la *valutazione dell'odore ai recettori* dov'è presente la popolazione senziente, alle immissioni (ricadute delle emissioni).

Il metodo normato per rilevare l'odore nell'aria ambiente è costituito attualmente dalle ispezioni sul campo (field inspections).

La UNI EN 16841:2016 «Determinazione dell'odore in aria ambiente mediante indagine in campo» Parte 1 (metodo a griglia) e Parte 2 (metodo a pennacchio) è stata pubblicata nel novembre 2016:

"This European Standard supplement the dynamic olfactometry method described in EN 13725 which is generally only suitable for measurement of odour emissions at source as the practical lower detection limit is typically ≥ 10 ou_E/m³, and cannot be applied directly to determine odour exposure in the field."

"The methods for measuring odour presented in this European Standard make direct use of the effect of odorants on the human sense of smell. The standard involves the use of qualified human panel members in the field to directly assess the presence of recognizable odour in ambient air, and provide data that can be used to characterize odour exposure in a defined assessment area."

Campagne olfattometriche condotte sul campo con panel di esaminatori addestrati

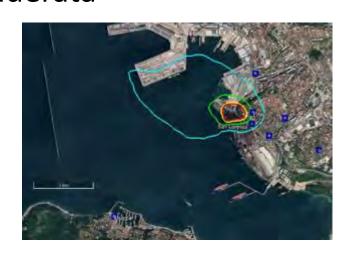
Grid method

Indagine di lunga durata (1 anno) al fi ottenere una mappa di esposizior odori riconsocibili su un area selezio

più indagini di ndizioni meteo) dell'odore 3. METODO DI INDAGINE «DISCONTINUA»

CRITICITÀ PER CASI CON SIGNIFICATIVA VARIABILITÀ DI EMISSIONI (COSTI – ORGANIZZAZIONE - COPERTURA NON CONTINUA (FIDOL)) 4. La stima delle immissioni viene effettuata anche con misure alle sorgenti emissive (SOER (ou/m2/s), Emission Rate (ou/s)) e valutazione della dispersione delle unità di odore in atmosfera, modellando variabilità meteorologica sulla specifica orografia, DTM.

L'affidabilità delle stime modellistiche per le ricadute sul territorio dipende molto dalla accuratezza della descrizione delle emissioni (variabili nel tempo) della sorgente emissiva considerata



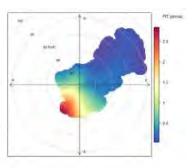


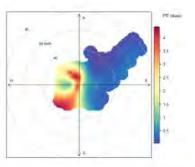
Con questo approccio, come tenere in conto emissioni fuggitive?

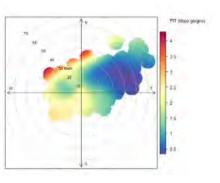
SERVE VALIDAZIONE DEI MODELLI!!!

Possono risultare molto utili i sistemi strumentali di monitoraggio in continuo dell'odore la cui standardizzazione procedurale e' oggetto di lavoro del CEN TC264/WG41 e in UNI

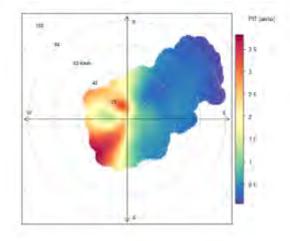
5. Dal punto di vista del recettore, ha rilevanza caso di odore (effetto) da emissioni multisorgente con pattern variabili nel tempo







Sito PIT - via Pitacco $\label{eq:TRIMESTRE 08/12/17 a 07/03/18}$ Polar plot H_2S ($\mu g/m^3$)



Sito PIT - via Pitacco
ANNO ottobre 2017-settembre 2018
Polar plot H₂S (μg/m³)

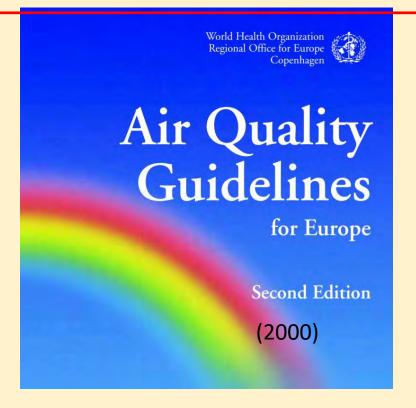
Sito PIT - via Pitacco
TRIMESTRE da 08/06 a 07/09
Polar plot H₂S (μg/m³)

6. Ciò che importa è **ridurre esposizione al recettore / segnalazioni** (Frequenza Intensita' Durata delle molestie olfattive)

Quando consideriamo significativi gli impatti sensoriali? Rilevanza secondo l'OMS

Costituzione dell'Organizzazione Mondiale della Sanità: Principi

La salute è uno stato di completo benessere fisico, mentale e sociale e non semplicemente l'assenza di malattia o infermità.



Criteria for consideration of sensory effects

Some of the substances selected for evaluation have malodorous properties at concentrations far below those at which toxic effects occur. Although odour annoyance cannot be regarded as an adverse health effect in a strict sense, it does affect the quality of life. Therefore, odour threshold levels have been indicated where relevant and used as a basis for separate guideline values.

For practical purposes, the following characteristics and respective levels were considered in the evaluation of sensory effects:

- intensity, where the detection threshold level is defined as the lower limit
 of the perceived intensity range (by convention the lowest concentration
 that can be detected in 50% of the cases in which it is present);
- quality, where the recognition threshold level is defined as the lowest concentration at which the sensory effect, such as odour, can be recognized correctly in 50% of the cases; and
- acceptability and annoyance, where the *nuisance threshold level* is defined as the concentration at which not more than a small proportion of the population (less than 5%) experiences annoyance for a small part of the time (less than 2%); since annoyance will be influenced by a number of psychological and socioeconomic factors, a nuisance threshold level cannot be defined on the basis of concentration alone.

During revision of the guidelines, the problems of irritation (for example, of the skin) and headache were also considered as possible problems of annoyance. It was agreed that headache should be regarded as a health endpoint and not merely as a matter of annoyance.

Impatto olfattivo: colpisce piccola parte della popolazione?

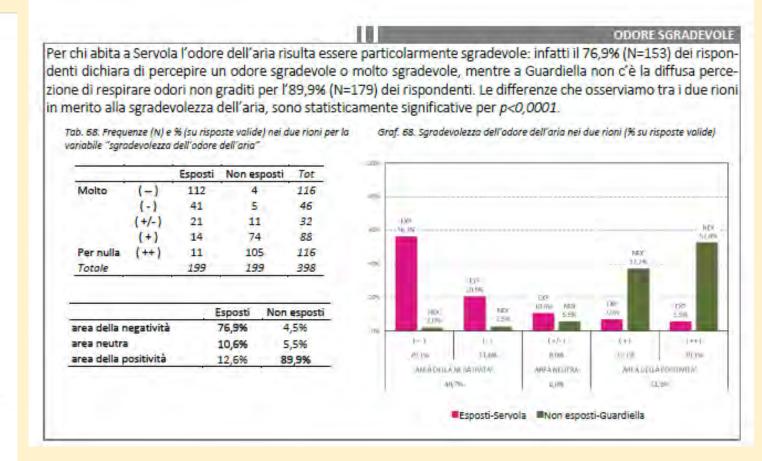


Un impatto olfattivo non sporadico diviene molestia



Indicatori di stress e inquinamento industriale Analisi di un contesto a forte insediamento produttivo

REPORT ANALITICO



documenti.comune.trieste.it/ambiente/Report_21%2 Onovembre%202016.pdf

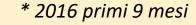
www.openstarts.units.it/bitstream/10077/13491/1/P oliarchie 2 2016.pdf

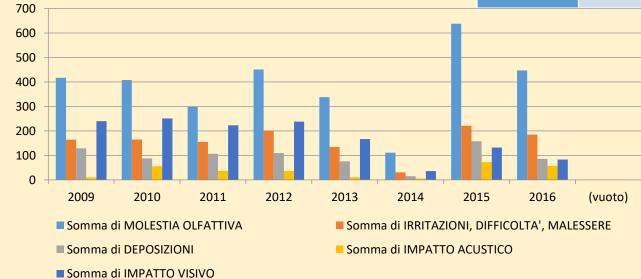


SEGNALAZIONI ALLA POLIZIA LOCALE

Una singola segnalazione si può riferire a varie molestie

	Segnalazionidi MOLESTIA OLFATTIVA	Segnalazionidi IRRITAZIONI, DIFFICOLTA', MALESSERE	Segnalazionidi DEPOSIZIONI	Segnalazionidi IMPATTO ACUSTICO	Segnalazionidi IMPATTO VISIVO	Somma annuale
2009	417	164	129	10	240	960
2010	408	165	88	56	251	968
2011	298	155	107	37	223	820
2012	451	201	110	36	238	1036
2013	338	135	76	11	167	727
2014	111	31	15	6	36	199
2015	638	221	158	73	132	1222
2016*	447	185	86	57	83	858
Totale complessivo	3108	1257	769	286	1370	





7. raccolta segnalazioni – identificazione hotspot – posizionamento dei sistemi di monitoraggio dell'odore "Grandi segnalatori"

Frequenza dei conteggi degli indirizzi di provenienza delle segnalazioni tra gennaio 2009 e settembre 2016.

hette di riga	Conteggio di INDIRIZZO	%	% cumulata	RIONE
ale complessivo	4694			
NTICELLO a	590	12,6		Servola
RDINI b	535	11,4		Servola
NTICELLO c	446	9,5		Servola
I LORENZO IN SELVA 25/d	385	8,2		Servola
NTICELLO e	361	7,7	49,4	Servola
1	ITICELLO a RDINI b ITICELLO c LORENZO IN SELVA 25/d	nette di riga INDIRIZZO ale complessivo 4694 TICELLO a 590 RDINI b 535 ITICELLO c 446 LORENZO IN SELVA 25/d 385	INDIRIZZO %	INDIRIZZO



	molestie olfattive	irritazioni, difficoltà, malessere	Deposizioni	impatto acustico	impatto visivo
PONTICELLO c	347	61	105	28	172
2009	45	9	16	2	27
2010	32	3	10	8	28
2011	41	9	14	8	33
2012	84	15	11	7	48
2013	45	13	6	1	24
2014	6	1	2	0	3
2015	<mark>57</mark>	5	<mark>28</mark>	1	4
2016	<mark>37</mark>	6	<mark>18</mark>	1	5

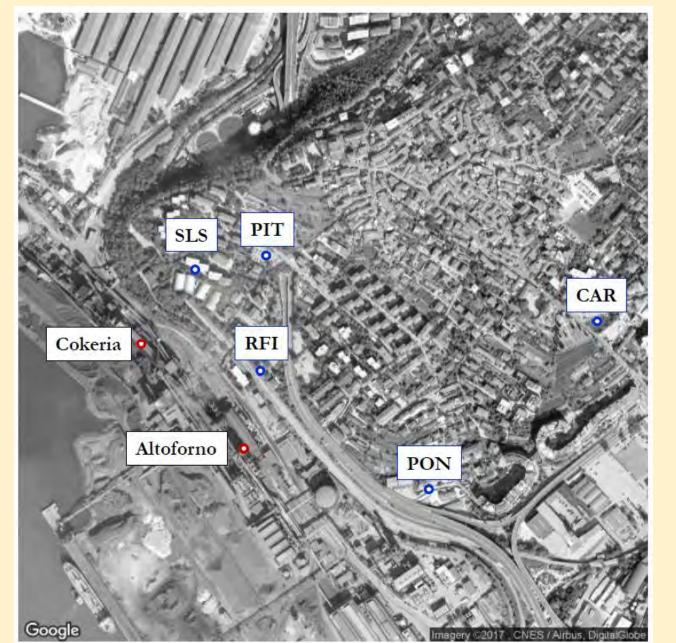
Tra 2015 e 2016, segnalazioni di odori giungono da tutti i siti; da vari civici di via Ponticello c'è indicazione frequente di deposizioni; da condomini di via San Lorenzo in Selva di impatto acustico

Numeri civici non esplicitati per rispetto privacy

* 2016 primi 9 mesi

	molestie olfattive	irritazioni, difficoltà, malessere	deposizioni	impatto acustico	impatto visivo
SAN LORENZO IN	201	86	20	55	186
SELVA 25/d					
2009	3	1	2	1	4
2010	5	2	2	1	7
2011	12	9	4	6	29
2012	34	19	4	5	53
2013	23	10	2	3	19
2014	18	5	0	5	6
2015	<mark>66</mark>	<mark>19</mark>	6	<mark>27</mark>	<mark>43</mark>
2016	<mark>40</mark>	<mark>21</mark>	0	<mark>7</mark>	<mark>25</mark>

POSITIONING THE MONITORING STATIONS IN THE RIGHT (Relevant) PLACE



Before 2016:

CAR, the only station under public control, official node of the public AQ monitoring network

RFI, just for industrial performance assessment (not AQ)

PIT, under private control In 2016:

PON starts to monitor (in Summer 2016)

In 2017:

Continuous noise monitoring close to

SLS

SLS starts to monitor In 2018:

SLS under control of ARPA

14

8. In base

a complessità del contesto territoriale e alle finalità dello studio (presenza/assenza odore; discriminazione sorgenti rilevanti; quantificazione della concentrazione di odore) si possono/devono impiegare strumenti di monitoraggio dell'odore diversi.

Maggiore il dettaglio necessario, più sorgenti, maggiore è la complessità del background, più odoranti significativi e maggiore variabilità (intensità, si/no di sorgenti; meteorologia)

maggiore sarà il numero di sensori e alta frequenza di acquisizione dati e dati ancillari utili

Un panorama - datato ma utile - sulle tipologie di sensore: Albert, Keith J. and Lewis, Nathan S. and Schauer, Caroline L. and Sotzing, Gregory A. and Stitzel, Shannon E. and Vaid, Thomas P. and Walt, David R. (2000) Cross-Reactive Chemical Sensor Arrays. Chemical Reviews, 100 (7). pp. 2595-2626.

Bettina Malnic, Junzo Hirono, Takaaki Sato, Linda B. Buck Combinatorial Receptor Codes for Odors Cell, Vol. 96, 713–723, March 5, *1999*,

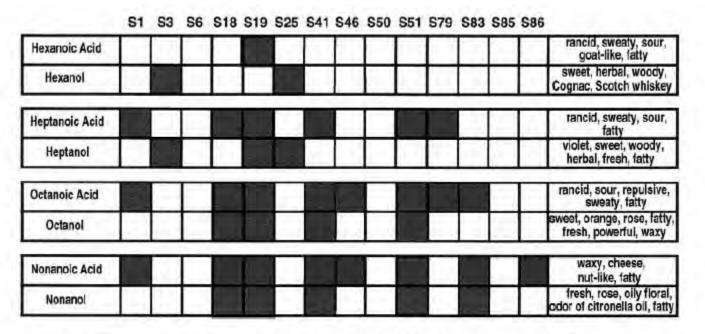
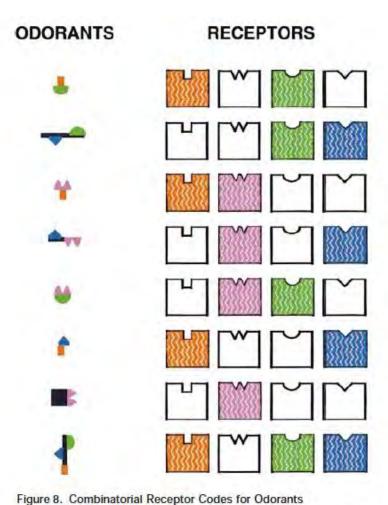


Figure 7. Comparison of the Receptor Codes for Odorants that Have Similar Structures but Different Odors

Aliphatic acids and alcohols with the same carbon chains were recognized by different combinations of ORs, thus providing a potential explanation for why they are perceived as having strikingly different odors. Perceived odor qualities shown on the right were obtained from Arctander (1969), The Good Scents Company (http://www.execpc.com/~goodscnt//index.html), and The Chemfinder Web Server (http://chemfinder.camsoft.com).



In this model, the receptors shown in color are those that recognize the odorant on the left. The identities of different odorants are encoded by different combinations of receptors. However, each OR can serve as one component of the combinatorial receptor codes for many odorants. Given the immense number of possible combinations of ORs, this scheme could allow for the discrimination of an almost unlimited number and variety of different odorants.

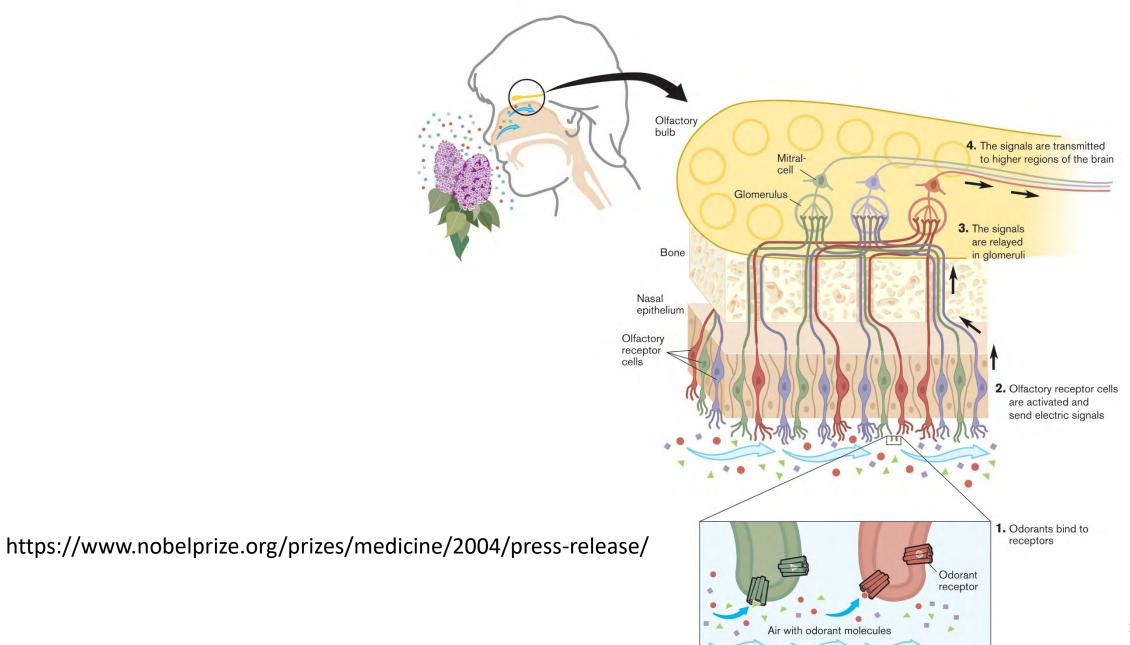
Più recettori olfattivi per una molecola, riconoscimento parziale e non specifico delle strutture chimiche - Un recettore risponde a molecole diverse

Keith J. and Lewis, Nathan S. and Schauer, Caroline L. and Sotzing, Gregory A. and Stitzel, Shannon E. and Vaid, Thomas P. and Walt, David R. (2000) *Cross-Reactive Chemical Sensor Arrays*. Chemical Reviews, 100 (7). pp. 2595-2626.

Conventional approaches to chemical sensors have traditionally made use of a "lock-and-key" design, wherein a specific receptor is synthesized in order to strongly and highly selectively bind the analyte of interest.1-6 A related approach involves exploiting a general physicochemical effect selectively toward a single analyte, such as the use of the ionic effect in the construction of a pH electrode. In the first approach, selectivity is achieved through recognition of the analyte at the receptor site, and in the second, selectivity is achieved through the transduction process in which the method of detection dictates which species are sensed. Such approaches are appropriate when a specific target compound is to be identified in the presence of controlled backgrounds and interferences. In addition, this type of approach is not particularly useful for analyzing, classifying, or assigning human value judgments to the composition of complex vapor mixtures such as perfumes, beers, foods, mixtures of solvents, etc.

An emerging strategy that is complementary to the conventional chemical sensing approach involves the use of sensor arrays. The utilization of sensor arrays is inspired by the superb performance of biological olfactory systems in odor detection, identification, tracking, and location tasks. Recent work has shown that the mammalian olfactory system contains approximately 1000 different olfactory receptor genes and that, upon odor stimulation, responses from many receptors are sent to the olfactory bulb and then on to the olfactory cortex for processing.7-10 Furthermore, recent experiments have shown that the olfactory receptors are not highly selective toward specific analytes; in fact, one receptor responds to many analytes and many receptors respond to any given analyte.

Odorant Receptors and the Organization of the Olfactory System



18

Ora sappiamo di più

Christopher D. Wilson, Gabriela O. Serrano, Alexei A. Koulakov & Dmitry Rinberg «*A primacy code for odor identity*» NATURE COMMUNICATIONS | 8: 1477 | DOI: 10.1038/s41467-017-01432-4

«... Odorants are sensed by olfactory sensory neurons (OSNs), each expressing one out of a large family of olfactory receptor (OR) genes. Axon terminals from OSNs expressing the same OR gene converge in a few discrete structures in the olfactory bulb (OB) called glomeruli. Odorants evoke responses in an ensemble of glomeruli to create a combinatorial representation of odor identity. This representation varies not only across odorants, but also across concentrations of a single odorant (Fig. 1a). Low concentrations of odorant evoke activity in only the most sensitive glomeruli, while increases in concentration result in recruitment additional less sensitive glomeruli. Despite this variability, odors' qualitative identities are preserved across a range of concentrations...."

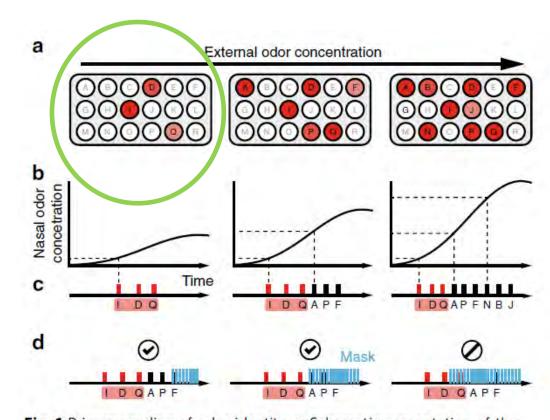


Fig. 1 Primacy coding of odor identity. **a** Schematic presentation of the patterns of glomerulus (OSN) activation for three concentrations of the same odor. The total number of active glomeruli increases with an increase of odor concentration. **b** The temporal profiles of the odor concentration in the nose during inhalation for three concentrations of the presented stimuli. Dashed lines represent concentration thresholds for representative glomeruli (horizontal) and corresponding response latencies (vertical). **c** Temporal sequence of glomeruli activation for three different odor concentrations. **d** Optogenetic mask schematic demonstrating the effect of the optogenetic mask on temporal sequences when presented late and early relative to odor-evoked temporal pattern

Curiosità: Per indagini discontinue (caratterizzazione qualitativa) ci sono già strumenti sul mercato

"The EssenceChip™ contains the Aromyx patented bioassay in an industry standard and common formfactor called a well plate.

Each "well" of the EssenceChip plate contains a unique human olfactory receptor. Human olfactory receptos respond to one or multiple molecules known as <u>ligands</u>.

When the EssenceChip™ a well plate is exposed to a smell or taste, the bio-assay absorbs the smell or taste molecules and activates a signal cascade exactly the same as in the human nose.

After being exposed to a taste or smell, the EssenceChip™ is then inserted in a <u>plate reader</u> and the digital measurement of the smell or taste is captured.

Plate readers "read" each hole in a well plate by using either Fluoresence or FRET."





CASI

Facile

una sorgente, un odorante a bassa soglia di percezione olfattiva (che attiva il primo pattern di glomeruli) – obiettivo: odore si / no

-> sufficiente un sensore / analizzatore sensibile e selettivo (es. H2S)

• • •

• • •

Difficile

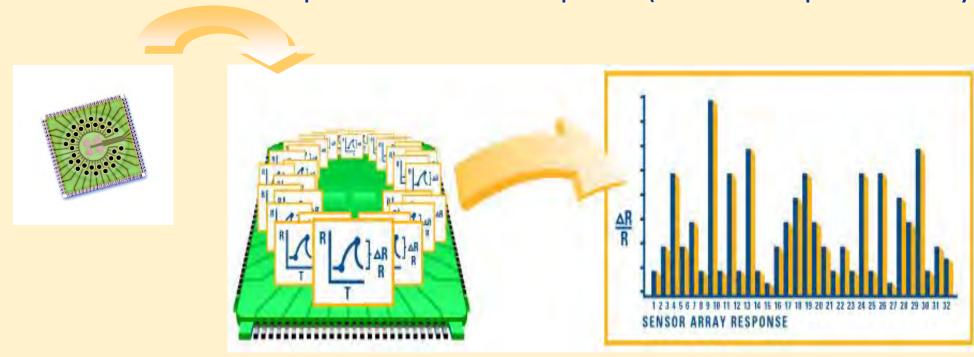
più sorgenti, emissioni variabili, diversi odoranti (che attivano diversi pattern di glomeruli)) e soglie di percezione olfattiva comparabili – obiettivo: anche quantificare intensità /concentrazione di odore associate a molestia

-> necessari sensori sensibili e selettivi per i diversi marker + eventuali sensori con soglia di attivazione maggiore per graduare risposta (Cross-Reactive Chemical Sensor Arrays)

Tecnologia Sensoristica –

Rilevazione di composti volatile basata su un insieme organizzato (array) di sensori

Buona soddisfazione con polimeri nanocompositi (Nano Composite Array - NCA)



Nathan S. Lewis

Comparisons between Mammalian and Artificial Olfaction Based on Arrays of Carbon Black–Polymer Composite Vapor Detectors Acc. Chem. Res., 2004, 37 (9), pp 663–672 DOI: 10.1021/ar030120m

9 Esempio di IOMS – instrumental odour monitoring system

Un sistema di sensori ibrido con a bordo diverse tipologie di sensori (NCA+MOS+PID),

coordinato ad un campionatore attivabile da remoto



Produce dati con frequenza al minuto e consente di raccogliere campioni d'aria da analizzare in laboratorio in caso di segnalazioni di molestia.

10. L'addestramento del sistema / training

Il nostro approccio è inizialmente non supervisionato (unsupervised - NTA 9065:2012 Air quality – Electronic air monitoring – Odour (nuisance) and safety)

si procede alla rilevazione di segnali del sistema multisensore per un periodo rappresentativo (anche mesi) per mappare variabilità della composizione dei vapori rilevabili nel sito

si identificano quindi vettori/pattern ricorrenti che vengono poi raggruppati (algoritmo Self Organizing Map)

Unsupervised data elaboration by Artificial Neural Networks: Sensazione Self Organizing Maps (SOM) (dato empirico, Memoria («Pattern ricorrenti»

DATO SENSORIALE, INFORMAZIONE MEMORIZZATA, PRIMA GENERALIZZAZIONE

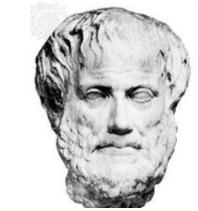
sperimentale) 2nd level **Esperienza:** non è singola sensazione ma vengono appresi) 1st level l'accumularsi di sensazioni grazie alla memoria: mettendo insieme una serie di casi singoli si riesce ad arrivare ad una prima forma di generalizzazione («Che cosa») POWERFUL DATA VISUALIZATION SELF CLUSTERS EXPERIMENTAL DATA

complex and statistically non **NEURONS** linear relationships Neuron vectors have simple geometric relationships (distances)

> but still they represent the variability of the experimental data

ORGANIZING MAP

> Neurons are grouped in clusters according to similarity, using hierarichical clustering algorithms



SIMPLIFICATION and INFORMATION EXTRACTION

Kohonen, T. (2001). Self-organizing maps, third ed. Berlin: Springer.

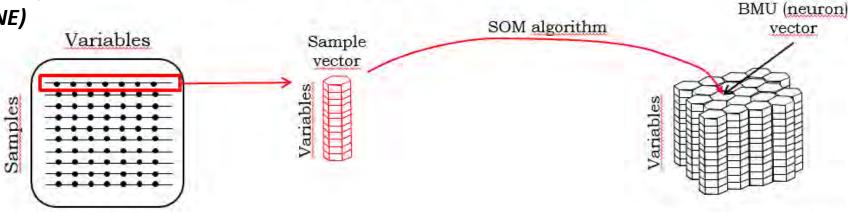
Experimental data have

Himberg, J., Ahola, J., Alhoniemi, E., Vesanto, J., Simula, O., 2001. The Self-Organizing Map as a Tool in *Knowledge* Engineering DOI:10.1142/9789812811691 0002

DA «SENSAZIONE» (VETTORE DI DATI RILEVATI DAI SENSORI) A PATTERN MEMORIZZATO (NEURONE)

How the SOM algorithm works

DA «TABULA RASA» A UN MODELLO DEI DATI SENSORIALI, UNA MAPPA DELLA REALTA' OGGETTO DI STUDIO

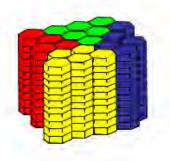


 A sample is presented to the initialized SOM (the map dimension ratio depends on the first two eigenvectors of the data - <u>Vesanto</u> 2000);

EXPERIMENTAL DATA

- 2. The algorithm identifies (in terms of distance) the Best Matching Unit (i.e. neuron) for the sample;
- The Best Matching Unit (BMU) adjusts itself (decreasing the distance) and its neighbors according to the sample presented, thus it "learns" from the sample;
- 4. After all the samples are presented to the SOM 1 epoch is finished;
- The process can be iterated for a wisely selected number of epochs avoiding overfitting.

i.e. application of a k-means clustering algorithm



SELF ORGANIZING MAP

CLUSTERS

11 Visualizzazione bidimensionale non lineare - su più piani

I DIVERSI PIANI DELLA MAPPA RAPPRESENTANO CIASCUNO LA VARIABILITA' DI UN SENSORE NELLE SITUAZIONI DESCRITTE DALLA MAPPA (RAPPRESENTATIVITA'VERIFICABILE RISPETTO A NUOVI DATI SENSORIALI)

POSIZIONI VICINE NELLA MAPPA INDICANO GENERALMENTE RELATIVA SIMILITUDINE A SEGUITO DEL TRAINING CHE GENERA VETTORI CARATTERISTICI/NEURONI DELLA MAPPA MODIFICANDO BMU E SUO INTORNO, **MA** NON VI E' METRICA/DISTANZA LINEARE SULLA MAPPA (possono esserci aree omogenee e discontinuità, sulla base dell'eterogeneità dei dati sensoriali/vettori sperimentali impiegati nel training)

12. Interpretazione («il perché») dei raggruppamenti di vettori caratteristici/neuroni si ottiene correlando il modello (la mappa) dei dati prodotti dal sistema multisensore con altre matrici di dati che condividono con i dati del sistema multisensore una modalità di raccolta: il tempo a cui avviene l'evento.

Al tempo t_x in cui il dato prodotto dal sistema multisensore corrispondeva a vettore caratteristico k sulla mappa, si sono verificate:

- segnalazione di molestia olfattiva della cittadinanza,
- concentrazione di X ug/m3 di marker di sorgente (es. B/T o H2S) dal monitoraggio continuo «tradizionale»
- concentrazione di odore di Y uoE/m3, rilevata in laboratorio su campione prelevato in situ da campionatore attivato da remoto al tempo $t_x + \Delta_1 t$ ($\Delta_1 t$ piccolo)
- il vento spirava da direzione Z,
- evento critico in impianto!!! $a(t_x \Delta_2 t)$ è DATA FUSION

si identificano attributi caratteristici della *tipologie d'aria* identificate dall'applicazione delle SOM ai dati prodotti dal sistema multisensore (IOMS)

13 Somministrazione a IOMS di campione prelevato a sorgente e diluito per conferma di identificazione di tipologia d'aria associata a specifica/ specifiche sorgenti (classificazione)

Ques'operazione – che usualmente è considerata il cuore della fase di training di un naso elettronico - non è esaustiva se non è nota la variabilità delle risposte dei sensori *in situ* (effetto di variabilità del background)

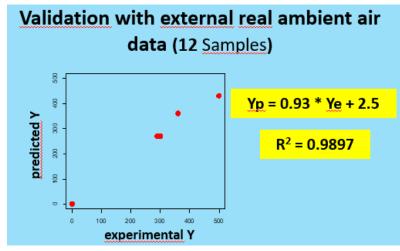
14 predizione concentrazione di odore banale con n butanolo- campione diluito/orientato/Super SOM/

Accanto a training per classificazione (es1: odore / non odore; es2: sorgente 1 sopra soglia / sorgente 2 sopra soglia / sorgente 2 sotto soglia / incognito)

È possibile definire una calibrazione dei pattern dei segnali del sistema multisensore in funzione della concentrazione di odore (UNI EN

13725: 2004) di campioni d'aria odorosi, generati con:

- odoranti specifici (es. n-butanolo);
- campioni di sorgente odorigena a diverse diluizioni;
- campioni d'aria ambiente odorosa a diverse diluizioni.



S. Licen, S. Cozzutto, G. Barbieri, P. Barbieri "Prediction of odour concentration by use of Supervised Kohonen Networks on electronic nose signal records of odorant samples and real environment air samples" XXVII Congress of the Analytical Chemistry Division Bologna, September 16-20, 2018

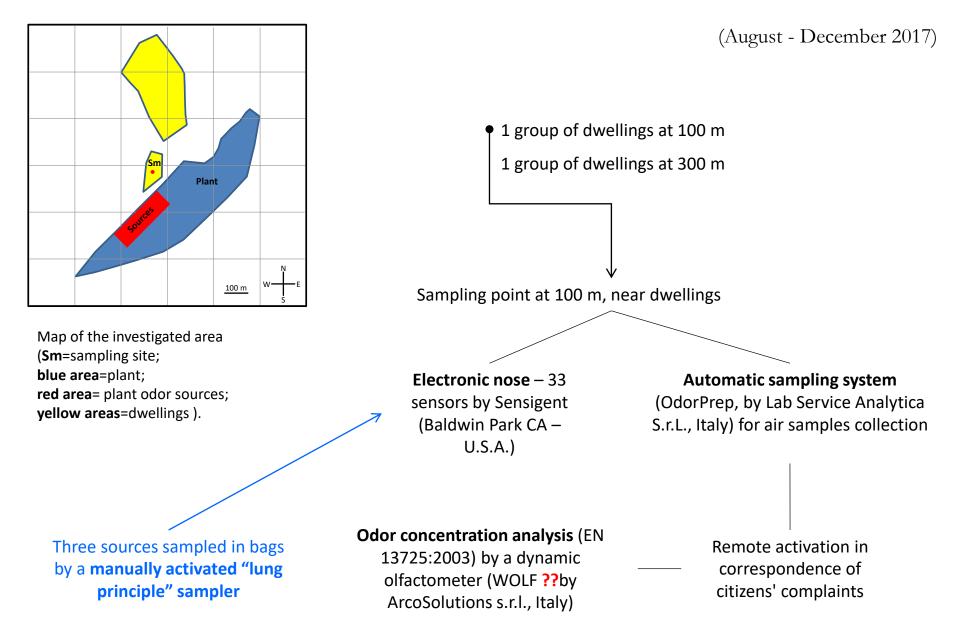
15. Possibile definire criterio numerico di anomalia = novità o malfunzionamento, necessità di estendere / aggiornare mappa (retraining) – apprendimento di nuovo fenomeno (training incrementale - mappa si espande – aumentano gli attributi)

Piccola distanza nello spazio a N dimensioni da propria BMU distante da tutte le altre (dato anomalo già presente nel training)

Grande distanza nello spazio a N dimensioni dalla BMU necessità di retraining (Errore di quantizzazione alto)

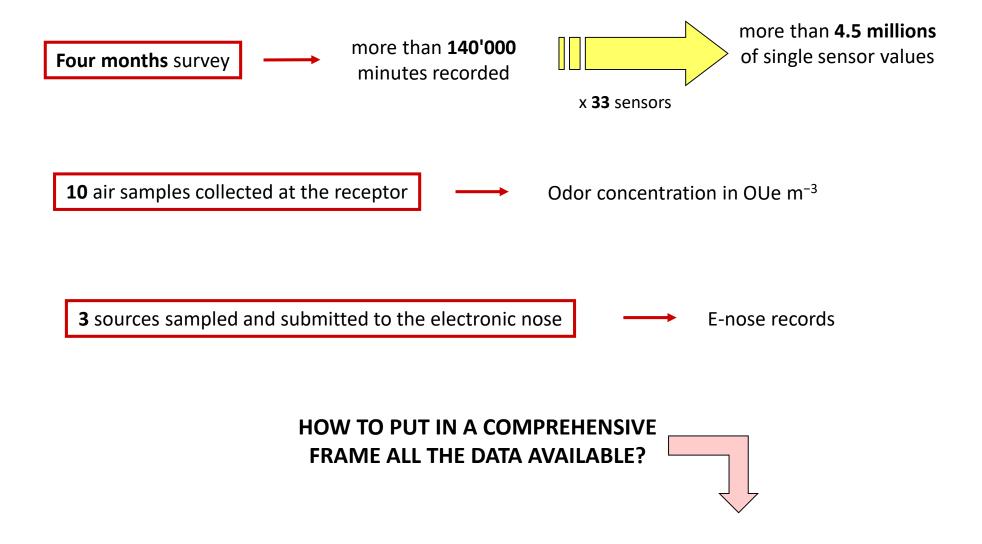
Muñoz, A., Muruzábal, J., 1998. Self-organizing maps for outlier detection. Neurocomputing 18, 33–60. doi:10.1016/S0925-2312(97)00068-4

CASE STUDY Bio-waste composting facility



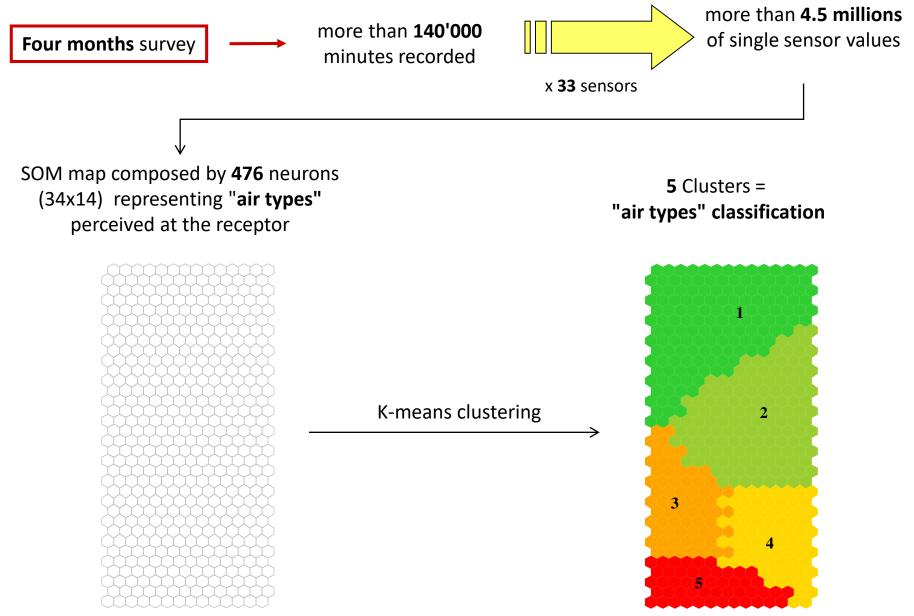
S. Licen, S. Cozzutto, M. Angelucci, P. Barbieri «Self Organizing Map algorithm as a tool for analysis, visualization and interpretation of electronic nose high dimensional raw data" NOSE 2018 Milan, 9-12 September 2018

DATA AVAILABLE



WE STARTED FROM THE ELABORATION OF E-NOSE AMBIENT AIR DATA BY SELF ORGANIZING MAP ALGORITHM

SELF ORGANIZING MAP BUILDING



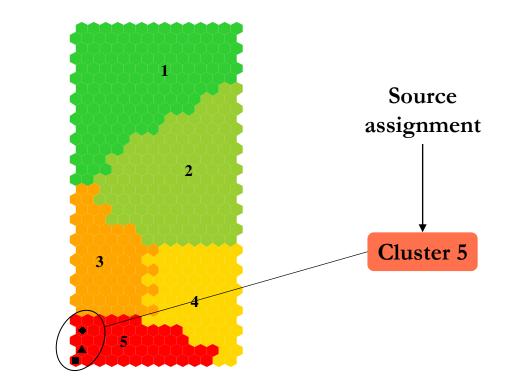
The neurons are depicted by hexagons stuck together in a 2D map

Cluster characterization (I)

3 source profiles recorded by the electronic nose

The source profiles were **projected** onto the map, thus:

- 1. The source profile is presented to the SOM model;
- 2. The algorithm identifies (in terms of distance) the **Best Matching Unit** (i.e. **neuron**) for the sample;
- 3. A symbol is depicted onto the map in correspondence of the assigned neuron



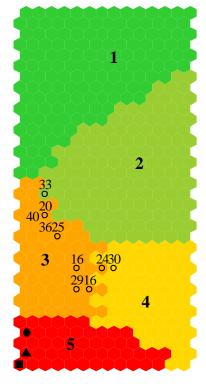
Source 1 ■
Source 2 ■
Source 3 ▲

Cluster characterization (II)

10 air samplings followed by olfactometric analysis (EN 13725)

They only common variable between high frequency data and ambient air samplings is the sampling date/time (2-3 minutes for each sample), thus:

- 1. The air sampling with OdorPrep date/time was identified;
- 2. The e-nose data vectors corresponding to the **same date/time** were identified;
- 3. The **map neurons** representing the abovementioned data vectors were identified;
- 4. The odor concentration values obtained by the olfactometric analysis were directly depicted onto the map over the abovementioned neurons (represented by hexagons)

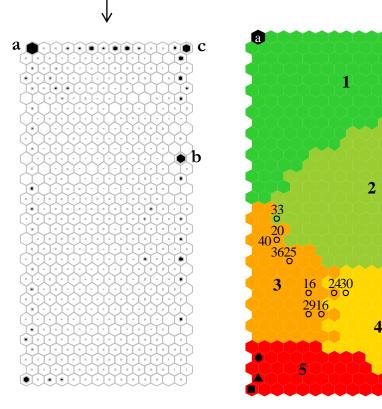


Odor concentration (European Odour Units/m³)

Cluster characterization (III): hits & cluster frequency (+ duration)

HITS = number of experimental vectors represented by each neuron

a-b-c: neurons representing the highest number of experimental vectors (hits):



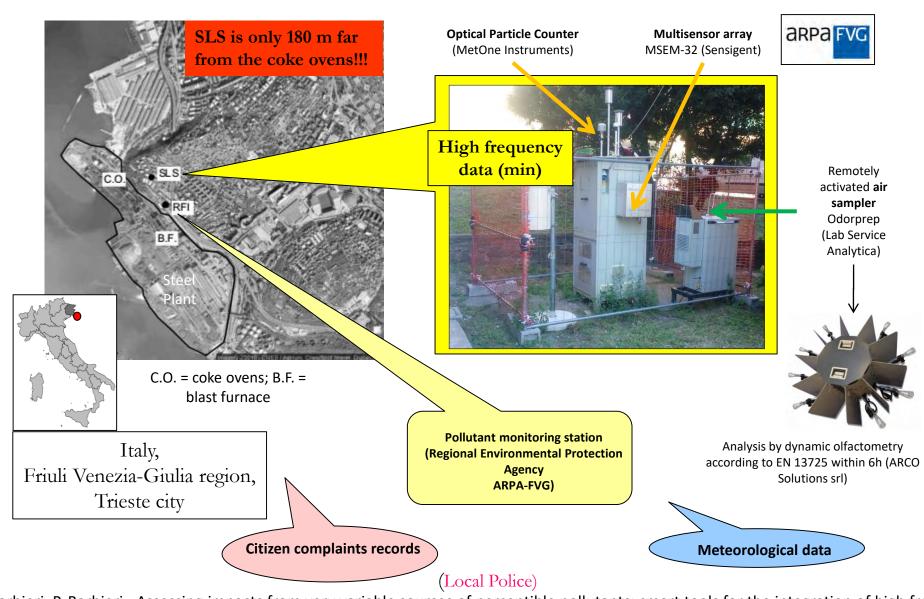
Cluster assignment:	Cluster frequency
1 – not odorous;	39 %
2 – not odorous;	25 %
3 – modestly malodorous;	12 %
4 – not determined;	12 %
5 –malodorous.	12 %

The filling of the hexagons is proportional to the number of hits

Cluster duration (%)

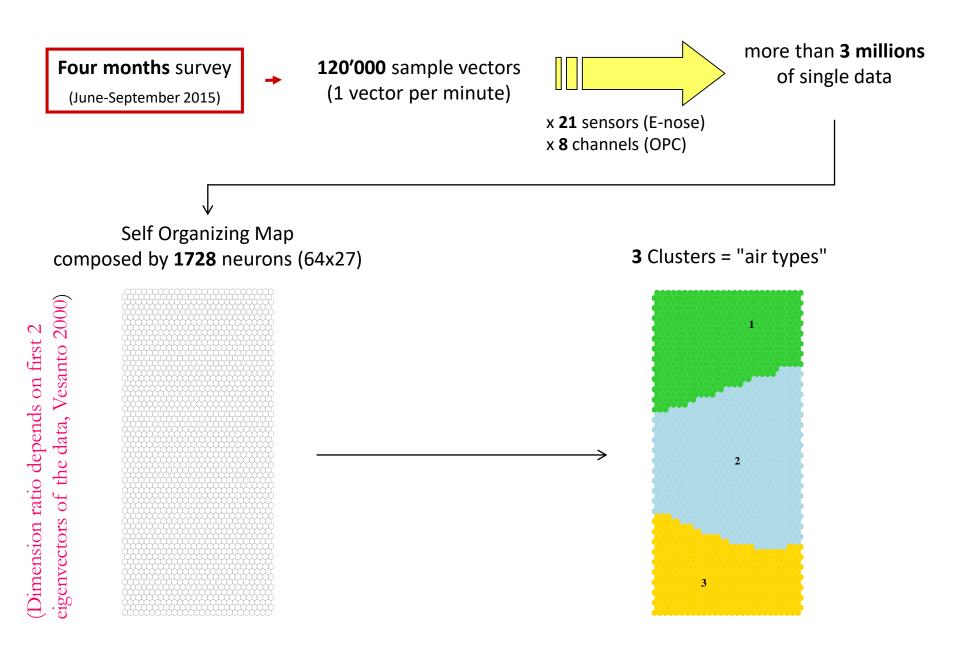
Cluster	0-1 h	1-2 h	2-4 h	4-8 h	8-12 h	12-24 h	24-48 h	48-60 h
1	71	8	4	4	6	5	1	1
2	82	9	4	3	1	1	0	0
3	86	5	4	4	1	0	0	0
4	93	3	1	2	1	0	0	0
5	84	4	4	4	4	0	0	0

A CASE STUDY AT RECEPTORS CLOSE TO A STEEL PLANT

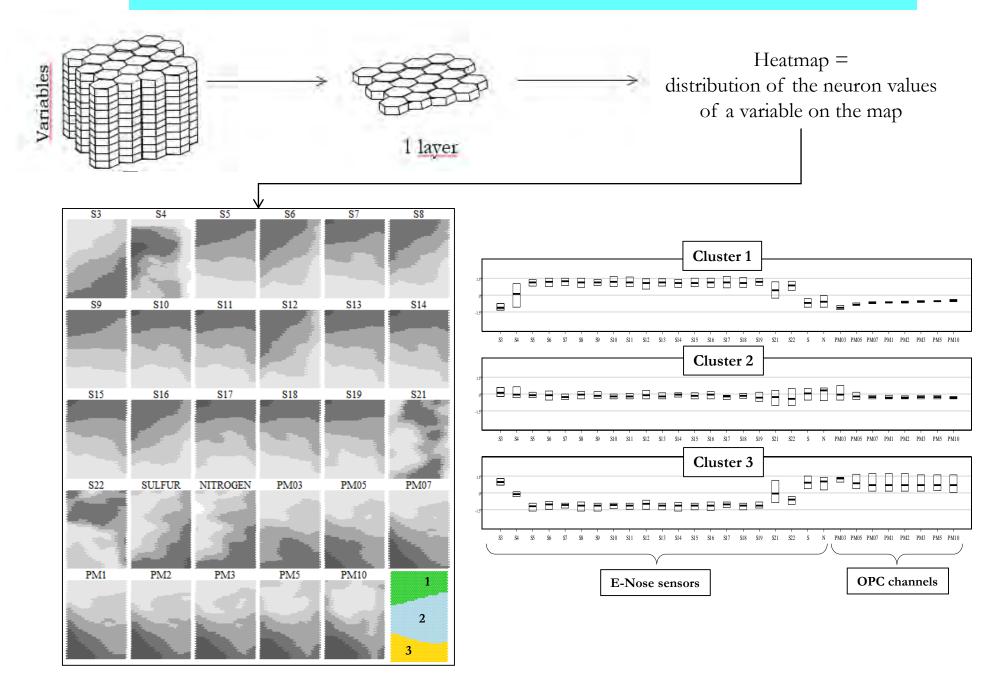


S. Licen, S. Cozzutto, G. Barbieri, P. Barbieri «Assessing impacts from very variable sources of perceptible pollutants: smart tools for the integration of high frequency instrumental data with ancillary chemical, meteorological and subjective information - XVII Congresso Nazionale di Chimica dell'Ambiente e dei Beni culturali Genova, 24-27 giugno 2018

SELF ORGANIZING MAP BUILDING



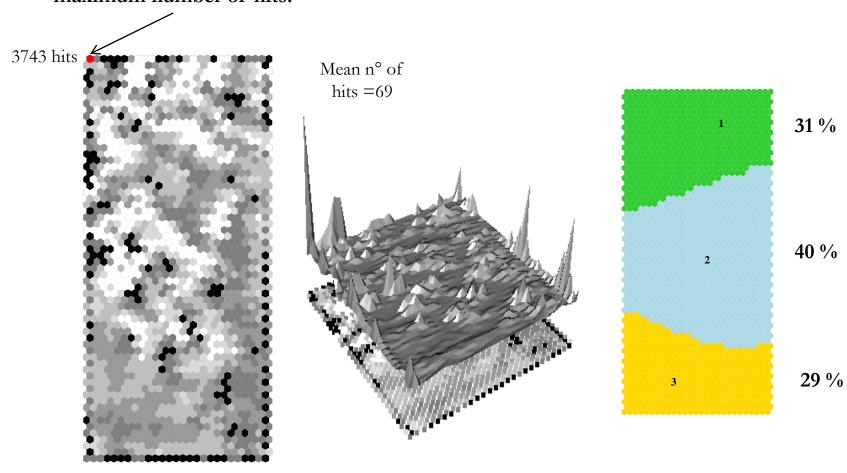
Cluster characterization: heatmaps & cluster profiles



Cluster characterization: hits & cluster frequency

HITS = number of experimental vectors represented by each neuron

Neuron representing the maximum number of hits:



Grayscale from white to black
→ Growing number of hits

Cluster characterization: scattered ancillary data

150 citizen complaints records classfied as «Odor» and/or «Dust»6 air samplings followed by olfactometric analysis (EN 13725)

They only common variable between high frequency data and scattered ancillary data is the sampling date/time, thus:

- 1. The scattered ancillary data date/time was identified;
- 2. The high frequency data vectors corresponding to the same date/time were identified;
- 3. The map neurons representing the abovementioned data vectors were identified;

4. The scattered ancillary data were directly depicted onto the map over the abovementioned neurons (represented by hexagons);

Odor concentration (European Odour Units/m³)

Odor concentration (500 complaints)

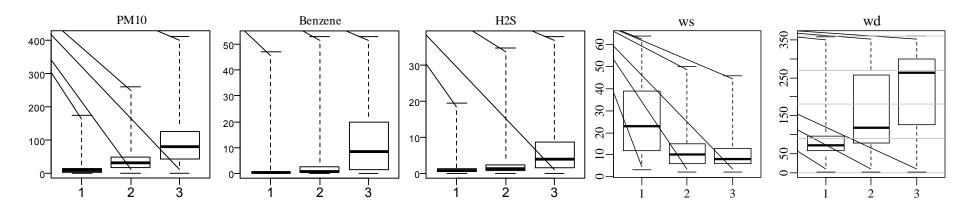
Citizen complaints

Cluster characterization: «medium» frequency ancillary data

2000 hourly vectors of pollutant data (benzene, CO, PM₁₀, H₂S, NO₂, NO_x)
2000 hourly vectors of wind data (speed and direction)

Pollutant and wind speed and direction data (collected 200 m apart – RFI) can be used as well, depicted in **boxplots** according to clusters:

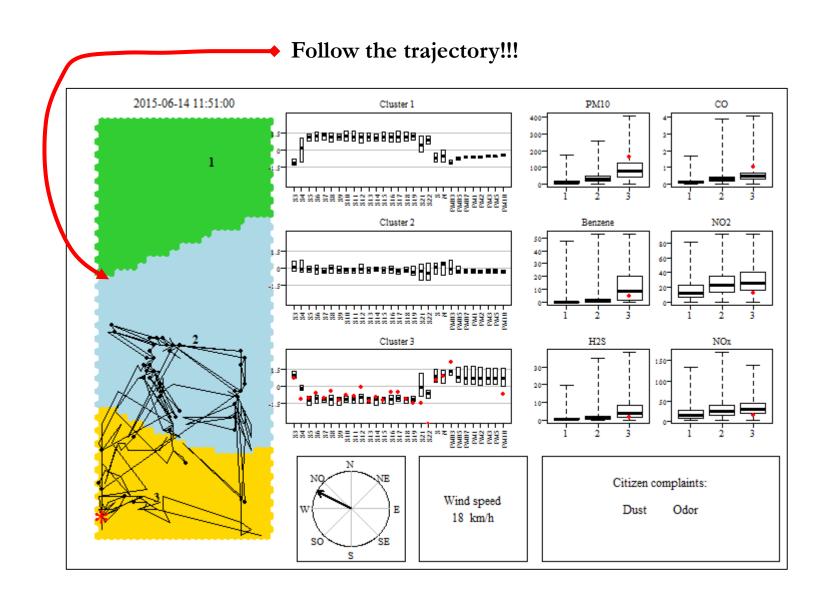
- 1. Each cluster represented a number of e-nose experimental data collected at specific date/time values.
- 2. The abovementioned devices outputs were grouped according to the same date/time values (i.e. according to the clusters) and the groups obtained were represented in boxplots.

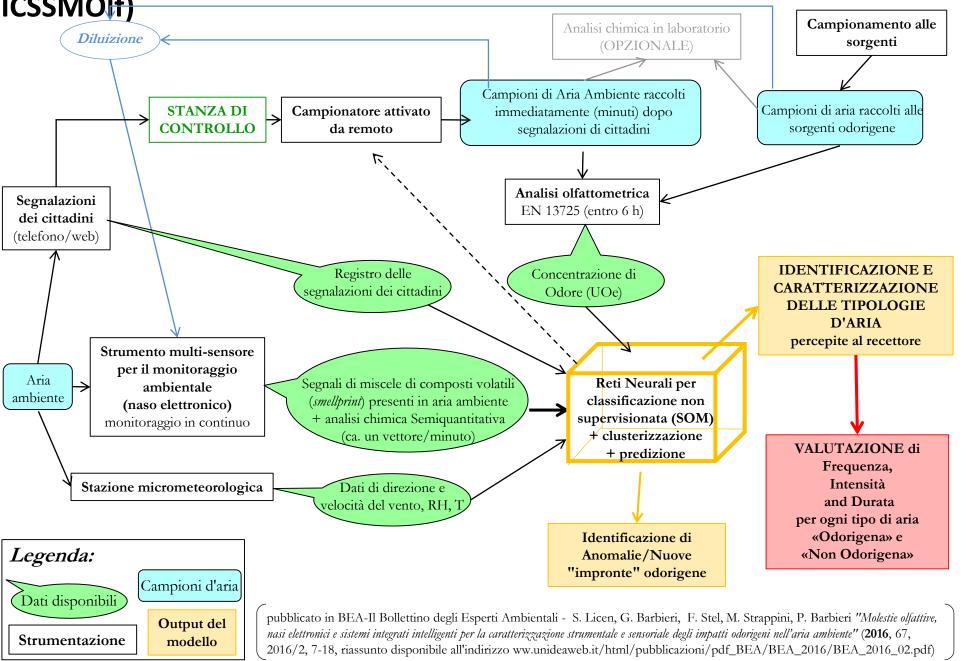


The combined use of all the available information led to the following cluster assignment:

Cluster assignment: 1- low impact; 2 – medium impact; 3 – high impact

BACK TO DETAIL





GRAZIE!

BARBIERP@UNITS.IT