**NUMER IDENTYFIKACYJNY // CONTRIBUTION ID**

**Sieci neuronowe w analizie widm masowych lotnych związków organicznych emitowanych z grzybów leśnych z rodzaju Lactarius// Neural networks in the analysis of mass spectra of volatile organic compounds emitted by forest mushrooms of the genus Lactarius**

**Autor // Author:** T. Wróblewski, A. Kamińska i A. Włodarkiewicz1

1 *Instutut Nauk Ścisłych i Techicznych, Uniwersytet Pomorski w Słupsku, ul. Arciszewskiego 22A, 76-200 Słupsk*

**Korespondujący autor // Corresponding Author:** tomasz.wroblewski@upsl.edu.pl

**Słowa kluczowe**: lotne związki organiczne, spektroskopia mas z reakcją przeniesienia protonu, sieci neuronowe// **Keywords**: volatile organic compounds, proton transfer reaction mass spectrometry, neural networks

Badania emisji lotnych związków organicznych (LZO) z organizmów żywych dotyczą roślin, bakterii czy grzybów. W przypadku tych ostatnich najczęściej obiektem badań są mikrogrzyby, a pomiary z reguły przeprowadzane są za pomocą metod chromatograficznych [1,2]. W niniejszej pracy przedstawione zostaną wyniki badań porównawczych emisji LZO z leśnych grzybów z rodzaju Lactarius za pomocą spektrometrii masowej z reakcją przekazu protonu (PTR-MS). Celem badań jest sprawdzenie, czy istnieją różnice w widmach masowych LZO pochodzących od grzybów podobnych do siebie, z których jedne są jadalne, a drugie niejadalne lub trujące. W tym celu wybrano trzy gatunki grzybów: mleczaj rydz, mleczaj wełnianka oraz mleczaj omszony. Badania przeprowadzono dla 189 próbek mleczaja rydza, 196 próbek mleczaja wełnianki oraz 120 próbek mleczaja omszonego.

Metodologia pomiarów została przedstawiona w pracy [3]. W skrócie, próbki grzybów o masach 50 g zostały umieszczone w szklanym naczyniu o pojemności 250 ml i przykryte folią aluminiową. Przez mały otwór w folii została wprowadzona do naczynia kapilara, przez którą zasysane było powietrze znad próbek do komory dryfu spektrometru PTR-MS, w której zachodzą reakcje przekazu protonu pomiędzy jonami hydroniowymi a molekułami LZO z próbek. Przykładowe widma masowe LZO z grzybów przedstawiono na Rys. 1.



Rys. 1. Porównanie widm masowych LZO dla mleczaja rydza (A), mleczaja wełnianki (B) i mleczaja omszonego (C).

W celu klasyfikacji grzybów określonego gatunku zastosowano sieci neuronowe MPL (Multilayer Perceptron, perceptron wielowarstwowy) przy użyciu programu Statistica. Z uzyskanych widm masowych wybrano sygnały jonowe dla dwóch grup stosunków masy do ładunku m/z: 69, 83, 111, 129 i 137 (5 zmiennych wejściowych) oraz 69, 83, 97, 111, 123, 129, 137, 141, 149 i 205 (10 zmiennych wejściowych). Dla każdej z grup przetestowano po 20 sieci neuronowych, dla których zastosowano algorytm uczenia Broydena – Fletchera – Goldfarba – Shanno (BFGS). Do aktywacji neuronów w warstwie ukrytej i wejściowej zastosowano następujące funkcje: liniową, logistyczną, tangens hiperboliczny oraz wykładniczą. Dobór różnych funkcji aktywacji miał na celu ocenę ich wpływu na skuteczność klasyfikacji danych, przy założeniu, że różne typy nieliniowości mogą lepiej odwzorowywać złożone zależności między sygnałami jonowymi a przynależnością gatunkową. Ponadto zastosowano podział danych na trzy podzbiory: próbę uczącą (70% danych), próbę testową (15% danych) oraz próbę walidacyjną (15% danych).

Wyniki testowania sieci neuronowych do klasyfikacji trzech gatunków grzybów z rodzaju mleczajów na podstawie sygnałów jonowych LZO uzyskanych za pomocą spektrometru PTR-MS przedstawiono w Tab. 1. Przy zastosowaniu 5 zmiennych wejściowych najlepsze wyniki uzyskano dla sieci z pięcioma warstwami ukrytymi oraz z logistyczną funkcją aktywacji neuronów zarówno dla warstw ukrytych, jaki i warstwy wyjściowej. Dla sieci, w których zastosowano 10 zmiennych wejściowych, najlepsze wyniki uzyskano dla sieci z czteroma warstwami ukrytymi, przy aktywacji za pomocą funkcji logistycznych.

Tab. 1. Wyniki jakości i błędów klasyfikacji trzech gatunków grzybów z rodziny Lactarius za pomocą sieci neuronowych dla 5 i 10 zmiennych wejściowych na podstawie widm masowych lotnych związków organicznych uzyskanych za pomocą spektrometru PTR-MS

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Sieć** | **Jakość** | | | **Błąd** | | | **Aktywacja** | |
| **Uczenie** | **Testowanie** | **Walidacja** | **Uczenie** | **Testowanie** | **Walidacja** | **Ukryte** | **Wyjściowe** |
| **MLP 5-3-1** | 0,964668 | 0,958773 | 0,960333 | 0,020133 | 0,027407 | 0,022352 | Tanh | Logistyczna |
| **MLP 5-9-1** | 0,968248 | 0,975945 | 0,964538 | 0,018205 | 0,016774 | 0,019827 | Tanh | Logistyczna |
| **MLP 5-5-1** | 0,961111 | 0,967993 | 0,962027 | 0,022115 | 0,021758 | 0,021152 | Logistyczna | Logistyczna |
| **MLP 5-8-1** | 0,958412 | 0,965044 | 0,956013 | 0,023624 | 0,023634 | 0,024393 | Wykładnicza | Tanh |
| **MLP 5-6-1** | 0,960212 | 0,965069 | 0,965515 | 0,022614 | 0,023604 | 0,019051 | Wykładnicza | Tanh |
| **MLP 10-11-1** | 0,992230 | 0,990906 | 0,986928 | 0,004493 | 0,006613 | 0,007307 | Logistyczna | Liniowa |
| **MLP 10-10-1** | 0,994284 | 0,990225 | 0,986240 | 0,003305 | 0,007250 | 0,007724 | Tanh | Liniowa |
| **MLP 10-12-1** | 0,991065 | 0,999171 | 0,987127 | 0,005239 | 0,000598 | 0,007433 | Logistyczna | Wykładnicza |
| **MLP 10-4-1** | 0,995190 | 1,000000 | 0,988289 | 0,002817 | 0,000000 | 0,006731 | Logistyczna | Logistyczna |
| **MLP 10-6-1** | 0,992231 | 0,998448 | 0,988722 | 0,004490 | 0,001086 | 0,006291 | Tanh | Logistyczna |

Z powyższych badań można wyciągnąć wniosek, że sieci neuronowe mogą być z powodzeniem zastosowane do klasyfikacji podobnych do siebie pod względem morfologicznym gatunków grzybów z rodzaju mleczajów na podstawie widm masowych emitowanych z nich lotnych związków organicznych.

**References**

[1] D. J. Spakowicz, S. A. Strobel, Appl. Microbiol. Biotechnol. 99, 4943 (2015).

[2] K. Karlshøj, T. O. Larsen, J. Agric. Food Chem., 53, 708 (2005).

[3] T. Wróblewski, A. Kaminska, A. Włodarkiewicz, D. Ushakou, Acta Phys. Pol. B, 13, 899 (2020).

[4] A. Korpi, J. Järnberg, A.-L. Pasanen, Crit. Rev. Toxicol., 39, 139, (2009).