

基于神经网络的微生物生长预测模型

Prediction model of microbial growth based on neural network

侯奇¹ 刘静¹ 管晓²

HOU Qi¹ LIU Jing¹ GUAN Xiao²

(1. 上海海事大学信息工程学院, 上海 201306; 2. 上海理工大学医疗器械与食品学院, 上海 200093)

(1. College of Information Engineering, Shanghai Maritime University, Shanghai 201306, China; 2. School of Medical Instrument and Food Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China)

摘要: 鉴于现有大多数预测模型都是经验型模型, 含有过多没有生物解释的参数, 提出一个基于神经网络的非经验型的微生物生长预测模型, 并以李斯特菌为研究实例, 利用其试验环境的温度、pH 值和 Aw 值建立 BP 神经网络二级生长模型, 在不同环境条件下拟合微生物的生长速率和倍增时间, 结合微生物初始浓度对一级模型的时间与微生物生长情况进行预测, 最后利用李斯特菌生长数据对模型进行仿真测试。试验结果证明, 该模型可以对微生物生长的各个时期进行有效预测, 相对于经验模型, 该模型更加适用于微生物生长动力学预测, 有效地解决了经验型模型的参数问题。

关键词: 微生物; 生长预测模型; 神经网络

Abstract: Most of the existing predictive models are empirical models which contain too many parameters without biological explanations. In this study, a non-empirical growth prediction model based on neural network was proposed. A BP neural network secondary growth model was established by using *Listeria monocytogenes* as an example, using the temperature, pH value and Aw value of the experimental environment. The growth rate and double time of microbes were fitted in different environments. Subsequently, combining with the initial concentration of microorganisms, the primary model of microorganism growth with time was predicted. Finally, the growth data of *Listeria monocytogenes* were tested, and the experimental results showed that the model could predict the growth period of microbes. Compared with the empirical model, this non-empirical prediction one was more suitable for predicting the microbial growth dynamics, and also the parameters of the empirical model could be solved effectively.

Keywords: microorganism; growth prediction model; neural networks

基金项目: 国家自然科学基金项目(编号: 31701515)

作者简介: 侯奇, 男, 上海海事大学在读硕士研究生。

通信作者: 刘静(1979—), 女, 上海海事大学副教授, 博士。

E-mail: jingliu@shmtu.edu.cn

收稿日期: 2017-12-19

预测微生物学本质上是基于微生物群体对环境因素反应的可重现, 利用过去观察到的试验数据通过数学模型预测食物环境中的微生物行为, 并用试验结果证明模型所得到的误差不大于微生物试验所带来的误差^[1]。由 Whiting 等^[2]提出的基于变量类型的分类方法将预测微生物数学模型分为一级模型、二级模型和三级模型, 其中二级模型描述微生物在食品中的生长情况与环境条件之间的关系, 代表性模型包括反应面模型、平方根模型和多项式模型等, 而现有的大多数二级模型对微生物生长的延滞期、指数期、稳定期和衰亡期并不能同时进行很好地预测。

Fujikawa^[3]提出的数学模型中, 以 Baranyi 模型为基础, 通过环境各方面的响应函数作为 Baranyi 参数的二级模型, 对指数期和稳定期能够很好地预测, 但是对延滞期并不能进行有效地拟合。为了提高对延滞期的预测精度, Baranyi^[4-5]和 Marc 等^[6]提出了多种延滞期的模型, 但这些模型都太过针对性, 对其他阶段不能起到良好的预测。Huang^[7]提出滞后相变系数模型, 它能够对各个时期有良好的过渡效果, 但是只有滞后相变系数取值为 25 时, 其模型才拟合得较好, 因此缺少通用泛化性。然而, 这些模型中的参数都是凭经验建立, 其中很多参数没有实际意义, 并且参数模型通常需要进行校准避免误差的不确定性^[8-9], 因此很难确切地反映环境因素对生长预测的影响。

部分研究者^[10]采用人工神经网络方法(artificial neural networks, ANN)进行建模, 在存在不确定数据和测量误差的情况下, 基于 ANN 的模型会比经验模型产生更准确的预测, 如 Xiao^[11]、Kodogiannis^[12]用 ANN 来拟合环境因素作为模型中的参数, 但其模型实质还是半参数化的预测模型, 并没有很好地利用 ANN 的优点。本研究拟提出一种基于 BP&ELMAN 神经网络的非经验化模型, 以期解决经验型模型参数过多的问题和提高模型预测的准确性。

1 人工神经网络

1.1 BP 神经网络

BP 神经网络的特点是逐步将输出错误反向传播, 解决

了隐含层连接权学习问题。用于输入输出模型的大量映射关系,其学习规则采用最快下降法,以实现平方的最小误差和,使得它常用于复杂问题的建模^[13],已经在图像、视频及手写识别等领域中实现了其最先进的性能,并且可以充分逼近任意复杂的非线性关系^[14]。

1.2 ELMAN 神经网络

ELMAN 网络是局部反馈连接的递归神经网络,具有动态映射功能,并使系统具有适应时变特性的能力^[15],其隐藏层使用一个具有与典型微生物生长曲线相似形状的 Sigmoid 函数,这让神经网络不需要使用大量节点就可以获得相应微生物生长曲线^[16],关联层通过联接记忆上一个时刻的隐层状态连同当前时刻的网络输入一起作为隐层的输入,相当于状态反馈,便于作时间类预测。

2 基于神经网络的预测模型应用与分析

2.1 基于神经网络的预测模型

根据试验需求设计网络具有 3 个输入神经元(温度、pH 和 Aw),5 个隐藏神经元和 2 个输出神经元(生长速率和倍增时间)的模型,可使网络架构具有良好的表现。本研究使用的 BP 网络结构图见图 1。梯度方法用于校正反向传播算法中的权重,阈值函数见式(1):

$$y = f\left(\sum_{i=1}^m w_i x_i - \theta\right), \quad (1)$$

式中:

x_i ——输入向量 $(x_1, x_2, x_3)^T$, x_1, x_2, x_3 分别为温度、pH 和 Aw;

m ——输入向量的个数;

w_i ——权系数;

θ ——阈值;

y ——输出集。

传递函数必须可微,采用 Log-Sigmoid 函数,其函数定义见式(2):

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}, \quad (2)$$

式中:

x ——输入值。

x 的范围是包含整个实数域的,函数值在 0~1,它在分类时比线性函数更为精确。

由于微生物生长预测是关于时间动态化的过程,ELMAN 神经网络对历史状态数据具有敏感性,增加了网络处理动态信息的能力,达到动态建模的目的,能使预测值均

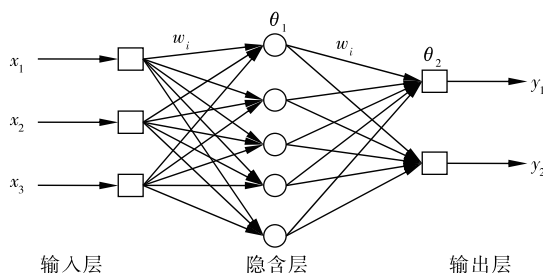


图 1 BP 神经网络结构图

Figure 1 BP neural network structure

匀地分布在实际值的两侧,适合实时系统辨识的动态递归,对序列问题及时间问题有着很好的预测效果,综合 BP&ELMAN 神经网络两者的优点,本研究提出新的预测模型:首先通过各个环境因素作为 BP 神经网络的输入,通过训练好的 BP 网络得到生长速率和倍增时间(表征微生物生长速率的一个参数),其次,通过 BP 网络输出的结果与微生物的初始浓度作为 ELMAN 神经网络的输入,最终得到生长曲线。它能有效地避免人为计算的误差,最大精度地保障环境因素对其生长动力学的影响,其结构流程图见图 2。

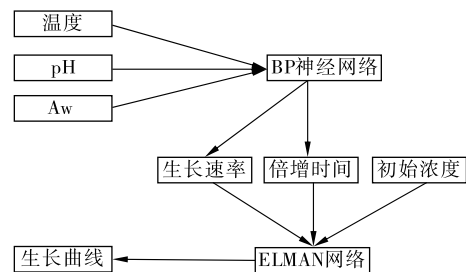


图 2 基于神经网络的微生物预测模型

Figure 2 Microbial prediction model based on neural network

2.2 样本数据的描述

本研究选取食品主要致病菌之一的李斯特菌为研究对象,已被证实肉类、蛋类、禽类、海产品、乳制品、蔬菜等都是李斯特菌的感染源^[17-18],能够检验预测模型,具有广泛的应用范围,并且本模型能够适合各种微生物的生长动力学预测,并不是单一的针对李斯特菌所提出的模型,也可以应用于沙氏门菌、大肠杆菌等^[19]。本研究微生物生长的数据来源于 Combase 数据库,Combase 数据库是 2003 年由英美两国将 PMP、FM 和 Growth Predictor 进行整合而成的数据库模型,拥有 40 489 个关于微生物生长和存活的数据,并且也是世界上最大的预测微生物学信息数据库。本研究选取的李斯特菌试验数据对象环境为温度 1~40 ℃、pH 值 4.4~7.5、Aw 值 0.934~1.000,试验数据共 120 组。

2.3 应用与分析

2.3.1 基于 BP 神经网络对生长速度拟合 通过随机选择 100 组试验数据集对 BP 网络进行训练,每次仿真随机抽取测试组数据 20 组,重复进行 50 次仿真以确保模型的稳定性。通过训练好的网络进行验证,将模型预测结果与实际数据进行对比,得测试数据与实际值的线性回归图见图 3。由图 3 可知,其生长速率和倍增时间相关系数分别达 0.998 6 和 0.998 3,具有良好的拟合效果。

2.3.2 基于 ELMAN 神经网络对生长浓度的预测 将 BP 网络拟合的生长速度与初始浓度和倍增时间作为 ELMAN 神经网络的输入,先通过 100 组实测数据对 ELMAN 神经网络进行模型训练,然后通过 20 组测试组数据对网络进行仿真测试,最后得到与时间相关的微生物一级生长曲线模型。使用李斯特菌在温度 20 ℃,pH 7,Aw 0.997 条件下的数据,对本研究预测模型与经典 Baranyi 模型进行预测,结果见图 4(a),与之对应的残差图见图 5(a);图 4(b)是李斯特菌在

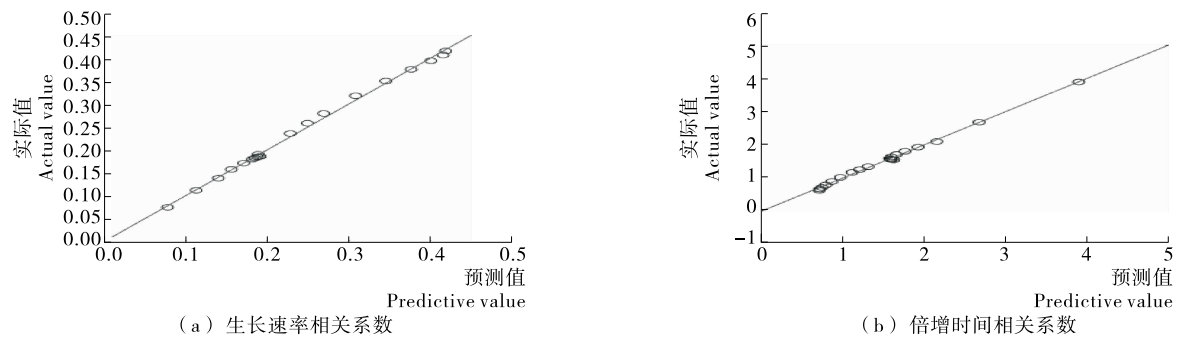


图 3 生长速率和倍增时间的预测值与实际值的线性回归

Figure 3 The linear regression of Growth rate and multiplication time of the predicted value and the actual value

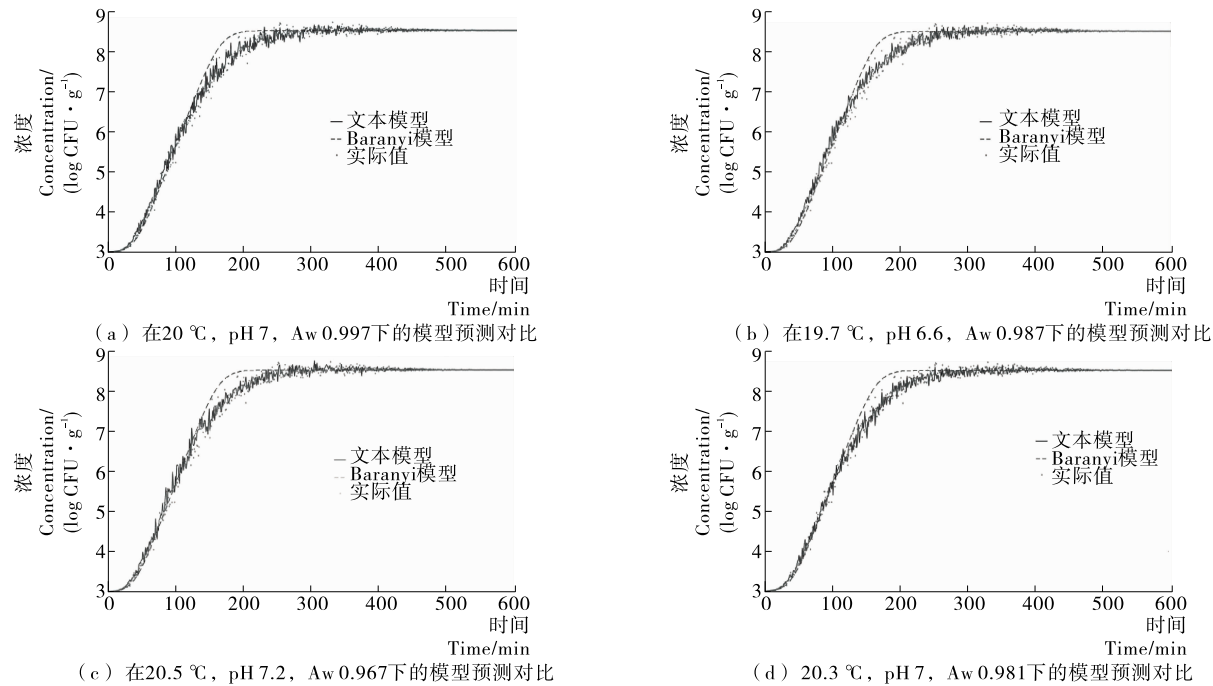


图 4 本研究预测模型与 Baranyi 模型对比结果

Figure 4 Shows the comparison between the model and the Baranyi model

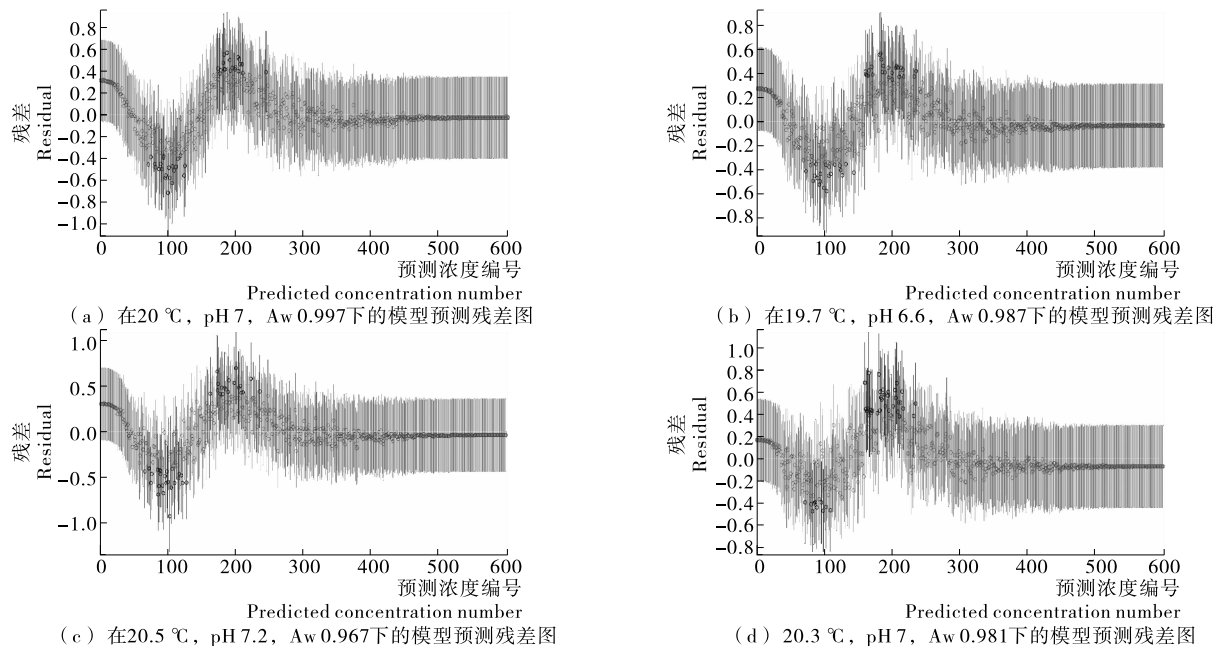


图 5 残差图

Figure 5 Residual plot

温度 19.7 °C, pH 6.6, Aw 0.987 条件下预测对比结果, 与之对应的残差图见图 5(b); 图 4(c) 是李斯特菌在温度 20.5 °C, pH 7.2, Aw 0.967 条件下预测对比结果, 与之对应的残差图见图 5(c); 图 4(d) 是李斯特菌在温度 20.3 °C, pH 7, Aw 0.981 条件下预测对比结果, 与之对应的残差图见图 5(d)。通过图 4 和图 5 可知, 本模型预测结果更符合实际情况, 误差相对于 Baranyi 模型要小, 在生长期到稳定期的过渡阶段, 预测的准确度尤其明显。

2.3.3 预测结果讨论 BP 网络训练过程中没有过拟合的情况发生, 网络输出集合的线性回归相关系数接近 0.99, 说明网络架构已达到预期期望。50 次重复试验的预测输出结果显示, 生长速率和倍增时间实测数据与预测数据的线性回归相关系数处于 [0.932 1, 0.998 4] 和 [0.962 0, 0.998 3] 之间, 得到良好拟合效果。从 ELMAN 网络的预测结果可以看出, 本研究模型对微生物生长的各个时期有很好的预测效果, 并且从其残差分析的结果可知, 异常点约占总体的 5%, 在可接受范围内。

3 结论

本研究选取李斯特菌为研究实例, 利用其试验环境的温度、pH 值和 Aw 值建立 BP 神经网络二级生长模型, 所得模型对微生物生长速度和倍增时间预测相关系数分别为 [0.932 1, 0.998 4] 和 [0.962 0, 0.998 3]; 再将所得到的生长速度和倍增时间结合初始浓度, 建立 ELMAN 神经网络, 从而得到与时间相关的微生物生长一级模型。通过与其他模型数据对比, 本模型数据更偏向于实际环境下的预测结果, 经残差分析结果可知, 异常点约占总体的 5%, 试验结果显示, 该模型可以对微生物生长的各个时期进行有效预测, 并解决经验型模型参数化过多, 以及没有生物意义的问题。由模型对比知, 本模型在生长期到稳定期的预测有着更高的准确性。此外本模型能够预测微生物在更多的环境条件下的生长和灭活, 由于不限制影响微生物生长因子的个数可大大提高本模型的通用性, 可使得微生物预测模型能有较好的应用空间, 可以帮助研究人员对微生物生长的动态进行分析, 以及在复杂环境下对微生物生长失活进行预测。

参考文献

[1] PEREZ-RODRIGUEZ F, VALERO A. Predictive microbiology in foods[M]. New York: Springer-Verlag, 2012: 1-10.
[2] WHITING R C, BUCHANAN R L. Predictive food microbiology[J]. Trends in Food Science and Technology, 1994, 4(1): 6-11.
[3] FUJIKAWA H. Application of the new logistic model to microbial growth prediction in food[J]. Biocontrol Science, 2011, 16(2): 47-54.
[4] BARANYI J. Comparison of stochastic and deterministic concepts of bacterial lag[J]. Journal of Theoretical Biology, 1998, 192(3): 403-408.
[5] BARANYI J. Stochastic modelling of bacterial lag phase[J]. International Journal of Food Microbiology, 2002, 73(2/3):

203-206.
[6] MARE Le, ELFWING A, BARANYI A, et al. Modelling the variability of lag time and the first generation times of single cells of *E. coli*[J]. International Journal of Food Microbiology, 2005, 100(1): 13-19.
[7] HUANG Li-han. Optimization of a new mathematical model for bacterial growth[J]. Food Control, 2013, 32(1): 283-288.
[8] BALSAC E, ALONSOLONSO A A, BANAGA J R. An iterative identification procedure for dynamic modeling of biochemical networks[J]. BioMed Central, 2010, 4(1): 33-46.
[9] FILIPL, BORIS H, MORITZ D. Robust multilobjective optimal control of uncertain (bio)chemical processes[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66(20): 4 670-4 682.
[10] GARCIA-GIMENO R M, HERVAS-MARTINEZ C, SILONIZ M, et al. Improving artificial neural networks with a pruning methodology and genetic algorithms for their application in microbial growth prediction in food[J]. Food Microbiol, 2002, 72(1/2): 19-30.
[11] XIAO Hai-tao, LI Bai-lin, OU Jie. Predicting the bacterial growth in MAP chilled beef by artificial neural networks[J]. Journal of Pure & Applied Microbiology, 2013, 7: 123-129.
[12] KODOGIANNIS V S, PACHIDIS T, KONTOGIANNI E. An intelligent based decision support system for the detection of meat spoilage[J]. Engineering Applications of Artificial Intelligence, 2014, 34(3): 23-36.
[13] BASHEER I, HAJMEER M. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application[J]. Journal of Microbiological Methods, 2000, 43(1): 3-31.
[14] 王学武, 谭得健. 神经网络的应用与发展趋势[J]. 计算机工程与应用, 2003, 39(3): 98-100.
[15] LIU Hui, TIAN Hong-qi, LIANG Xi-feng. Wind speed forecasting approach using secondary decomposition algorithm and Elman neural networks[J]. Appl. Energy, 2015, 157: 183-194.
[16] PALAEIOS A P, MARIN J M, QUINTO E J, et al. Bayesian modeling of bacterial growth for multiple populations[J]. The Annals of Application Statistics, 2014, 8(3): 1 516-1 537.
[17] OHKOCHI M, KOSEKI S, KUNOU M, et al. Growth modeling of *Listeria monocytogenes* in pasteurized liquid egg[J]. J Food Prot, 2013, 76(9): 1 549-1 556.
[18] MEJLHOLM O, GUNVIG A, BORGGAARD C, et al. Predicting growth rates and growth boundary of *Listeria monocytogenes*-an international validation study with focus on processed and ready-to-eat meat and seafood[J]. International Journal of Food Microbiology, 2010, 141(3): 137-150.
[19] ZHOU Kang, ZHONG Kai-cheng, LONG Chao, et al. Development and validation of a predictive model for the growth of *salmonella enterica* in chicken meat[J]. Journal of Food Safety, 2014, 34(4): 326-332.