

SENSOR VIRTUAL NEURAL PARA MONITORAMENTO DA FERMENTAÇÃO DE HIDROMEL

Renan Morassato da Rocha e Silva (Unifesp) E-mail: e.morassato@unifesp.br
Beatriz da Silva Gomes da Costa (Unifesp) E-mail: beatrizsgcosta@gmail.com
Tiago Dias Martins (Unifesp) E-mail: tdmartins@unifesp.br
Matheus Boeira Braga (Unifesp) E-mail: braga.matheus@unifesp.br
Milena da Silva Moura (Unifesp) E-mail: misilmo@gmail.com
Rafael Ramos de Andrade (Unifesp) E-mail: r.andrade@unifesp.br

Resumo: O hidromel é uma bebida alcoólica fermentada à base de água, mel e leveduras, normalmente linhagens de *Saccharomyces cerevisiae*. A bebida possui uma importância histórica e cultural muito grande e, apesar disto, a sua produção ainda ocorre de forma empírica e artesanal, podendo resultar em diversos problemas durante o processo fermentativo. Pensando nisso, desenvolveu-se um sensor virtual neural capaz de prever, durante a fermentação, a concentração de células (X) e de substrato (S) a partir de variáveis mais simples e rápidas de serem medidas, sendo: pH, °Brix e densidade óptica. A partir de dados experimentais de uma fermentação realizada a 25 °C e 31° Brix, foram implementadas duas estratégias para se obter o sensor. Na estratégia I, as variáveis X e S foram previstas isoladamente por duas RNAs e, na estratégia II, uma única RNA foi responsável pela predição simultânea das duas variáveis. A melhor rede foi obtida a partir da estratégia II, sendo definida pela estrutura com 3 neurônios na camada de entrada, 12 na intermediária e 2 na de saída, treinada com o algoritmo de otimização Levenberg-Marquardt e com função de ativação tangente hiperbólica na camada intermediária e linear na de saída. O coeficiente de correlação de Pearson foi igual a 1 e o erro médio percentual absoluto foi de $5,46 \times 10^{-4}$ % e $8,24 \times 10^{-4}$ % para X e S, respectivamente. O sensor poderá ser utilizado para monitoramento e otimização da produção da bebida, para obter alto rendimento e produtividade.

Palavras-chave: fermentação alcoólica, bebida, simulação, inteligência artificial

NEURAL VIRTUAL SENSOR FOR MONITORING MEAD FERMENTATION

Abstract: Mead is a fermented alcoholic beverage based on water, honey, and yeast, normally strains of *Saccharomyces cerevisiae*. This beverage has a great historical and cultural importance, and despite this, its production still occurs in an empirical and artisanal way, which can result in several problems during the fermentation process. Bearing this in mind, it was developed a virtual neural sensor capable of predicting, during fermentation, the concentration of cells (X) and substrate (S) from simpler and faster-to-measure variables, namely: pH, °Brix and optical density. Based on experimental data from a mead fermentation carried out at 25 °C and 31° Brix, two strategies were implemented to obtain the sensor. In strategy I, the X and S variables were individually predicted by two ANNs, and in strategy II, a single ANN was responsible for the simultaneous prediction of the two variables. The best ANN was obtained from strategy II, containing 3 neurons in the input layer, 12 in the hidden layer and 2 in the output layer, trained with the Levenberg-Marquardt optimization algorithm and with activation function hyperbolic tangent in the hidden layer and linear in the output layer. For this ANN, Pearson's correlation coefficient (ρ) was equal to 1 and the mean absolute percentage error was $5,46 \times 10^{-4}$ % e $8,24 \times 10^{-4}$ % for X and S, respectively. The sensor can be used to monitor and optimize mead production, to obtain high yield and productivity.

Keywords: alcoholic fermentation, beverage, simulation, artificial intelligence

1. Introdução

A fermentação alcoólica é um dos processos bioquímicos mais antigos estudados pelo homem (KTE'PI, 2011) e é por meio dela que se dá a produção do hidromel. É uma

bebida produzida a partir da fermentação alcoólica de uma mistura de mel e água. O teor alcoólico da bebida varia entre 8 e 18% (v/v) e, na sua produção, geralmente são utilizadas leveduras da espécie *Saccharomyces cerevisiae* (GOMES, 2010). Nos dias atuais, a bebida é bastante consumida em algumas regiões da Europa (BATISTA, 2017; MATTIETTO *et al.*, 2006).

Embora seja considerada uma das primeiras bebidas consumidas pelo homem, a sua produção continua a ser quase que completamente artesanal, culminando frequentemente em problemas durante o processo fermentativo (SOUZA, 2019; PEREIRA, 2008). Alguns problemas são: não controle do pH e da temperatura, a falta de alguns nutrientes essenciais e de substrato, ou inibição por este durante a fermentação, e a inibição por etanol. A dificuldade em monitorar estes fatores e mantê-los em condições ótimas pode acarretar em um longo tempo de fermentação, taxa de crescimento microbiano e de produção de etanol reduzidas e, conseqüentemente, uma redução na produtividade (GOMES, 2010).

Diante do exposto, a concentração de células (X) e de substrato (S) são variáveis importantes de serem monitoradas. Além de permitir um maior entendimento do processo fermentativo, o conhecimento destas variáveis pode permitir o controle de alguns parâmetros que afetam a qualidade do produto final e também auxiliar na tomada de decisão. Como as técnicas de medição destas duas variáveis demandam tempo, as Redes Neurais Artificiais (RNAs) podem ser uma boa alternativa para obter uma medida indireta dos seus valores a partir de outras que são consideravelmente mais simples de serem determinadas.

Uma RNA consiste em uma complexa rede formada por camadas de neurônios interligados entre si. Cada neurônio artificial está interligado por numerosas conexões. Normalmente, essas conexões estão associadas aos pesos, os quais são utilizados para ponderar a entrada recebida por cada neurônio da rede e para armazenar o conhecimento representado no modelo. Um neurônio artificial funciona similarmente ao biológico, aprendendo com as informações de entrada, visando gerar uma saída que seja o mais próximo possível da realidade (BRAGA *et al.*, 2000).

As RNAs têm sido bastante utilizadas para resolver diversos problemas de Engenharia Química, dentre os quais: cinética de adsorção (PAULETTO *et al.*, 2020), termodinâmica (FARZANEH-GORD *et al.*, 2020, MELO *et al.* 2020; OTTAIANO *et al.*, 2021), e fermentação alcoólica (AL BANNOUD *et al.*, 2021).

Ainda existe muito espaço para pesquisas relacionadas à produção de hidromel, sobretudo no que diz respeito à otimização e monitoramento do processo fermentativo com ferramentas baseadas em Inteligência Artificial. Diante disso, a aplicação específica de sensores virtuais neurais e de RNAs na fermentação de hidromel é pouco estudada e não foram encontrados trabalhos sobre este tema na literatura.

Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo a obtenção um sensor virtual, baseado em RNAs, que fosse capaz de inferir, durante a fermentação para produção de hidromel, a concentração de células (X) e de açúcares redutores (S) (que são variáveis consideravelmente mais difíceis de serem determinadas com rapidez) a partir de valores de pH, °Brix e densidade óptica (D.O.), variáveis cuja medição é mais simples e demanda menos tempo (RADKE, 2002; SANTOS *et al.*, 2018). Avaliou-se também os melhores algoritmos de treinamento e funções de ativação para predição das saídas da rede, contribuindo para a elaboração de trabalhos futuros relacionados à produção da bebida.

2. Métodos

2.1. Obtenção dos Dados Experimentais

O meio de cultivo utilizado foi composto por mel, obtido de produtores rurais do município de São Miguel Arcanjo – SP, diluído com água mineral até obter 30 °Brix. Após, foi adicionado 0,5 % de extrato de levedura e 1 % de peptona. O meio de cultivo foi pasteurizado a 65 °C por 30 minutos e transferido assepticamente para um fermentador esterilizado em autoclave por 20 minutos. Previamente à inoculação, a hidratação do inóculo foi realizada adicionando-se 1,08 g de *Saccharomyces cerevisiae* comercial Premier Blanc, da Marca Fermentis em 15 mL de água destilada, seguido de sua manutenção em estufa a 30 °C por 30 minutos. A fermentação foi conduzida em um fermentador Labfors 5 (Infors HT, Suíça), em temperatura fixa de 25 °C. A agitação foi realizada por duas turbinas de pás planas, a 200 rpm (FERRAZ, 2015), e o volume de meio foi de 3,6 L. O tempo total do experimento foi de 13 dias.

A concentração de células foi determinada por gravimetria após a centrifugação das amostras a 4000 rpm por 15 minutos, em uma centrífuga modelo 5702 R (Eppendorf), seguido da lavagem do precipitado por duas vezes e secagem em estufa a 70 °C até obter uma leitura de massa constante (ANDRADE *et al.*, 2013). No sobrenadante foi determinada a concentração de açúcares redutores (soma de glicose e frutose), utilizando o método do 3,5 dinitrossalicílico (DNS) (MILLER, 1959).

O pH da fermentação foi medido em tempo real, utilizando-se um sensor autoclavável (Mettler Toledo). A absorbância (D.O.) das amostras brutas, após diluição de 1:15, foi determinada em comprimento de onda de 600 nm, em um espectrofotômetro modelo Genesys 10S (Thermo Scientific). O °Brix do sobrenadante foi medido utilizando um refratômetro digital modelo HI96801 (Hanna).

2.2. Obtenção e Simulação das RNAs

A metodologia utilizada para a obtenção das RNAs envolveu: (1) tratamento dos dados experimentais; (2) seleção adequada das variáveis entrada-saída para o monitoramento do processo; (3) definição dos parâmetros para verificar a eficiência da rede; (4) definição das configurações para as RNAs, nas quais foram escolhidas a quantidade de camadas intermediárias, o número de neurônios em cada camada, o algoritmo de otimização e as funções de transferência; (5) realização das etapas de obtenção da RNA (treinamento, validação e teste); (6) simulação da rede e análise dos resultados obtidos.

Para a modelagem, foram utilizados os dados experimentais da fermentação. Como a quantidade de dados disponíveis não era suficiente para se treinar uma RNA, foi realizado um ajuste de equações suaves com o auxílio do *software* TableCurve 2D v.5.01 para gerar mais dados. Essa estratégia é comumente realizada em trabalhos que envolvem a obtenção de RNAs (BECKER *et al.*, 2002; SILVA e FILETI, 2016), e foi utilizada com sucesso em outros trabalhos do grupo Choji *et al.* (2021) e Irizawa *et al.* (2021). Com esse procedimento, foram obtidos 200 pontos experimentais em intervalo de tempo constante, o que possibilitou melhorar o treinamento da rede. O espaçamento dos dados gerados foi de aproximadamente 94 minutos.

Foram implementadas duas estratégias distintas para a obtenção das RNAs. Na estratégia I, foram obtidas duas RNAs, sendo que cada rede foi responsável por prever isoladamente uma das variáveis, X ou S. A estratégia II, por sua vez, consistiu na obtenção de uma única RNA que fosse capaz de prever as duas variáveis, X e S. Para todos os casos, utilizou-se como entradas: pH, °Brix e D.O da amostra bruta após

diluição de 1:15.

A escolha das variáveis de entrada foi feita com base nos seguintes aspectos: o pH é uma variável relevante de ser monitorada, visto que o pH tem influência sobre o metabolismo; a D.O. foi escolhida por possibilitar a verificação e acompanhamento do crescimento microbiano; a concentração de sólidos totais (°Brix) também foi utilizada, uma vez que esta variável se relaciona com a concentração de substrato. Além disso, outro fator importante que foi considerado na seleção dessas variáveis é que elas são mais simples de serem medidas.

Na Figura 1, encontra-se a representação de uma RNA com duas camadas intermediárias para a estratégia II, gerando X e S simultaneamente.

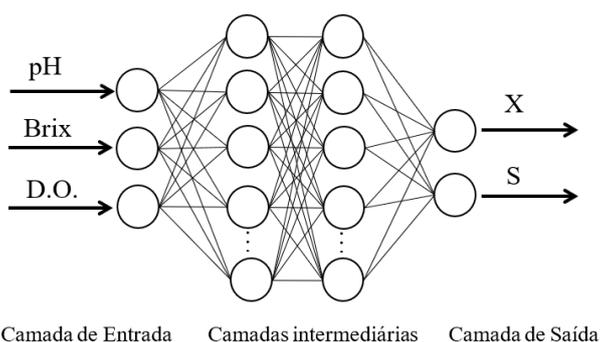


Figura 1 – Estrutura de uma RNA para a estratégia II.

Entende-se por obtenção da rede a realização das etapas de treinamento, validação e teste. A partir dos 200 dados gerados, utilizou-se 150 para a realização destas três etapas e as 50 observações restantes para a simulação da rede. Dos 150 pontos disponíveis, escolheu-se utilizar 70% para treinamento, 15% para validação e 15% para o teste. É importante ressaltar que a divisão dos dados para o treinamento, validação e teste foi feita aleatoriamente pelo Matlab®.

As etapas de obtenção e simulação foram realizadas no *software* Mathworks Matlab® R2016a. Foram treinadas RNAs com uma e duas camadas intermediárias, alterando-se o número de neurônios em cada uma delas. Os algoritmos de otimização testados foram: Resilient-Backpropagation (RP), Levenberg-Marquardt (LM) e Levenberg-Marquardt com Regularização Bayesiana (BR). Variou-se também a função de transferência das camadas intermediárias entre sigmoideal (logsig), tangente hiperbólica (tansig) e linear (purelin). Para as camadas de saída, por outro lado, testou-se somente as funções de ativação tansig e purelin. Na Tabela 1, encontra-se um resumo das configurações testadas. Todas as combinações possíveis foram testadas.

Tabela 1 – Resumo das configurações testadas.

Camadas interm.	Algoritmos de otimização	Funções de ativação (interm.)	Funções de ativação (saída)	Neurônios (camada 1)	Neurônios (camada 2)
1	RP LM BR	logsig tansig purelin	tansig purelin	1-25	-
2		logsig tansig purelin	tansig purelin	1-10	1-6

Para a estratégia II, decidiu-se testar uma quantidade de neurônios diferente da apresentada na Tabela 1. Nesse caso, para redes com duas camadas intermediárias, a quantidade de neurônios variou de 1 a 15 na primeira camada e de 1 a 8 na segunda.

Como observado na Tabela 1, foi testado um número menor de neurônios na segunda camada. Isso foi feito, pois a ideia era que as RNAs com duas camadas intermediárias não tivessem uma quantidade muito maior de parâmetros do que as redes com uma única camada, pois poderia aumentar significativamente o esforço computacional e o tempo de resposta.

Para verificar a eficiência da rede, foram utilizados três parâmetros: a função objetivo (F_{obj}), o erro médio percentual absoluto (MAPE) e o coeficiente de correlação de Pearson (ρ). Ao final de cada uma das quatro etapas (treinamento, validação, teste e simulação), os valores desses parâmetros foram armazenados.

A F_{obj} escolhida foi a média da diferença quadrática entre o valor calculado pela rede e o experimental (MSE), sendo calculado de acordo com a Equação (1).

$$F_{obj} = MSE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (h_{j,exp} - h_{j,rede})^2 \quad (1)$$

Nesta equação, n é o número de pontos experimentais, $h_{j,rede}$ é o valor calculado pela RNA e $h_{j,exp}$ é o valor real.

É importante observar que quanto mais próxima de zero é a F_{obj} , menor é a diferença entre os dados experimentais e os valores calculados pela RNA e, portanto, *a priori*, mais precisa é a rede.

O MAPE foi calculado utilizando-se a Equação (2).

$$MAPE = 100 \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{|h_{j,exp} - h_{j,rede}|}{h_{j,exp}} \quad (2)$$

A simulação das RNAs foi realizada com os 50 pontos remanescentes. Essa etapa é útil para avaliar qual é, de fato, o melhor modelo para o processo em questão e para evitar um problema de sobreajuste (*overfitting*). Nesta etapa, foram fornecidos novos dados como variáveis de entrada para verificar a capacidade de generalização da rede e, conseqüentemente, determinar qual foi realmente o modelo que melhor descreveu o processo de fermentação para a produção de hidromel.

Com os dados obtidos do *software* Mathworks Matlab® R2016a, a escolha da melhor RNA foi feita pela análise dos valores do MAPE e do ρ da etapa de simulação. Em geral, buscou-se pela estrutura que apresentou o menor valor para o MAPE e maior valor de ρ . Na decisão final, também foi considerado o número de parâmetros da RNA.

3. Resultados

3.1. Dados Experimentais

Na Tabela 2, encontram-se os dados experimentais das variáveis que foram utilizadas na obtenção e simulação das RNAs. Pode-se observar que o teor de açúcar obtido após 6-7 dias de fermentação foi em torno de 30 g/L, sendo obtido um hidromel caracterizado como suave (MAPA, 2012), o que resultou em uma conversão de 90,23 % do substrato inicial. Vale a pena observar que o tempo de fermentação neste trabalho foi próximo de 11 dias, considerado por Pereira *et al.*, (2017) como curto, devido ao uso de uma condição otimizada de fermentação.

Tabela 2 – Dados experimentais da fermentação de hidromel.

Tempo de fermentação		pH	°Brix	D.O.	X (g/L)	S (g/L)
(horas)	(dias)					
0	0,000	4,78	31,0	0,1007	0,30	315,000
23	0,958	3,98	28,7	0,4263	2,88	250,633
52	2,167	3,98	20,2	0,5890	5,13	116,100
74	3,083	4,11	16,2	0,5453	5,83	60,063
116	4,833	4,11	14,4	0,6390	5,57	31,792
139	5,792	4,28	13,9	0,6877	5,11	27,248
170	7,083	4,3	13,7	0,5923	5,06	29,267
243	10,125	4,31	14,1	0,5753	4,83	29,772
312	13,000	4,31	14,3	0,5743	4,80	30,782

3.2. Obtenção do Modelo Neural

Para cada uma das estratégias, foram testadas as configurações com uma e duas camadas intermediárias, variando os algoritmos de otimização, a quantidade de neurônios em cada camada e as funções de ativação. Cada configuração rede foi treinada 10 vezes, totalizando 118.800 treinamentos. Foram obtidas 11.880 RNAs com diferentes configurações.

3.2.1. Estratégia I - Predição da Concentração de Células

A Tabela 3 apresenta as dez melhores estruturas para esta estratégia. Nela, encontram-se os valores de F_{obj} das etapas de treinamento, validação e teste, bem como o MAPE e o ρ da etapa de simulação. As RNAs apresentadas estão listadas em ordem crescente de MAPE.

Em uma primeira análise, pode-se notar a predominância de RNAs com duas camadas intermediárias entre os dez melhores resultados. Como observado por meio da primeira coluna da Tabela 3, apenas duas redes com uma camada intermediária apresentaram desempenho similar ou superior às demais. Nesse sentido, pode-se concluir que a estrutura com duas camadas intermediárias é a mais recomendada para a rede que prediz isoladamente a concentração de células. Outro aspecto importante é que a estrutura 3-10-5-1 (com 3 neurônios na camada de entrada, 10 na primeira camada oculta, 5 na segunda camada oculta e 1 na saída) apareceu duas vezes seguidas na lista dos melhores resultados, indicando que esta é a estrutura com maior capacidade de generalização para a estratégia I (a).

No que diz respeito ao algoritmo de otimização, já era esperado que o LM e o BR apresentassem melhores resultados, uma vez que o primeiro possibilita uma convergência mais veloz em relação ao *back-propagation* e o segundo, por sua vez, reduz a probabilidade da ocorrência de sobreajuste. Em ordem decrescente de desempenho, os melhores algoritmos foram: LM, BR e RP. Como observado pela segunda coluna da Tabela 3, todas as dez RNAs foram treinadas com o algoritmo LM, indicando ser este o método que garantiu a predição da concentração de células (X) da forma mais fidedigna possível.

Além disso, é possível verificar que combinação de funções de ativação tansig-tansig-purelin foi a que apresentou melhor desempenho para esta estratégia, já que ela aparece repetidas vezes entre o conjunto de RNAs listadas. Por outro lado, é importante salientar que a RNA com melhor desempenho possui a combinação logsig-logsig-purelin (em

negrito).

Tabela 3 – Desempenho das melhores RNAs para a estratégia I (a).

Estrutura	Algoritmo de Otimização	Funções de Ativação*	F_{obj} Treinamento	F_{obj} Validação	F_{obj} Teste	MAPE Simulação (%)	ρ Simulação
3-10-5-1	trainlm	logsig-logsig-purelin	1,62E-07	3,22E-11	6,32E-11	1,40E-04	1,00
3-10-5-1	trainlm	logsig-tansig-purelin	4,48E-08	1,16E-07	1,35E-10	2,15E-04	1,00
3-8-6-1	trainlm	tansig-tansig-purelin	2,40E-09	1,16E-08	2,15E-09	2,73E-04	1,00
3-8-4-1	trainlm	tansig-tansig-purelin	3,65E-10	3,01E-09	5,76E-10	3,49E-04	1,00
3-10-6-1	trainlm	tansig-tansig-purelin	5,78E-09	8,82E-10	6,56E-09	3,54E-04	1,00
3-6-5-1	trainlm	tansig-tansig-purelin	1,04E-08	7,60E-10	5,07E-09	3,56E-04	1,00
3-5-6-1	trainlm	tansig-tansig-purelin	6,61E-09	1,80E-08	7,04E-10	4,18E-04	1,00
3-18-1	trainlm	tansig-purelin	6,48E-04	2,24E-10	1,42E-04	4,36E-04	1,00
3-6-6-1	trainlm	tansig-tansig-purelin	4,00E-09	4,16E-10	1,03E-08	4,61E-04	1,00
3-21-1	trainlm	tansig-purelin	4,78E-05	7,71E-07	5,27E-10	5,05E-04	1,00

*sequência de funções de ativação usadas em cada camada da RNA.

Como observado na penúltima coluna da Tabela 3, todas as dez melhores RNAs apresentaram valores de erro médio percentual absoluto (MAPE) bastante baixos e relativamente similares. Em relação ao ρ , os valores só variaram após a nona casa decimal para todas as RNAs listadas, sendo um indício de que todas as dez RNAs foram capazes de predizer a concentração de células com boa precisão.

Após a análise desses dois parâmetros da etapa de simulação, concluiu-se que a estrutura que melhor descreveu os dados experimentais para X foi a estrutura 3-10-5-1 – trainlm – logsig-logsig-purelin. Como os valores de ρ são praticamente iguais, esta RNA foi escolhida por apresentar o menor valor de erro em comparação com as demais redes testadas.

3.2.2. Estratégia I - Predição da Concentração de Substrato

Os dez melhores resultados para a estratégia I (b) estão expostos na Tabela 4, classificados em ordem crescente de MAPE. Pela análise da Tabela 4, verifica-se que também há uma maior predominância de RNAs com duas camadas intermediárias. É possível observar que dentre as dez estruturas listadas, seis delas possuem duas camadas intermediárias. Esse resultado mostra que para se obter uma alta precisão necessita de uma RNA maior. O melhor algoritmo de otimização para a predição da concentração de substrato (S) também foi o LM. A combinação das funções de ativação logsig-logsig-purelin foi a que mais apareceu entre os resultados, indicando ser esta a que garantiu melhor desempenho para esta estratégia. Por fim, como observado pelos valores de MAPE e ρ , todas as RNAs da lista apresentaram desempenho satisfatório.

Tabela 4 – Desempenho das melhores RNAs para a estratégia I (b).

Estrutura	Algoritmo de Otimização	Funções de Ativação	F_{obj} Treinamento	F_{obj} Validação	F_{obj} Teste	MAPE Simulação (%)	ρ Simulação
3-24-1	trainlm	tansig-purelin	2,43E-08	1,83E-08	1,73E-08	3,66E-04	1,00
3-10-6-1	trainlm	tansig-logsig-purelin	6,43E-04	2,74E-08	9,65E-07	5,16E-04	1,00
3-4-6-1	trainlm	logsig-logsig-purelin	5,82E-08	2,26E-07	2,10E-07	5,33E-04	1,00
3-10-5-1	trainlm	logsig-logsig-purelin	5,35E-02	1,42E-07	5,52E-08	6,70E-04	1,00
3-8-5-1	trainlm	tansig-tansig-purelin	3,44E-06	4,81E-08	1,94E-07	6,99E-04	1,00
3-24-1	trainlm	logsig-purelin	9,95E-07	8,31E-08	7,58E-08	7,94E-04	1,00
3-25-1	trainlm	tansig-purelin	3,50E-01	4,45E-04	1,19E-07	7,95E-04	1,00
3-21-1	trainlm	tansig-purelin	6,84E+00	9,86E-08	1,15E-07	8,16E-04	1,00
3-5-4-1	trainlm	logsig-logsig-purelin	9,64E-08	5,42E-08	5,26E-07	8,29E-04	1,00
3-6-4-1	trainbr	tansig-tansig-purelin	2,00E-07	1,58E-07	6,13E-08	8,31E-04	1,00

A RNA definida por 3-24-1-trainlm-tansig-purelin foi a que melhor descreveu os dados experimentais para a concentração de substrato. Como os valores de ρ são praticamente iguais, esta rede também foi escolhida por apresentar o menor valor de MAPE.

Vale ressaltar que a rede 3-10-5-1-trainlm-logsig-logsig-purelin apareceu nos melhores resultados das duas estratégias, indicando que esta configuração poderia ser utilizada em ambos os casos, se desejado, com pouca perda de precisão.

Diante do exposto, concluiu-se que a estratégia I apresentou resultados promissores. A concentração de células (X) e de substrato (S) foram preditas com alta precisão por meio de duas RNAs.

3.3. Estratégia II

A segunda estratégia teve como objetivo a obtenção de uma única RNA que fosse capaz de prever de forma simultânea as duas variáveis: X e S. A Tabela 5 contém os dez melhores resultados para a estratégia II, bem como a F_{obj} das etapas de treinamento, validação e teste. A Tabela 6 apresenta os respectivos valores de MAPE e ρ , bem como o número de parâmetros de cada estrutura (NP). As RNAs apresentadas na Tabela 5 e Tabela 6 foram listadas em ordem crescente do somatório do MAPE das variáveis X e S (Σ MAPE).

Tabela 5 – Funções objetivo da estratégia II.

ID	Estrutura	Algoritmo de Otimização	Funções de Ativação	Fobj Treino	Fobj Valid.	Fobj Teste
1	3-10-10-2	trainlm	tansig-tansig-purelin	9,72E-04	8,74E-09	8,70E-09
2	3-12-2	trainlm	tansig-purelin	9,29E-08	3,89E-08	2,35E-06
3	3-25-2	trainlm	tansig-purelin	7,09E-08	1,26E-01	9,10E-08
4	3-15-10-2	trainlm	tansig-logsig-purelin	7,28E-08	1,34E-08	2,75E-08
5	3-8-6-2	trainbr	tansig-tansig-purelin	7,87E-08	2,16E-08	2,23E-06
6	3-18-2	trainlm	tansig-purelin	6,44E-08	7,82E-08	1,96E-07
7	3-15-4-2	trainbr	tansig-logsig-purelin	9,10E-08	2,41E-08	3,98E-07
8	3-15-8-2	trainlm	tansig-tansig-purelin	3,10E-08	2,59E-07	2,66E-08
9	3-13-2	trainlm	tansig-purelin	3,22E-08	4,20E-08	3,54E-07
10	3-10-10-2	trainlm	tansig-logsig-purelin	1,35E-04	1,39E-08	4,03E-08

Com base na segunda coluna da Tabela 5, nota-se que a configuração mais predominante foi a com duas camadas ocultas. Apenas quatro RNAs na lista dos melhores resultados possuem uma única camada intermediária. Contudo, é importante observar que o número de camadas intermediárias não foi determinante para a obtenção de resultados satisfatórios, uma vez que a lista de melhores resultados está bem distribuída entre as duas estruturas.

Como esperado, o algoritmo de otimização que garantiu melhor desempenho na predição simultânea de X e S também foi o LM. Apesar disso, é interessante notar que duas RNAs treinadas com o método BR também apresentaram resultados muito promissores. Outro aspecto significativo é que a combinação de funções de ativação mais predominante foi a tansig-purelin. Sendo assim, esta combinação pode ser considerada a que garantiu melhor desempenho para a estratégia II. Isso mostra o quão importante é a realização de testes com diversas combinações dentre as possibilidades de configuração da RNA.

Com exceção das três últimas RNAs, que obtiveram valores de MAPE um pouco maiores para X, todas as redes apresentaram valores de erro muito parecidos, na ordem de 1.10^{-4} %. Com base no somatório dos erros (Σ MAPE), percebe-se que todas as

RNAs geraram resultados satisfatórios e relativamente semelhantes.

Tabela 6 – Resultados obtidos das melhores RNAs para a estratégia II.

ID	MAPE	ρ	MAPE	ρ	Σ MAPE	NP
	Simul. X (%)	Simul. X	Simul. S (%)	Simul. S	Simul. (%)	
1	7,08E-04	1,00	6,08E-04	1,00	1,32E-03	172
2	5,46E-04	1,00	8,24E-04	1,00	1,37E-03	74
3	6,68E-04	1,00	7,76E-04	1,00	1,44E-03	152
4	6,97E-04	1,00	7,71E-04	1,00	1,47E-03	242
5	6,74E-04	1,00	8,92E-04	1,00	1,57E-03	100
6	6,52E-04	1,00	9,74E-04	1,00	1,63E-03	110
7	7,91E-04	1,00	8,59E-04	1,00	1,65E-03	134
8	1,04E-03	1,00	6,49E-04	1,00	1,69E-03	206
9	1,01E-03	1,00	7,43E-04	1,00	1,75E-03	80
10	1,01E-03	1,00	7,61E-04	1,00	1,78E-03	172

Em uma primeira análise, a RNA 3-10-10-2–trainlm–tansig–tansig–purelin foi a que garantiu melhor predição de X e S, uma vez que ela apresentou o menor valor para Σ MAPE. Essa análise foi realizada com o intuito de se obter uma RNA que pudesse prever as variáveis de saída com erro global baixo. Porém, para a escolha final, também foi feita a análise do NP da RNA.

No geral, tanto a estratégia I como a estratégia II foram capazes de prever, com ótima precisão, as duas variáveis de saída. Em ambos os casos, os valores de MAPE da etapa simulação foram baixos e bastante similares. Além disso, os valores de ρ da simulação foram praticamente iguais a 1 para todas as RNAs, com variação apenas na nona casa decimal. Considerando-se a similaridade no desempenho das duas estratégias, chegou-se à conclusão de que o caso II foi o mais adequado, sendo mais conveniente utilizar uma única RNA para prever simultaneamente X e S.

Existe uma discussão em relação ao NP das Redes Neurais Artificiais e, em geral, busca-se obter uma rede com a menor quantidade possível de parâmetros. Em se tratando de monitoramento e controle de processos, a minimização de número de parâmetros é interessante, uma vez que garante maior desempenho computacional e diminui o tempo de resposta. Pensando nisso, foi realizada uma segunda análise, na qual esse aspecto também foi considerado.

Como as RNAs obtidas na estratégia II apresentaram desempenhos muito similares, escolheu-se aquela com a menor quantidade de parâmetros. Dessa forma, a melhor RNA para o monitoramento da fermentação de hidromel foi definida pela configuração 3-12-2 – trainlm – tansig–purelin, com 74 parâmetros. A Figura 2 apresenta os resultados obtidos na etapa de simulação dessa RNA, onde se pode verificar sua alta capacidade em prever X e S, a partir de variáveis mais simples de serem medidas (pH, °Brix e D.O.).

O erro médio percentual absoluto combinado das duas variáveis (Σ MAPE) foi de $1,37 \cdot 10^{-4}$ % e o valor de ρ foi aproximadamente igual a 1. Além disso, a RNA foi capaz de prever X e S com MAPE de $5,46 \cdot 10^{-4}$ % e $8,24 \cdot 10^{-4}$ %, respectivamente.

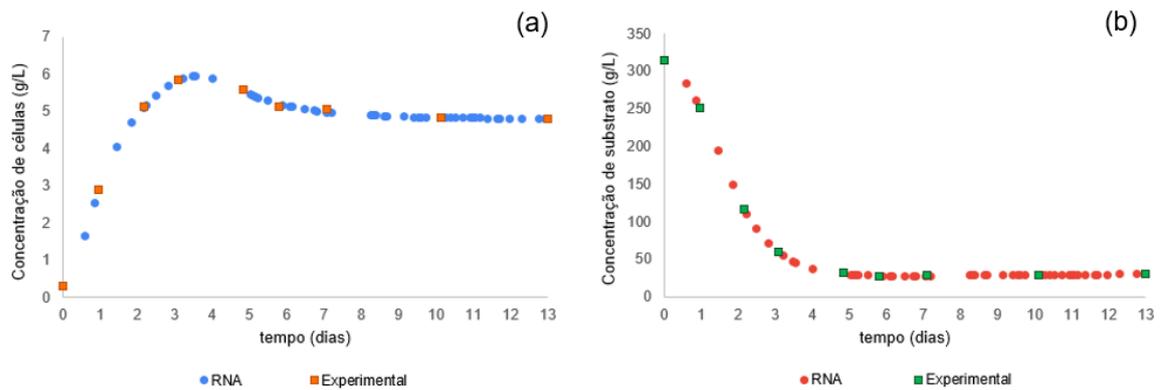


Figura 2 – Predição da concentração de células (a), e de substrato (b) em função do tempo.

Uma RNA é uma grande equação matemática não-linear e com vários parâmetros (pesos e *bias*) em cada neurônio artificial. Esses parâmetros são ajustados durante a etapa de treinamento. A equação para a variável de saída de uma RNA com apenas uma camada intermediária pode ser escrita de acordo com a Equação (3).

$$y_n = f \left(\sum_{j=1}^W w_{jk} g \left(\sum_{i=1}^Z w_{ij} x_i + b_j \right) + b_k \right)_n \quad (3)$$

Em que: n é o número de saídas, y_n é a saída da RNA, f é a função de ativação da camada de saída, W é o número de neurônios na camada intermediária, g é a função de ativação da camada intermediária, Z é o número de entradas, b_j e b_k correspondem aos *bias*, w_{ij} é o peso sináptico da camada intermediária e w_{jk} é o peso sináptico da camada de saída.

Seguindo essa equação, a melhor RNA (3-12-2-trainlm-tansig-purelin) para o monitoramento da fermentação de hidromel pode ser definida pela Equação (4).

$$y_n = \left(\sum_{j=1}^{12} w_{jk} \tanh \left(\sum_{i=1}^3 w_{ij} x_i + b_j \right) + b_k \right)_n \quad (4)$$

4. Conclusão

Neste estudo, foram implementadas duas estratégias para a obtenção de sensor virtual neural para monitoramento de X e S em uma fermentação de hidromel. As duas estratégias apresentaram resultados satisfatórios e parecidos em termos dos parâmetros de eficiência. Diante dessa similaridade no desempenho, concluiu-se que a estratégia II seria a mais adequada, sendo mais conveniente utilizar uma única RNA para prever simultaneamente as duas variáveis.

Os resultados mostraram que, para ambas as estratégias, RNAs com duas camadas são mais precisas e que o algoritmo LM é bastante indicado para esse tipo de aplicação. Os valores de MAPE foram na ordem de 1.10^{-4} % e ρ foi igual a 1 para todas as configurações.

A melhor RNA foi definida pela estratégia II, que por sua vez, gerou uma única RNA

para prever X e S. A melhor RNA foi definida pela configuração 3-12-2 – trainlm – tansig-purelin, com 74 parâmetros, com Σ MAPE igual a $1,37 \cdot 10^{-4}$ %.

Os resultados deste trabalho mostram a potencialidade da aplicação das RNAs para previsão de variáveis de processo na produção de outras bebidas fermentadas.

Referências

- BANNOUD, M.A.; SANTOS, B.F. & MARTINS, T.D.** *Controle preditivo por modelo de rede neural aplicado a processos de fermentação e destilação*. Revista de Engenharia e Tecnologia. Vol. 13, p. 168-179, 2021.
- ANDRADE, R.R.; MAUGERI FILHO, F.; MACIEL FILHO, R. & COSTA, A.C.** *Kinetics of ethanol production from sugarcane bagasse enzymatic hydrolysate concentrated with molasses under cell recycle*. Bioresource Technology, Vol. 130, p. 351-359, 2013.
- BATISTA, A.C.** *Avaliação das características tecnológicas de hidromel tipo melomel produzido com diferentes cepas de Saccharomyces cerevisiae*. 2017.
- BECKER T.; ENDERS T. & DELGADO A.** *Dynamic neural networks as a tool for the online optimization of industrial fermentation*. Bioprocess and Biosystems Engineering, Vol. 24, p. 347-354, 2002.
- BRAGA A.P.; CARVALHO A.P.L. & LUDERMIR T.B.** *Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações*. Rio de Janeiro: LTC, 2000.
- CHOJI, T.T.; OTTAIANO, G.Y.; SEOLATTO, A.A.; SILVA, E.A. & MARTINS, T. D.** *Cinética da biossorção da mistura Ni^{2+} - Cr^{3+} via redes neurais artificiais*. Revista de Engenharia e Tecnologia, Vol. 13, p. 200-210, 2021.
- FARZANEH-GORD, M.; MOHSENI-GHARYEHSABA, B.; ARABKOOHSAR, A.; AHMADI, M. H. & SHEREMET, M. A.** *Precise prediction of biogas thermodynamic properties by using ANN algorithm*. Renewable Energy. Vol. 147, p. 179-191, 2020.
- FERRAZ, F. D.O.** *Estudo dos parâmetros fermentativos, características físico-químicas e sensoriais de hidromel*. 2015.
- GOMES, T.** *Produção de hidromel: efeito das condições de fermentação*. Instituto Politécnico de Bragança, Escola Superior Agrária, 2010.
- IRIZAWA, I.A.; MARTINS, T.D. & VEGGI, P.C.** *Modelagem da cinética de extração supercrítica de artemisinina via redes neurais artificiais*. Revista de Engenharia e Tecnologia. Vol. 13, p. 112-123, 2021.
- KTE'PI, B.** *Biochemical Processes*. Green technology: An A-to-Z guide. D. Mulvaney. Thousand Oaks, CA: SAGE Publications, Inc. 2011.
- MAPA. MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E ABASTECIMENTO.** Instrução Normativa nº 34. 2012. Disponível em: < <https://www.gov.br/agricultura/pt-br/assuntos/inspecao/produtos-vegetal/legislacao-1/biblioteca-de-normas-vinhos-e-bebidas/instrucao-normativa-no-34-de-29-de-novembro-de-2012.pdf/view> > Acesso em: Julho, 2021.
- MATTIETTO, R.A.; LIMA, F.C. C.; VENTURIERI, G.C. & ARAÚJO, A.A.** *Tecnologia para obtenção artesanal de Hidromel do tipo doce*. Embrapa. Comunicado Técnico. Vol. 170, p.1-5, 2006.

MELO, E. B.; OLIVEIRA, E. T. & MARTINS, T. D. *A neural network correlation for molar density and specific heat of water: Predictions at pressures up to 100 MPa.* Fluid Phase Equilibria. Vol. 506, p. 112411, 2020.

MILLER, G.L. *Use of dinitrosalicylic acid reagent for determination of reducing sugar.* Analytical Chemistry. Vol. 31, 426-428, 1959.

OTTAIANO, G. Y.; DA CRUZ, I. N. S.; DA CRUZ, H. S. & MARTINS, T. D. *Estimation of vaporization properties of pure substances using artificial neural networks.* Chemical Engineering Science. Vol. 231, p. 116324, 2021.

PAULETTO, P.S.; DOTTO, G.L. & SALAU, N.P.G. *Optimal artificial neural network design for simultaneous modeling of multicomponent adsorption.* Journal of Molecular Liquids. Vol. 320, p. 114418, 2020.

PEREIRA, A. P. *Caracterização de mel com vista à produção de hidromel.* Instituto Politécnico de Bragança, Escola Superior Agrária, 2008.

PEREIRA, A.P.; OLIVEIRA, J.M.; MENDES-FERREIRA, A.; ESTEVINHO, L.M. & MENDES-FAIA, A. *Current Developments in Biotechnology and Bioengineering.* Vol.1, p. 407- 434, 2017.

RADKE, E. *Desenvolvimento de modelos híbridos-neurais para fermentação alcoólica e estudo de técnicas de otimização do processo.* 2002.

SANTOS, B.; SIMIQUELI, A.; PONEZI, A.; PASTORE, G. & FILETI, A. *Monitoring of biosurfactant production by bacillus subtilis using beet peel as culture medium via the development of a neural soft-sensor in an electronic spreadsheet.* Brazilian Journal of Chemical Engineering. Vol. 35, p. 1355-1367, 2018.

SILVA, B.G. & FILETI, A. M. F. *Artificial neural networks for modeling the drying process dynamics of schinus terebinthifolia raddi fruit.* Proceedings of the 15th IASTED International Conference on Intelligent Systems and Control, ISC 2016, p. 344–348, 2016.

SOUZA, R.N.L.D. *Análise sensorial de hidromel: tipo tradicional.* 2019.