

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE CIÊNCIAS AMBIENTAIS, QUÍMICAS E
FARMACÊUTICAS



ORLANDO GOMES NETO

**REDE NEURAL ARTIFICIAL PARA PREDIÇÃO DE PERFIS
DE CONCENTRAÇÃO NA FERMENTAÇÃO DE MEL COM
ADIÇÃO DE EXTRATO DE CASCA DE JABUTICABA**

Departamento de Engenharia Química
Projeto de Iniciação Científica
Orientador: Tiago Dias Martins

CAMPUS DIADEMA
2023

RESUMO

O hidromel é uma bebida alcoólica fermentada à base de água e mel produzida pela ação de leveduras, normalmente linhagens de *Saccharomyces cerevisiae*, sobre açúcares como glicose e frutose. O produtor, muitas vezes, se depara com empecilhos derivados do baixo conhecimento e falta de controle dos parâmetros importantes do processo. Pensando nisto, o presente trabalho teve como objetivo a elaboração de um sensor virtual baseado em Redes Neurais Artificiais capaz de prever a concentração de células (X), de açúcares totais (S) e a concentração de etanol (P) durante a fermentação para o fabrico de hidromel com adição polpa de casca de jabuticaba. Para que isto fosse possível, escolheu-se como variáveis de entrada: temperatura, pH do fermentado, concentração de sólidos solúveis totais (°Brix) e a densidade óptica (D.O.) Para a obtenção e simulação da rede *feedforward* com treinamento supervisionado, foram utilizados dados experimentais de uma fermentação realizada durante o projeto de IC de Costa (2020) (Processo FAPESP: 19/24444-1).

As redes neurais foram testadas em diversas configurações e feita a identificação de quais foram os melhores algoritmos de treinamento, funções de ativação, número de camadas intermediárias e quantidade de neurônio em cada camada a fim de otimizar a predição das variáveis de saída pela rede. O sensor virtual foi utilizado com sucesso para monitorar e otimizar a produção da bebida, garantindo bom rendimento, produtividade e alta qualidade do produto. A rede neural poderá ser aplicada para outras bebidas fermentadas, variações de hidromel e condições de processo, desde que a rede seja retreinada.

Embora essas RNAs tenham apresentado desempenho semelhante (com erros na faixa de 10^{-3} %), a escolha da rede mais adequada foi baseada na minimização do número de parâmetros (NP). Nesse contexto, a RNA ideal para o monitoramento da fermentação de hidromel foi identificada com a arquitetura 3-15-3, treinada com o algoritmo Levenberg-Marquardt com Regularização Bayesiana e funções de ativação tansig-purelin, compreendendo um total de 108 parâmetros.

Palavras-chave: Redes neurais artificiais, hidromel, fermentação alcoólica, monitoramento, sensor virtual, Polpa de casca de jabuticaba, treinamento supervisionado, otimização.

ABSTRACT

Mead is an alcoholic beverage fermented from water and honey, typically produced through the action of yeasts, usually strains of *Saccharomyces cerevisiae*, on sugars such as glucose and fructose. Producers often encounter obstacles stemming from limited knowledge and lack of control over key process parameters. Considering this, this study aimed to develop an Artificial Neural Network (ANN)-based virtual sensor capable of predicting cell concentration (X), total sugar concentration (S), and ethanol concentration (P) during mead fermentation with the addition of Jabuticaba peel pulp. To achieve this, the following input variables were selected: temperature, pH of the fermenting solution, total soluble solids concentration (°Brix), and optical density (OD). Experimental data from a fermentation conducted during Costa's undergraduate research (2020) (FAPESP Project: 19/24444-1) were employed to obtain and simulate the feedforward neural network with supervised training.

Neural networks were evaluated in various configurations, identifying the best training algorithms, activation functions, the number of intermediate layers, and the quantity of neurons in each layer to optimize the prediction of output variables by the network. The virtual sensor was successfully employed to monitor and optimize beverage production, ensuring high yield, productivity, and product quality. The neural network can be applied to other fermented beverages, mead variations, and process conditions, provided that the network undergoes retraining.

Although these ANNs exhibited similar performance (with errors in the range of 10^{-3} %), the selection of the most suitable network was based on minimizing the number of parameters (NP). In this context, the ideal ANN for monitoring mead fermentation was identified as having the architecture 3-15-3, trained with the Levenberg-Marquardt with Bayesian Regularization algorithm and tansig-purelin activation functions, comprising a total of 108 parameters.

Keywords: Artificial neural networks, mead, alcoholic fermentation, monitoring, virtual sensor, Jabuticaba peel pulp, supervised training, optimization.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Processo geral para obtenção do hidromel. Fonte: Autoria Própria.

Figura 2 - Processo fermentativo do hidromel. Fonte: Autoria Própria.

Figura 3 - Pigmentos derivados de antocianinas. Fonte: FREITAS & MATEUS, 2011.

Figura 4 - Neurônio Biológico. Fonte: Autoria Própria.

Figura 5 - Neurônio matemático artificial. Fonte: Autoria Própria.

Figura 6 - Perceptron com uma camada intermediária. Fonte: Autoria Própria.

Figura 7 - Funções de ativação: sigmoide ou logística (logsig), Tansig ou tangente hiperbólica e purelin (função identidade). Fonte: Autoria própria.

Figura 8 - Processo geral de obtenção de uma rede neural. Fonte: Autoria Própria.

Figura 9 - Rede de uma e duas camadas intermediárias. Fonte: Autoria própria.

Figura 10 - Concentração de açúcares redutores em função do tempo: comparativo do ajuste dos dados simulados em relação com os experimentais. Fonte: Autoria própria.

Figura 11 - Concentração de produto (etanol) em função do tempo: comparativo do ajuste dos dados simulados em relação com os experimentais. Fonte: Autoria própria.

Figura 12 - Concentração de células em função do tempo: comparativo do ajuste dos dados simulados em relação com os experimentais. Fonte: Autoria própria.

Figura 13 - Ajuste dos dados simulados da RNA para os açúcares redutores em relação com seus respectivos dados experimentais. Fonte: Autoria própria.

Figura 14 - Ajuste dos dados simulados da RNA para o produto e células em relação com os respectivos dados experimentais. Fonte: Autoria própria.

Figura 15 - Rede neural obtida de configuração 3-15-3. Fonte: Autoria Própria.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Média e espaçamento dos tempos de fermentação. Fonte: Autoria Própria.

Tabela 2 - configuração dos treinamentos gerais. Fonte: Autoria Própria.

Tabela 3 - Dados Experimentais para a Fermentação. Fonte: Autoria Própria.

Tabela 4 - Panorama geral de desempenho para as 10 melhores RNAs. Fonte: Autoria Própria.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	2
2	OBJETIVO	4
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
3.1	O HIDROMEL	5
3.2	DEFINIÇÃO E IMPORTÂNCIA HISTÓRICA DO HIDROMEL	5
3.3	CONSUMO ATUAL CONTEXTUALIZADO	5
3.4	OTIMIZAÇÃO E DESAFIOS EM BIOPROCESSOS	6
3.5	PROCESSO PRODUTIVO	6
3.6	PROCESSO FERMENTATIVO	7
3.6.1	Adição da casca de jabuticaba	12
3.7	PROCESSO DE MODELAGEM NA FERMENTAÇÃO DO HIDROMEL	13
3.8	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	14
3.8.1	Estrutura, Funcionamento e Treinamento	15
3.8.2	Algoritmos de Otimização	19
3.8.3	Funções de Ativação	21
3.8.4	Treinamento, Validação, Teste e Simulação	22
3.8.5	Aplicações de RNAs em Processos Fermentativos	23
4	MÉTODOS	26
4.1	FERMENTAÇÃO	27
4.2	OBTENÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS	27
4.3	OBTENÇÃO E SIMULAÇÃO DAS RNAs	28
4.3.1	Tratamento dos dados experimentais	29
4.3.2	Seleção das variáveis de entrada e saída	30
4.3.3	Definição dos parâmetros de eficiência da rede	30
4.3.4	Configuração e detalhes do treinamento das RNAs	32
4.3.5	Obtenção da rede	33
4.3.6	Simulação da rede e análise dos resultados obtidos	34
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	35
5.1	DADOS EXPERIMENTAIS EMPREGADOS NA OBTENÇÃO DA REDE	35
5.2	ANÁLISE DAS REDES OBTIDAS E CLASSIFICAÇÃO GERAL	36
5.3	SELEÇÃO DA MELHOR REDE COM BASE NA ESTRATÉGIA ABORDADA	39

6	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	45
6.1	CONCLUSÕES	45
6.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	47
7	PRODUÇÃO CIENTÍFICA	49
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	50

1 INTRODUÇÃO

Atualmente, a demanda por produtos com significado histórico e impacto socioeconômico tem crescido, beneficiando pequenos produtores e a produção artesanal. O hidromel, uma das bebidas alcoólicas mais antigas, tem experimentado um renascimento, especialmente nos Estados Unidos. Esse ressurgimento é atribuído ao crescente interesse na cultura geek, com entusiastas de festivais medievais e da mitologia nórdica valorizando a bebida. A influência de grandes produções cinematográficas e literárias, como "Game of Thrones" e "Senhor dos Anéis", pode ter contribuído para essa tendência, embora estudos específicos sobre essa relação ainda sejam necessários (NAKADA; CACIATORI; PANDOLFI, 2020).

O hidromel, uma bebida alcoólica tradicional derivada da fermentação do mel, possui uma composição que varia conforme o tipo de mel usado na produção do mosto. Esta variação influencia características como teor de ácido orgânico, pH, açúcar residual e teor alcoólico (KAWA-RYDLEWSKA; KUCHARSKA; WASZKIW; SROKA, 2023). Os principais componentes do hidromel incluem açúcares, ácidos orgânicos e compostos fenólicos (ARCHILIA *et al.*, 2021). A presença de compostos biologicamente ativos no hidromel destaca sua capacidade antioxidante, que é moldada por fatores como o tipo de mel, tratamento térmico do mosto, parâmetros de fermentação e ingredientes adicionais como ervas e frutas (OGANESYANTS *et al.*, 2015).

Além disso, observa-se um ressurgimento do interesse pelo hidromel, do qual tem conquistado um espaço cativo nos eventos de cultura pop e recriações históricas, atraindo uma base de consumidores diversificada e abrindo novas perspectivas para seu mercado (GURIAN, 2023). No Brasil, a produção de hidromel, embora artesanal, tem um potencial de mercado notável, especialmente nas regiões sul e sudoeste. Cidades como São Paulo e Curitiba são reconhecidas por sediar feiras dedicadas a essa bebida (NAKADA; CACIATORI; ANDOLFI, 2020).

Estudos recentes têm explorado a adição de frutas, especialmente nativas do Brasil, ao hidromel, visando enriquecer sua composição e sabor. A jabuticaba, por exemplo, com sua estabilizante antocianina, adiciona cor e sabor distintos à bebida. Além disso, a escolha da levedura, especialmente do gênero *Saccharomyces*, é crucial para a fermentação, que é influenciada pela qualidade do mel, pH e outros fatores. O mel, embora rico em açúcares fermentáveis, carece de nitrogênio e outros nutrientes essenciais para a levedura, tornando a

fermentação um processo lento. Portanto, a composição final do hidromel é determinada não apenas pelo mel, mas também pelos ingredientes adicionados ao mosto (NYHAN; SAHIN; ARENDT, 2023).

Monitorar as concentrações de células e dos açúcares redutores é crucial para a análise e controle do processo fermentativo. No entanto, as técnicas tradicionais de medição são demoradas. Assim, sensores virtuais baseados em Redes Neurais Artificiais (RNAs) são vistos como uma solução inovadora para medições mais rápidas e eficientes.

2 OBJETIVO

Neste estudo, a principal meta foi a concepção de um sensor virtual baseado em Redes Neurais Artificiais (RNAs) destinado a prever, durante a fermentação do hidromel, as concentrações de células (X), açúcares redutores (S) e, crucialmente, o produto final, o etanol (P). Para alcançar tal objetivo, recorreu-se a dados experimentais, incluindo como variáveis de entrada: °Brix, pH e densidade óptica (D.O.), devido à sua facilidade de mensuração em comparação com outras variáveis.

Adicionalmente, este trabalho teve como propósito avaliar meticulosamente a eficácia de cinco algoritmos de otimização distintos: Resilient-Backpropagation, Scaled Conjugate Gradient, Levenberg-Marquardt, Levenberg-Marquardt com Regularização Bayesiana e Gradiente Conjugado com Reinicializações de Powell-Beale. Paralelamente, analisou-se o impacto de diversas funções de ativação, nomeadamente logaritmo-sigmoide, tangente hiperbólica-sigmoide e linear, na precisão das previsões da rede. Estas análises fornecem diretrizes valiosas para futuras investigações no campo da produção de hidromel e destacam a versatilidade das RNAs em processos fermentativos.

É imperativo enfatizar que as variáveis de predição foram selecionadas com foco na produção tradicional do hidromel, que envolve a utilização exclusiva de água, leveduras e mel com adição de um extrato de casca de jabuticaba, que teve como objetivo oferecer um caráter antioxidante. Além disso, o estudo ressalta o vasto potencial das RNAs como modelos preditivos não apenas para o hidromel, mas também para outras bebidas que passam por processos fermentativos. Esta aplicabilidade se estende a variações da bebida e a diferentes condições operacionais, incluindo fatores temporais e variáveis como temperatura.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 O HIDROMEL

O hidromel, uma tradicional bebida alcoólica, tem seu teor alcoólico variando entre 4% e 14%, sendo fruto da fermentação do mel por leveduras. Esta bebida tem sido objeto de estudos que buscam entender a cinética da fermentação e os parâmetros envolvidos no processo, especialmente quando se utiliza a levedura *Saccharomyces cerevisiae* (BRITO, 2023). Há registros que indicam sua longa história, sendo uma das primeiras bebidas alcoólicas consumidas pela humanidade, com menções que remontam a tempos antigos, antes mesmo do vinho (GURIAN, 2023). No Brasil, o mercado tem mostrado um crescente interesse por bebidas fermentadas, com destaque para a produção e comercialização de cervejas artesanais. O hidromel, em particular, tem potencial para se destacar nesse cenário, dada a riqueza e diversidade de méis produzidos no país (LIMA, 2023).

3.2 DEFINIÇÃO E IMPORTÂNCIA HISTÓRICA DO HIDROMEL

Na mitologia nórdica, o hidromel era altamente valorizado, sendo visto como uma bebida de prestígio entre civilizações antigas, como os celtas, anglo-saxões e vikings. Esta bebida desempenhava um papel central em rituais e era frequentemente associada à imortalidade, ao conhecimento e ao dom da poesia. Era também acreditado que o hidromel possuía propriedades sobrenaturais e curativas, capazes de aumentar a força, virilidade e fertilidade (MORAES; LIMA, 2023).

Nos tempos modernos, a presença do hidromel em séries de televisão, como "Vikings", "Ragnarok" e "Game of Thrones", bem como em filmes, incluindo "Harry Potter", reforçou seu reconhecimento e apreciação (MORAES; LIMA, 2023). Globalmente, o hidromel é valorizado em muitos países, incluindo Inglaterra, Polônia, Alemanha e Eslovênia. No Brasil, há um potencial significativo para o crescimento do mercado de hidromel, com um público-alvo principal de homens e mulheres acima de 20 anos. As regiões Sul e Sudeste, especialmente São Paulo e Curitiba, são os principais centros de produção e comercialização desta bebida tradicional (NAKADA; CACIATORI; PANDOLFI, 2020).

3.3 CONSUMO ATUAL CONTEXTUALIZADO

O hidromel é uma bebida amplamente consumida e apreciada em países europeus, sendo historicamente reconhecido como a "bebida dos deuses". No entanto, no Brasil, ainda estamos nos estágios iniciais de exploração desta bebida. A produção nacional é majoritariamente artesanal, muitas vezes realizada por apicultores que veem no hidromel uma oportunidade de agregar valor ao mel. Esta abordagem artesanal, no entanto, enfrenta desafios, como a falta de uniformidade do produto e o longo período de fermentação. Além disso, a produção de hidromel no país é limitada devido à escassa utilização de tecnologia, à falta de tradição no mercado e à demanda interna que é fortemente influenciada por fatores culturais (ILHA *et al.*, 2008).

Apesar de sua longa história, a produção de hidromel ainda enfrenta desafios, como teores alcoólicos abaixo do ideal e a ocorrência de sabores e odores indesejados. Para superar esses obstáculos, é essencial desenvolver ferramentas e técnicas que otimizem as condições de produção, visando obter um produto de alta qualidade e rendimento (LIMA, 2022).

3.4 OTIMIZAÇÃO E DESAFIOS EM BIOPROCESSOS

Um fator determinante para a persistência da produção artesanal e a limitada disseminação do hidromel no país reside na carência de avanços científicos nesse campo. Atualmente, o hidromel é produzido em pequena escala industrial, e o processo de fabricação ainda é pouco compreendido. Nas indústrias, o método predominante é a fermentação em batelada, porém, esse processo apresenta desafios, uma vez que resulta em baixa produtividade devido à inibição pelo etanol e pelo substrato (QUEIROZ *et al.*, 2014).

Diversos problemas estão associados à produção de hidromel artesanal, incluindo a falta de controle do pH e da temperatura, a escassez de nutrientes essenciais e substrato durante a fermentação, bem como a inibição causada pelo etanol. A dificuldade em monitorar e manter esses fatores em condições ideais durante a fabricação do hidromel pode levar a um prolongado tempo de fermentação, uma taxa de crescimento microbiano reduzida e, consequentemente, uma diminuição na produtividade (GOMES, 2010).

3.5 PROCESSO PRODUTIVO

A produção de hidromel, uma bebida alcoólica derivada da fermentação de mel, segue etapas semelhantes à fabricação de vinho (MATTIETTO *et al.*, 2006). O processo inicia-se com a preparação do mosto, onde o mel é diluído em água até atingir 22 °Brix de sólidos solúveis (BRUNELLI, 2015). Pode-se adicionar frutas, ervas e especiarias para diversificar o sabor. A

correção do pH e a adição de suplementos nutricionais são essenciais, dado que o mel não fornece nutrientes suficientes para o crescimento microbiano (GUPTA; SHARMA, 2009).

A fermentação ocorre com a adição de inóculo em um fermentador esterilizado. O método descontínuo é o mais utilizado (BRUNELLI, 2015), e a conclusão da fermentação é identificada pela estabilização do teor de sólidos solúveis. Posteriormente, a descuba é realizada para separar o sedimento do líquido fermentado, evitando reações químicas indesejadas (BRUNELLI, 2015).

O hidromel passa por um período de maturação em anaerobiose, onde compostos aromáticos são formados. Durante essa etapa, a concentração de acetato de etila deve ser monitorada para não exceder 2000 mg. L^{-1} (MILESKEI, 2016). A maturação dura de 1 a 6 meses a temperaturas entre 10 e 12 °C (BRUNELLI, 2015).

Após a maturação, o líquido é transferido em um processo chamado trasfega, separando-o dos sólidos sedimentados. A clarificação é realizada para remover sólidos insolúveis, podendo ser auxiliada por filtração e agentes clarificantes (BRUNELLI, 2015). A pasteurização é sugerida para prolongar a vida útil do hidromel (BRUNELLI, 2015).

O fluxograma do processo produtivo pode ser visto na Figura 1, demonstrando como se dá a entrada na preparação do mosto até o envase do hidromel.

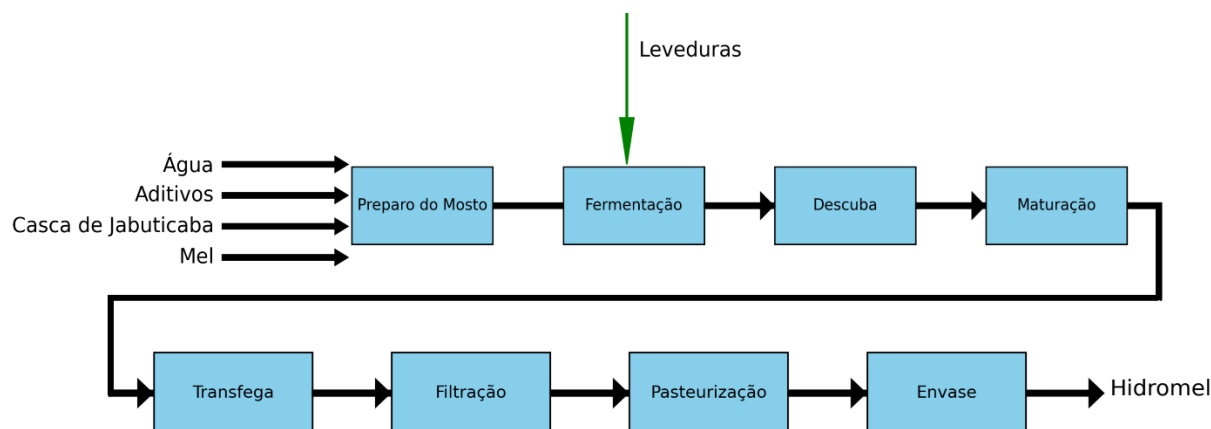


Figura 1 - Processo geral para obtenção do hidromel. Fonte: Autoria Própria.

3.6 PROCESSO FERMENTATIVO

A produção de uma bebida alcoólica é influenciada por diversos fatores, como a qualidade das matérias-primas, o tipo de agente fermentativo, a presença de aditivos e o processo de maturação, entre outros (GUPTA; SHARMA, 2009). No contexto da fermentação do hidromel, a linhagem de levedura utilizada, a variedade do mel, a composição do meio de cultura e o

controle do pH extracelular desempenham papéis cruciais na obtenção de uma bebida de alta qualidade (NAVRÁTIL; ŠTURDÍK; GEMEINER, 2001).

Conforme observado por Sroka & Tuszníski (2007), um dos principais desafios enfrentados na produção do hidromel está relacionado à prolongada duração do processo fermentativo, o que resulta em baixa produtividade. Para superar esse obstáculo, é essencial garantir que o pH, a temperatura, a linhagem de levedura e os fatores de crescimento estejam ajustados de forma adequada. A identificação e a mitigação dos fatores que diminuem a atividade celular podem acelerar o processo de produção e torná-lo mais economicamente viável (PEREIRA, 2008).

Vale destacar também que a maioria das leveduras enológicas não está adaptada às condições presentes em meios de cultivo à base de mel. Esses meios se caracterizam por um baixo pH, elevados níveis de açúcares, concentrações reduzidas de nitrogênio e a presença de uma variedade de ácidos originados no mel. Tipicamente, essas condições exercem um impacto adverso na fermentação, criando um ambiente estressante que não favorece o crescimento celular (IVORRA; PÉREZ-ORTÍN; DEL OLMO, 1999; MELO, 2006; PEREIRA, 2008).

Esta seção abordará com maior detalhe os principais fatores que influenciam o processo fermentativo:

A temperatura é um parâmetro de grande influência na cinética do processo fermentativo, pois afeta as taxas de consumo de substrato (e, conseqüentemente, o tempo de fermentação), a produção de etanol e o crescimento microbiano. O uso de uma temperatura inadequada impacta negativamente o rendimento da fermentação, a conversão de açúcares em etanol e, conseqüentemente, o teor alcoólico da bebida (ANDRADE, 2012).

O crescimento em temperaturas elevadas é prejudicial para *Saccharomyces cerevisiae* e leva a uma reorganização do fluxo metabólico. Inicialmente, ocorre um aumento no metabolismo em resposta ao aumento da temperatura em todo o sistema. Em seguida, ocorre a resposta metabólica ao estresse, que pode resultar em adaptação, inativação ou morte celular (MELO, 2006).

As taxas de fermentação mais eficazes são alcançadas em temperaturas situadas entre 20 e 30 °C, especialmente para leveduras do gênero *Saccharomyces*. Temperaturas muito baixas (inferiores a 15 °C) e muito altas (superiores a 30 °C) estão associadas a fermentações mais lentas (BRUNELLI, 2015). É relevante destacar que temperaturas superiores ao valor ótimo diminuem a taxa de fermentação devido à desnaturação enzimática e ao aumento da toxicidade do etanol (ANDRADE, 2012).

Portanto, o controle preciso da temperatura é essencial para otimizar o processo de fermentação alcoólica, alcançar alto rendimento e altas taxas de produção. Conforme observado por Brunelli (2015), é crucial que a fermentação para a produção de hidromel ocorra a 24 °C, a fim de aumentar as taxas de reação (velocidade do processo) e obter um hidromel com excelentes propriedades químicas. Na Figura 2, o processo fermentativo é detalhado nos passos da operação, desde a obtenção da matéria prima, até as análises físico-químicas e microbiológicas para a obtenção dos dados experimentais.

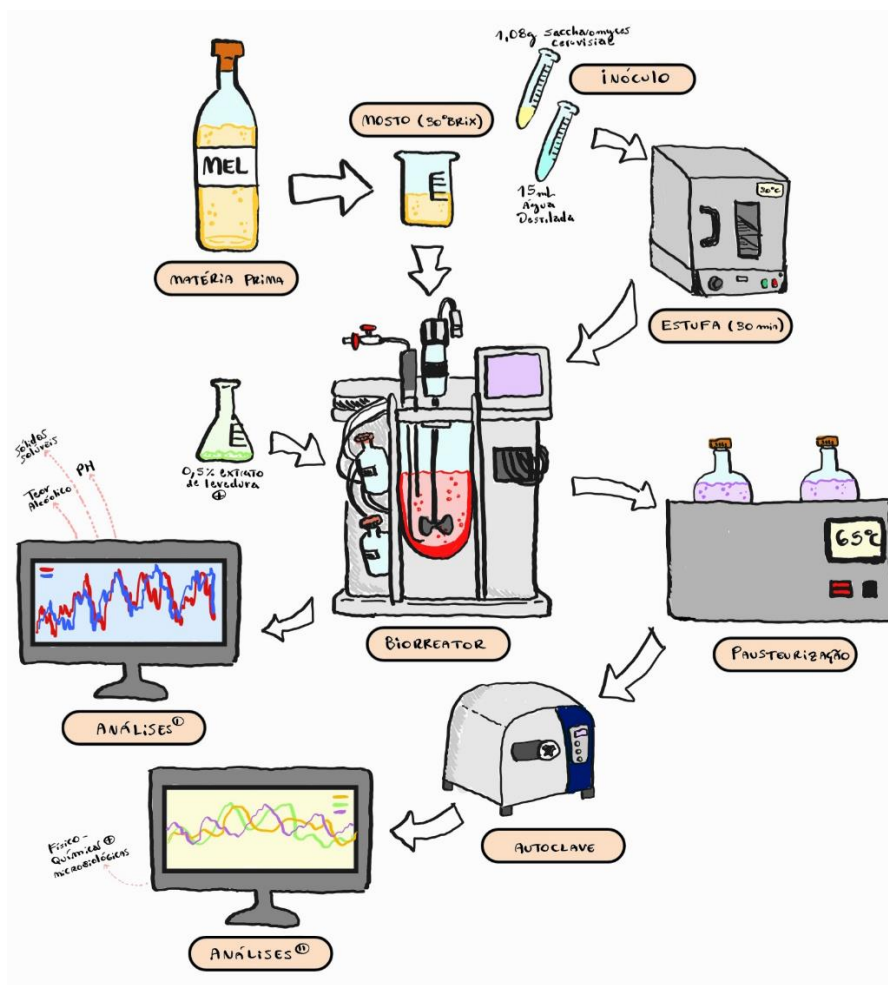


Figura 2 - Processo fermentativo do hidromel. Fonte: Autoria Própria.

O pH do mosto é outro fator de grande relevância a ser considerado, uma vez que um pH baixo resulta na redução do crescimento de muitos microrganismos. A fermentação alcoólica industrial é conhecida por envolver o reciclo de células e a exposição contínua a valores baixos de pH tanto no mosto quanto no pré-inóculo (MELO, 2006).

O mosto composto por mel e água possui uma capacidade tamponante reduzida, o que pode levar a uma diminuição do pH durante o processo de fermentação a ponto de inviabilizar a atividade microbiana (BRUNELLI, 2015; RAMALHOSA *et al.*, 2011). Conforme Sroka &

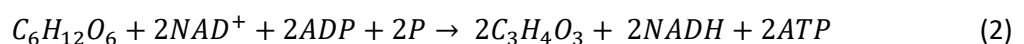
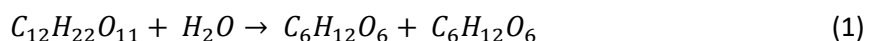
Tuszński (2007), essa diminuição na atividade pode ser atribuída à produção de ácido acético, um forte inibidor, e ácido succínico pelas próprias leveduras.

Outro fator de importância nas fermentações é a concentração de sacarose no mosto, uma vez que um alto teor desse composto pode tornar o processo fermentativo extremamente lento. Türkmen & Ekşi (2011) definem o grau Brix (°Brix) como uma escala numérica baseada no índice de refração que quantifica o teor de sólidos solúveis (açúcares totais) na solução de fermentação. Um grau Brix corresponde a 1 g de sacarose em 100g de solução e expressa a concentração da solução em porcentagem em massa (AMORIM *et al.*, 2018).

Em fermentações conduzidas em batelada, o valor de °Brix sofre alterações ao longo do processo. Um °Brix excessivamente elevado pode resultar na inibição por substrato, levando ao acúmulo de açúcares no produto final. Por outro lado, um valor muito baixo dessa variável resulta em baixas concentrações de produto e baixa eficiência do processo, pois os açúcares são essenciais para o crescimento e a produção. Durante fermentações em batelada, à medida que o microrganismo consome o substrato, o °Brix diminui e, como resultado, o teor alcoólico da bebida aumenta (AMORIM *et al.*, 2018).

Diante do exposto, a análise do grau Brix ao longo da fermentação é fundamental para monitorar o consumo de substrato e pode ser usada para avaliar o progresso do processo. Além de indicar o término da fermentação (BRUNELLI, 2015), ele fornece informações sobre o consumo de substrato pelas leveduras e, se necessário, pode orientar a tomada de decisões relacionadas ao ajuste das condições do processo.

A análise da densidade óptica (D.O.) é um método rápido e simples, embora indireto, para medir a concentração celular. Em termos gerais, esse parâmetro representa a quantidade de luz "dispersa" em uma suspensão de células (PATI; DE; CHOWDHURY, 2023). A medição é realizada em um espectrofotômetro, um equipamento que permite a comparação entre a luz transmitida por uma amostra contendo o soluto a ser quantificado e a intensidade da luz absorvida por essa amostra (SANTOS *et al.*, 2023).



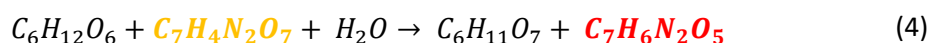
O experimento começou com a introdução de um inóculo ao fermentador, iniciando assim, o experimento fermentativo, cujas reações podem (de forma genérica) ser elucidadas no agrupamento equacional (1, 2 e 3), representados, respectivamente por: quebra da sacarose em seus monômeros, frutose e glicose, por meio da catalisação da hidrólise, graças à ação da enzima invertase presente no microrganismo *Saccharomyces cerevisiae* (1). Em seguida, os monômeros são convertidos em piruvato, liberando a energia necessária para o funcionamento dos microrganismos (2). Por fim, o produto alcoólico é produzido como resultado desse processo (3) (NELSON; COX, 2014).

Existe uma relação linear até certo ponto entre a absorbância e a concentração celular. No entanto, é importante notar que a medida da densidade óptica não distingue entre células viáveis e células mortas. Esse método é principalmente usado para confirmar o crescimento celular ou monitorar esse crescimento com base no aumento da absorbância em um determinado comprimento de onda (PATI; DE; CHOWDHURY, 2023).

A densidade óptica é, portanto, um parâmetro importante a ser monitorado ao longo da fermentação. Além de permitir a verificação das mudanças na concentração de leveduras durante o processo fermentativo e acompanhar o crescimento celular, essa medida pode ajudar a identificar a fase em que o crescimento microbiano se encontra (lag, exponencial, estacionária ou declínio) e auxiliar na implementação de alterações nas condições do processo (FU *et al.*, 2023)

As técnicas que utilizam o espectrofotômetro para a análise de açúcares variam principalmente no preparo da amostra. Uma dessas técnicas é a análise DNS, que é baseada no aquecimento da mistura entre a amostra e o ácido 3,5-dinitrossalicílico em meio alcalino, com excesso de hidróxido de sódio (SANTOS *et al.*, 2023). Nessa análise, o ácido 3,5-dinitrossalicílico, que é amarelo em solução, é reduzido por açúcares que possuem terminais redutores, como glicose e frutose. À medida que os açúcares redutores são oxidados, forma-se um composto de coloração avermelhada, que pode ser medido em um espectrofotômetro, o ácido 3-amino-5-nitrosalicílico. Quanto mais intensa a coloração da solução, maior é a concentração desses açúcares no meio (VASCONCELOS *et al.*, 2013).

A Equação 4, mostra, de forma resumida o processo envolvente:



Dado que o °Brix está associado à concentração total de açúcares, optou-se por empregar uma medida mais específica para determinar a concentração de açúcares redutores, como glicose e frutose, no meio de fermentação. Essa análise é de suma importância, uma vez que são os açúcares redutores que efetivamente passam pelo processo de fermentação, resultando na produção de células, dióxido de carbono e etanol. Devido à sua especificidade, essa técnica foi adotada para a determinação da concentração dos açúcares redutores (S), uma das variáveis de saída da RNA.

3.6.1 Adição da casca de jabuticaba

No contexto das características sensoriais de bebidas fermentadas, como o hidromel e o vinho, a cor sempre foi considerada um dos principais atributos perceptíveis pelos consumidores. Essa característica sensorial está originalmente associada à presença de um grupo significativo de pigmentos fenólicos solúveis em água, conhecidos como antocianinas, que também conferem um caráter antioxidante às bebidas. Nas jabuticabas e uvas tintas, algumas das antocianinas originais incluem cianidina, petunidina, peonidina, delphinidina e malvidina, juntamente com outros compostos, como demonstrado na Figura 3 (BURNS *et al.*, 2002).

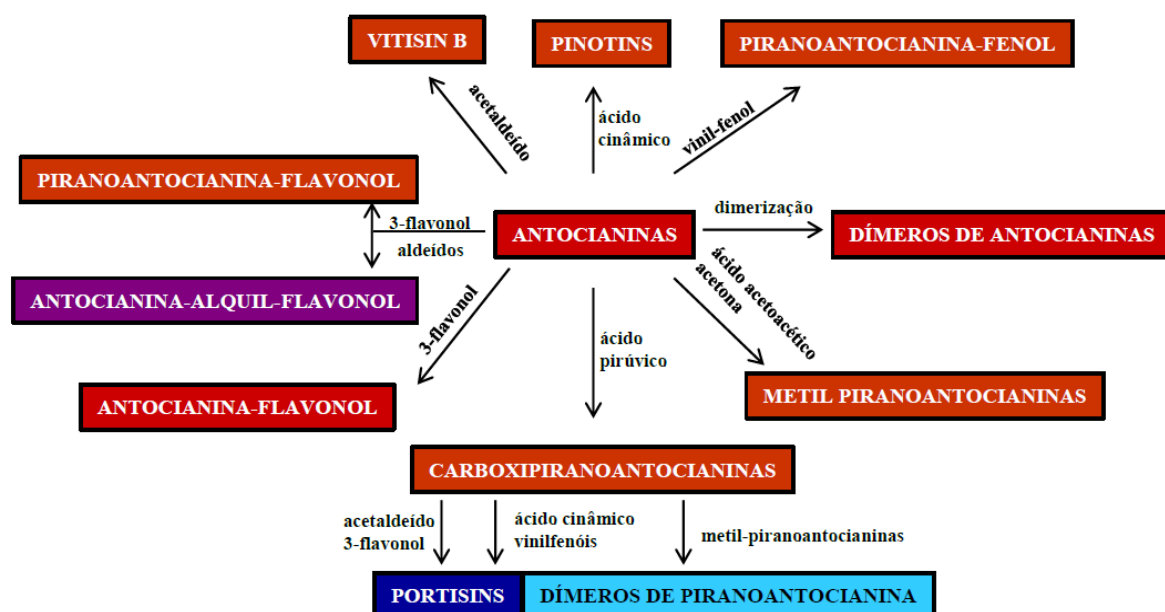


Figura 3 - Pigmentos derivados de antocianinas. Fonte: FREITAS & MATEUS, 2011.

As antocianinas, também conhecidas como antocianos, são pigmentos flavonoides que, dependendo do pH, e em alguns casos de agentes complexantes, outorgam aos vinhos cores

distintas como vermelho, púrpura ou azul. A concentração de antocianinas livres em vinhos tintos jovens é de 500 - 2000 mg.L⁻¹, dependendo da variedade, sistema de cultivo, sistema de extração, práticas enológicas, entre inúmeros outros fatores (BURNS *et al.*, 2002; MAZZA, G. & FRANCIS, F. J., 2005; BUSSE-VALVERDE *et al.*, 2011).

Em geral, as antocianinas encontram-se localizadas, principalmente, na película da uva e na casca da jabuticaba, sendo extraídas durante o processo de maceração que ocorre simultaneamente com a fermentação alcoólica em processos de vinificação clássica de vinhos tintos (RIZZON *et al.*, 1999).

Nos vinhos, durante a fermentação e nos anos subsequentes de maturação, as antocianinas sofrem uma série de reações e associações que determinam mudanças de cor e são essenciais na estabilidade da mesma (BROUILLARD *et al.*, 2003; HE, F. *et al.*, 2012). Além disso, apesar de serem basicamente inodoras e insípidas, as antocianinas podem interagir com outras substâncias e influenciar as características de aroma e sabor dos vinhos e hidroméis (DUFOUR, C.; SAUVAITRE, I., 2000).

3.7 PROCESSO DE MODELAGEM NA FERMENTAÇÃO DO HIDROMEL

A produção de hidromel, especialmente no contexto da otimização do processo fermentativo, é uma área de pesquisa em expansão. Com o avanço da tecnologia e a integração de técnicas modernas, como a Inteligência Artificial, há um potencial significativo para melhorar e refinar o processo de fermentação do hidromel.

A valorização de resíduos alimentares através de processos fermentativos tem sido um foco de pesquisa, e o hidromel, sendo produzido a partir do mel, pode se beneficiar desses avanços (ORTIZ-SÁNCHEZ *et al.*, 2023). Além disso, a otimização da mídia de cultura celular, que é crucial para o rendimento do produto, qualidade e custo de produção, tem sido explorada através de abordagens algorítmicas, e tais técnicas podem ser aplicadas ao hidromel (ZHOU *et al.*, 2023).

A diversidade de leveduras utilizadas na fermentação do vinho, incluindo leveduras não-Saccharomyces, tem mostrado impacto significativo no aroma e sabor do vinho. A aplicação dessas descobertas ao hidromel pode levar a bebidas com perfis aromáticos e gustativos mais complexos e desejáveis (MAICAS; MATEO, 2023).

Um exemplo é o estudo de Zhang *et al.* (2014), no qual a Metodologia de Superfície de Resposta(MSR) foi empregada para otimizar a produção de hidromel. Nesse trabalho, a metodologia foi utilizada para determinar as condições ideais de temperatura, pH e concentração de fosfato diamônio no processo de fabricação da bebida. Como resultado, se apresentou uma equação de regressão que se ajustou bem aos dados experimentais, permitindo a eficiente determinação das condições ideais do processo, resultando em um hidromel com teor alcoólico de 9,3% (v/v) e excelente sabor.

Vale destacar que, embora não tenha sido encontrado na literatura um uso específico dessa metodologia em conjunto com RNAs para a fermentação de hidromel, existem trabalhos que aplicaram essa abordagem com sucesso em outros processos fermentativos. Santos *et al.* (2018), por exemplo, desenvolveram um sensor virtual neural para monitorar a produção de biossurfactante por *Bacillus subtilis* e utilizaram a MSR para determinar os valores ótimos dos parâmetros de operação.

Portanto, é evidente que há uma lacuna no que diz respeito à modelagem do processo de fermentação para a produção de hidromel com o uso de sensores virtuais neurais. Nesse contexto, este trabalho se destaca como inovador, com o potencial de proporcionar o monitoramento da fermentação e, conseqüentemente, oferecer suporte para a obtenção de um hidromel de alta qualidade e rendimento.

3.8 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Os avanços recentes na área de Inteligência Artificial (IA) têm levado a uma crescente adoção das Redes Neurais Artificiais (RNAs) em diversos setores. Estas redes, inspiradas na estrutura e funcionamento do cérebro humano, têm mostrado ser ferramentas poderosas para lidar com grandes volumes de dados e extrair padrões complexos a partir deles (COSTA; SILVA; SCÁRDUA, 2023).

As RNAs são sistemas computacionais que simulam a capacidade dos neurônios biológicos de processar e transmitir informações. Elas são compostas por camadas de neurônios artificiais interconectados, onde cada conexão possui um peso associado que é ajustado durante o processo de aprendizado (COSTA; SILVA; SCÁRDUA, 2023).

Em resumo, as Redes Neurais Artificiais têm se mostrado ferramentas valiosas na era atual da informação, com aplicações que vão desde a análise financeira até a otimização de processos em diversos setores. A capacidade dessas redes de aprender e adaptar-se a novos dados as torna essenciais para enfrentar os desafios do mundo moderno.

3.8.1 Estrutura, Funcionamento e Treinamento

Redes neurais artificiais são inspiradas na estrutura neural de organismos vivos e consistem em unidades de processamento, semelhantes aos neurônios biológicos. A capacidade de processamento dessas redes é determinada pela informação armazenada nas conexões entre essas unidades, conhecidas como pesos. Esses pesos são ajustados através de um processo de aprendizado que utiliza padrões de treinamento específicos (KAVEH; MESGARI, 2022).

A eficácia de uma rede neural artificial (RNA) é avaliada pela precisão com que ela pode replicar os dados de saída desejados. Para isso, o neurônio artificial precisa ser treinado para executar uma tarefa específica (FLECK *et al.*, 2016).

Durante o treinamento, a RNA analisa e assimila informações de padrões apresentados, formando uma compreensão única do problema em questão. Nesse processo, os pesos das conexões entre as unidades são ajustados. Assim, ao término do treinamento, a RNA possui uma compreensão do contexto em que opera, "salva" em seus parâmetros. Existem diversas técnicas para treinar RNAs, mas quando aplicadas à modelagem, o método de aprendizado supervisionado é frequentemente utilizado (FLECK *et al.*, 2016).

O termo "aprendizado supervisionado" refere-se à presença de um orientador externo que fornece os dados de entrada e saída para a RNA, com o objetivo de otimizar seus parâmetros. Durante esse aprendizado, o orientador avalia e guia o desempenho da rede, comparando sua saída com a saída desejada e ajustando os pesos para reduzir erros. Esse ajuste é gradual, com pequenas modificações feitas a cada ciclo de treinamento. A diferença acumulada entre a saída desejada e a saída real é frequentemente usada como métrica de desempenho e como critério de otimização (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2016).

Existem dois modos principais de implementar o aprendizado supervisionado: "off-line" e "on-line". No modo "off-line", os dados de treinamento são fixos. Se novos dados precisarem ser incluídos, um novo conjunto de treinamento deve ser criado. No modo "on-line", a RNA está em constante adaptação, atualizando-se continuamente com novos dados (FLECK *et al.*, 2016). Estas redes são compostas por unidades de processamento chamadas neurônios artificiais que imitam os neurônios biológicos (Figura 4) em sua funcionalidade básica (RIPLEY; RIPLEY, 2001).

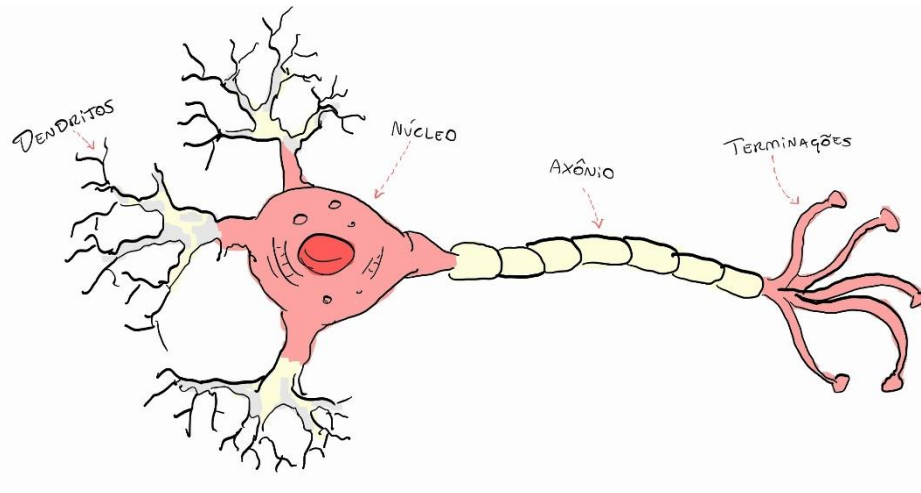


Figura 4 - Neurônio Biológico. Fonte: Autoria Própria.

No início do processo biológico, informações ou impulsos nervosos são captados pelos dendritos e, a partir daí, são encaminhados para o corpo celular. No corpo celular, ocorre o processamento dessas informações e a geração de novos impulsos, que são então transmitidos através do axônio até suas ramificações terminais. A partir dessas terminações, os impulsos são transmitidos a outros neurônios por meio das sinapses, que representam os pontos de contato entre a extremidade do axônio de um neurônio e o dendrito de outro (BRAGA *et al.*, 2000).

Para que o impulso seja transmitido à célula nervosa seguinte, é essencial que o limiar de excitação (threshold) seja alcançado. Segundo Braga *et al.* (2000), o disparo de um neurônio depende do acúmulo de uma grande quantidade de entradas, incluindo entradas inibitórias e excitatórias, avaliadas pelo corpo celular em um curto espaço de tempo. Se o percentual resultante for suficientemente elevado, o corpo celular combina os sinais recebidos e o neurônio "dispara", gerando um impulso que é então transmitido aos neurônios subsequentes. Após o disparo, o neurônio entra em um estado de repouso, preparando-se para gerar um novo impulso.

A analogia mais abrangente entre neurônios artificiais e biológicos reside no fato de que as conexões entre os nodos dos neurônios artificiais representam os axônios e dendritos, enquanto os pesos correspondem às sinapses, e o limiar se assemelha à atividade na soma. É fundamental destacar que tanto as Redes Neurais Artificiais (RNAs) quanto as redes biológicas aprendem por meio do ajuste incremental dos pesos ou da força das sinapses (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2016).

A Figura 5 apresenta o modelo matemático de um neurônio artificial. Nesse modelo, o neurônio recebe N entradas (inputs), identificadas como x_j . Cada entrada está associada ao seu peso w_{kj} . O limiar (bias) é representado por b_k , a junção somatória é indicada por Σ , que

representa a soma ponderada das entradas multiplicadas pelos seus pesos sinápticos (coeficiente de ativação), e a função de ativação é representada por f , enquanto a saída é denotada por y_k .

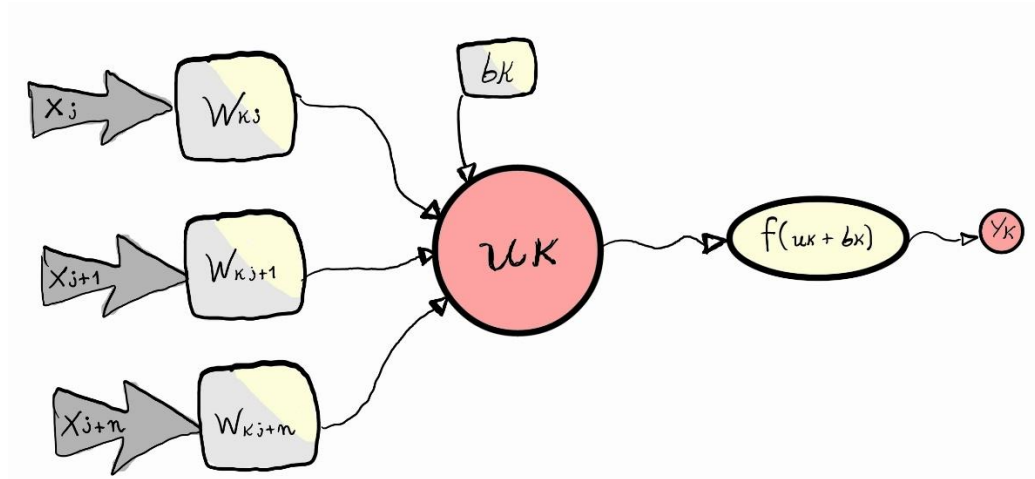


Figura 5 - Neurônio matemático artificial. Fonte: Autoria Própria.

Matematicamente, o neurônio k pode ser representado pelas Equações (5) e (6). É importante destacar que essas equações permitem determinar o valor de ativação de cada neurônio (DAL'BOIT, 2008).

$$u_k = \sum_{j=1}^N w_{kj} x_j \quad (5)$$

$$y_k = f(u_k + b_k) \quad (6)$$

Cada neurônio em uma RNA (k) recebe uma série de entradas, as processa e produz uma saída. As entradas são ponderadas com base em pesos, que são ajustados durante o processo de treinamento da rede. A soma ponderada das entradas passa por uma função de ativação (f), que determina a saída do neurônio (y_k) sendo aqui, introduzida para conferir não-linearidade ao modelo. Essa adição é crucial nas redes neurais artificiais para permitir saídas com valores distintos de 0 e 1, além de proporcionar ao modelo a capacidade de representar relações não-lineares. Diversas funções de ativação podem ser empregadas, sendo as mais comuns as funções linear, tangente hiperbólica e sigmoide (DAYHOFF; DELEO, 2001).

A estrutura de uma RNA é geralmente organizada em camadas: uma camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas e uma camada de saída. A informação flui da camada de entrada, através das camadas ocultas, até a camada de saída. As conexões entre os neurônios, conhecidas

como sinapses, são onde os pesos são armazenados e ajustados durante o treinamento (SPERDUTI, 2001).

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) podem assumir uma variedade de estruturas, e a escolha da configuração adequada está intimamente relacionada com o algoritmo de aprendizado utilizado para treinar a rede. Esse algoritmo influencia o número de neurônios e camadas presentes na rede, bem como a organização dos neurônios. As RNAs podem ser essencialmente divididas em três categorias distintas: redes feedforward de camada única (Figura 6), redes feedforward de múltiplas camadas e redes recorrentes (HAYKIN, 2000).

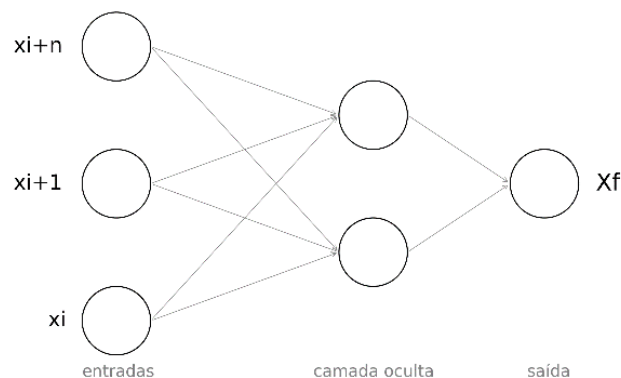


Figura 6 - Perceptron com uma camada intermediária. Fonte: Autoria Própria.

O processo de treinamento de uma RNA envolve a apresentação de um conjunto de dados de entrada e saída desejada à rede. A rede faz previsões com base nas entradas e ajusta seus pesos para minimizar a diferença entre suas previsões e as saídas desejadas. Esse processo é repetido várias vezes até que a rede alcance um nível aceitável de precisão. Existem vários algoritmos de treinamento disponíveis, sendo o algoritmo de retropropagação um dos mais populares, esse processo é crucial para que as RNAs sejam eficazes na solução de uma ampla gama de problemas, incluindo aqueles relacionados ao monitoramento e otimização de processos, como na fermentação de hidromel (MICHAELIDES; PATTICHIS; KLEOVOULOU, 2001).

Dois aspectos críticos a serem cuidadosamente definidos são o número de camadas e neurônios na configuração da rede. Geralmente, adicionar duas ou mais camadas intermediárias pode facilitar o processo de treinamento. No entanto, a incorporação de um grande número delas não é recomendada, pois pode resultar em uma rede superdimensionada e menos precisa, uma vez que erros se propagam para camadas anteriores (o que é a base do presente trabalho, uma escolha sensata visando o esforço computacional e outros parâmetros). A quantidade de

neurônios, por outro lado, é influenciada por diversos fatores, incluindo o tamanho do conjunto de treinamento, a presença de ruído nos exemplos, a complexidade da função a ser aprendida e a distribuição estatística dos dados. Portanto, sua definição geralmente envolve uma abordagem empírica (BRAGA *et al.*, 2000).

É essencial evitar o uso excessivo de neurônios, o que pode impedir a rede de extrair características gerais que permitam o reconhecimento de padrões não encontrados durante o treinamento, um problema conhecido como sobreajuste (overfitting). Por outro lado, utilizar um número muito reduzido de neurônios pode levar a redes que levam um tempo excessivo para encontrar uma representação ideal, ou seja, sub-ajustado. Quando a quantidade de dados de treinamento é muito maior que o número de conexões, o sobreajuste é improvável, mas pode fazer com que a rede não alcance a convergência durante o treinamento (BRAGA *et al.*, 2000).

3.8.2 Algoritmos de Otimização

O entendimento profundo dos algoritmos de treinamento começa com uma análise detalhada do modelo de aprendizado de máquina segundo Goodfellow, Bengio e Courville (2016), o sistema absorve informações do ambiente, que são processadas e integradas à sua base de conhecimento. Esta base é, subsequentemente, utilizada para realizar tarefas específicas. Dada a natureza frequentemente incompleta das informações do ambiente, a máquina não tem uma compreensão total a priori de como preencher as lacunas em seus dados. Assim, ela opera com base em inferências e, após a execução, recebe feedback, possibilitando a avaliação e revisão de suas suposições (GOODFELLOW; BENGIO; COURVILLE, 2016).

De acordo com LeCun, Bengio e Hinton (2015), o aprendizado é o mecanismo pelo qual os parâmetros de uma rede neural são otimizados. Existem múltiplos algoritmos de treinamento, cada um com suas características distintas. A principal distinção entre eles, conforme discutido por Kingma e Ba (2014), é a metodologia de ajuste dos pesos (LECUN; BENGIO; HINTON, 2015; KINGMA; BA, 2014)

O processo de treinamento da rede é guiado pelas Equações (7) e (8), onde $w(i)$ simboliza os pesos sinápticos, $b(i)$ denota os biases, e i indica a iteração corrente. Durante este processo, ambos os parâmetros são refinados para melhorar a eficácia da rede.

$$w_{i+1} = w(i) + \Delta w(i) \quad (7)$$

$$b_{i+1} = b(i) + \Delta b(i) \quad (8)$$

Dada a diversidade de algoritmos de treinamento existentes, este estudo focará nos que têm mostrado excelência em pesquisas correlatas e que serão utilizados na configuração da Rede Neural Artificial (RNA) para este projeto. Os algoritmos mais pertinentes para esta análise são: Resilient Backpropagation, Scaled Conjugate Gradient, Levenberg-Marquardt, Levenberg-Marquardt com Regularização Bayesiana e Conjugate Gradient com reinicializações de Beale.

No contexto de treinamento de Redes Neurais Artificiais (RNAs) utilizando a plataforma MATLAB, diversos algoritmos são disponibilizados para otimizar o ajuste dos pesos e bias da rede. Cada algoritmo apresenta características intrínsecas que o tornam mais adequado para determinados cenários e tipos de problemas (TEKIN; CAN, 2021).

O algoritmo identificado pela string 'trainrp', denominado Gradiente Resiliente, adota uma metodologia de atualização de peso menos influenciada pela escala das derivadas. Esta particularidade o torna uma opção viável para situações em que os pesos e bias da rede necessitam de ajustes em escalas variadas.

O algoritmo 'trainscg', ou Gradiente Conjugado Escalonado, fundamenta-se no método do gradiente conjugado. Este é notório por sua eficiência e rápida convergência, mostrando-se especialmente benéfico para RNAs com uma vasta quantidade de parâmetros (KARHE; KALE, 2020). Dada sua eficácia, é frequentemente indicado como uma escolha versátil para o treinamento de RNAs.

Por sua vez, o algoritmo 'trainlm', baseado no método de Levenberg-Marquardt, destaca-se pela acelerada convergência, sendo altamente efetivo em problemas relacionados à regressão e aproximação de funções. Este método é particularmente recomendado para redes neurais que contam com uma única camada oculta.

O 'trainbr', que associa o método de Levenberg-Marquardt à regularização Bayesiana, incorpora mecanismos de regularização ao treinamento, visando prevenir o fenômeno de overfitting. Esta estratégia é crucial quando se identifica um risco elevado de ajuste excessivo aos dados de treinamento (AWANG *et al.*, 2018).

Finalmente, o algoritmo 'traincgb', conhecido como Gradiente Conjugado com Reinicializações de Powell-Beale, integra o método do gradiente conjugado a reinicializações específicas, sendo uma alternativa valiosa quando outros métodos enfrentam dificuldades de convergência (SHERALI; ULULAR, 1990).

É imperativo enfatizar que a seleção do algoritmo de treinamento deve ser meticulosamente realizada, considerando as peculiaridades do problema e dos dados em análise. Processos de experimentação e validação cruzada são essenciais para determinar o algoritmo mais propício para cada contexto (TEKIN; CAN, 2021).

3.8.3 Funções de Ativação

Conforme observado por Braga *et al.* (2000), o modelo original de Rede Neural Artificial (RNA), proposto por McCulloch e Pitts em 1943, passou por inúmeras variações ao longo do tempo. Essas variações possibilitam que a RNA gere não apenas saídas binárias (zero e um), mas também saídas de natureza diversa, utilizando diferentes funções de ativação. Dal'Boit (2008) enfatiza que a função de ativação pode ser tanto uma função linear quanto não linear de uk , e algumas das funções de ativação mais comuns incluem a função logaritmo-sigmoide (logsig), a tangente hiperbólica-sigmoide (tansig) e a função linear (purelin). Representações gráficas dessas funções estão ilustradas na Figura 7.

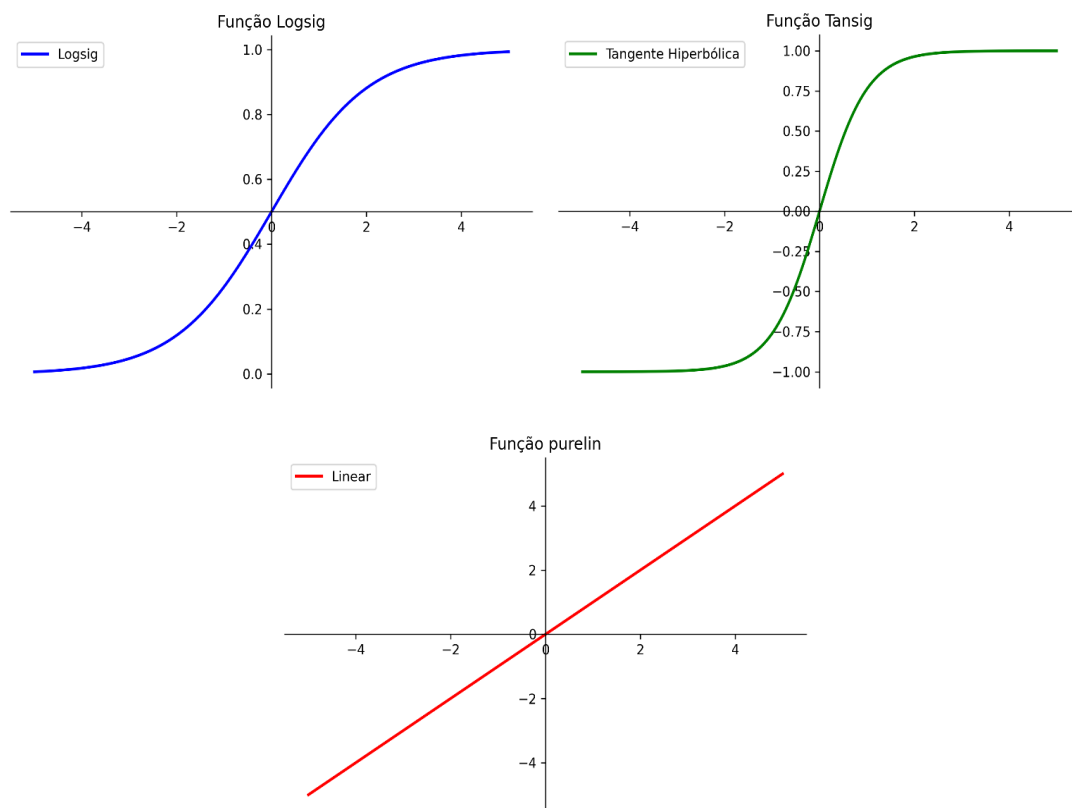


Figura 7 - Funções de ativação: sigmoide ou logística (logsig), Tansig ou tangente hiperbólica e purelin (função identidade). Fonte: Autoria própria.

Um ponto relevante a ser destacado é que o único requisito essencial para uma função de ativação é que ela seja diferenciável, ou seja, que seja uma função contínua (HAYKIN, 2000). As Equações (9), (10) e (11) representam, respectivamente, a função logaritmo-sigmoide, a tangente hiperbólica-sigmoide e a função linear (Representadas pelas figura (7)). Essas funções desempenham um papel fundamental na capacidade da RNA de aprender e modelar informações complexas em diversos tipos de problemas.

$$f(x) = \left(\frac{1}{1 + e^{-x}} \right) \quad (9)$$

$$f(x) = \left(\frac{2}{1 + e^{-2x}} \right) - 1 \quad (10)$$

$$f(x) = x \quad (11)$$

A equação 9, pode ser chamada meramente na literatura de $\sigma(x)$ sigmoide e a equação 10, representada também por $\text{Tanh}(x) = 2\sigma(2x) - 1$.

3.8.4 Treinamento, Validação, Teste e Simulação

Em resumo, o treinamento de uma Rede Neural Artificial (RNA) é essencialmente um problema de otimização não linear sem restrições, no qual os pesos sinápticos são ajustados iterativamente com o objetivo de minimizar o erro quadrático médio entre a saída desejada e a saída real da rede. Do ponto de vista estatístico, essa fase envolve a estimativa dos parâmetros do modelo com base em um conjunto de dados disponíveis (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2009). Vários fatores desempenham um papel crucial nesta etapa, incluindo a inicialização da rede, o tempo de treinamento, o número de camadas intermediárias, a quantidade de neurônios em cada camada e o volume de dados disponíveis para o treinamento (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2016).

O tempo de treinamento pode ser afetado por diversos fatores, e é fundamental estabelecer um critério de parada apropriado. Geralmente, o treinamento é concluído quando a rede demonstra uma boa capacidade de generalização e a taxa de erro atinge um valor aceitável. Encontrar esse ponto ideal de parada, onde o erro é mínimo e a capacidade de generalização é máxima, é uma tarefa crítica. O número máximo de ciclos de iteração (épocas) também influencia o tempo de treinamento (DAL'BOIT, 2008).

Em qualquer problema que envolva Redes Neurais Artificiais, é necessário ter acesso a pares de entrada e saída conhecidos. Os dados utilizados para modelagem devem ser divididos em conjuntos distintos, permitindo que etapas de treinamento, validação, teste e simulação sejam realizadas sem a reutilização dos mesmos dados. Embora diferentes proporções possam ser empregadas, geralmente a maior parte dos dados é reservada para o treinamento (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2009).

Após o treinamento, a avaliação do desempenho da rede é conduzida utilizando um conjunto de teste independente. Nesse estágio, a rede é testada em pares de entrada-saída que não foram usados durante o treinamento, permitindo uma avaliação objetiva de sua capacidade de generalização. A validação é realizada subsequentemente, envolvendo pares de entrada-saída completamente novos que não têm influência no término do treinamento (HASTIE; TIBSHIRANI; FRIEDMAN, 2009).

Por último, existe uma etapa adicional chamada de simulação, na qual a RNA é testada sob condições reais para avaliar sua precisão. Essa etapa também serve para evitar o overfitting, no qual a RNA se ajusta excessivamente aos dados de treinamento, perdendo sua capacidade de generalização.

Vale ressaltar que a maioria dos estudos existentes na literatura relacionados a Redes Neurais Artificiais se concentra nas etapas de treinamento, validação e teste, ignorando a etapa de simulação. No entanto, a simulação desempenha um papel crucial na confirmação da capacidade preditiva da RNA e pode fornecer resultados que contradizem as conclusões obtidas nas etapas anteriores (MELO; OLIVEIRA; MARTINS, 2020).

Um exemplo notável da importância da simulação foi evidenciado por Ottaiano *et al.* (2021). Neste estudo, a etapa de validação inicial sugeriu que uma configuração de rede era a melhor opção, mas a simulação subsequente revelou que essa rede não era capaz de prever adequadamente as variáveis de saída. A decisão final sobre a melhor RNA foi, portanto, baseada na etapa de simulação.

3.8.5 Aplicações de RNAs em Processos Fermentativos

Há uma extensa quantidade de estudos relacionados ao uso de Redes Neurais Artificiais (RNAs) aplicadas à fermentação alcoólica disponível na literatura. Esses estudos geralmente visam a criação de modelos capazes de descrever as características mais significativas do processo de fermentação ou a utilização desses modelos para fins de controle e otimização. Abordaremos alguns desses trabalhos em ordem cronológica.

Zhang *et al.* (1994) desenvolveram um protótipo de sistema de controle baseado em RNAs para monitorar as fermentações de *Bacillus thuringiensis*. Neste estudo, vários parâmetros foram utilizados como entradas para a RNA, incluindo o tipo de inóculo, a temperatura de operação, o valor de pH, o tempo de processo acumulado, a densidade óptica do mosto e a variação na Densidade Óptica (D.O.). A RNA, neste caso, previa como saída a densidade óptica para o próximo período de amostragem. O sistema de controle foi implementado tanto em

simulações computacionais quanto em experimentos de fermentação em escala laboratorial. Os resultados demonstraram que a RNA do tipo feedforward Backpropagation melhorou o controle do processo fermentativo e manteve a operação em condições ótimas durante o processo. O sucesso deste estudo foi em parte atribuído à preparação adequada dos dados de treinamento, incluindo a normalização dos dados, e à configuração apropriada da RNA (ZHANG *et al.*, 1994).

Um estudo abrangente sobre o tema foi conduzido por Radke (2002), que investigou técnicas de otimização para o processo de fermentação alcoólica com o objetivo de determinar faixas operacionais adequadas e desenvolver um modelo do processo. Para isso, Radke combinou equações de balanço de massa com RNAs para descrever a cinética desconhecida do processo. O estudo também considerou o uso de medidas secundárias, como turbidez, pH e °Brix, como variáveis de entrada para a RNA. Foram elaborados três modelos de RNA, cada um com quatro variáveis de entrada e uma variável de saída correspondente a uma taxa cinética específica. Os resultados demonstraram um bom desempenho das RNAs na descrição da cinética do processo. Além disso, o estudo ressaltou que a escolha da função de ativação, particularmente a função tansig nas camadas intermediárias, resultou em melhores resultados de validação em comparação com a função logsig. Radke também desenvolveu dois modelos híbridos, um dos quais empregou variáveis primárias (X - células, S – Substrato, P - etanol) como entradas da RNA e obteve resultados satisfatórios na aproximação de dados desconhecidos. O segundo modelo híbrido usou variáveis secundárias (pH, turbidez e °Brix) como entradas e alcançou resultados ainda melhores que o primeiro. Este estudo destacou a importância de modelos elaborados com variáveis facilmente mensuráveis para melhorar o monitoramento do processo e sugeriu que essas variáveis poderiam ser incorporadas ao modelo em tempo real (RADKE, 2002).

E uma base do presente trabalho, desenvolvido por Amgarten em 2012, aplicou a utilização de redes neurais artificiais na construção de um modelo matemático preditor do rendimento de fermentação. As entradas utilizadas no modelo foram selecionadas pelo método estatístico de correlação linear a partir de uma série de parâmetros monitorados em usinas de produção de etanol e açúcar (AMGARTEN, 2012).

Santos *et al.* (2018), desenvolveram um sensor virtual neural em planilha eletrônica para monitorar a produção de biossurfactante por *Bacillus subtilis* usando apenas casca de beterraba como meio de cultura. Embora este estudo envolvesse um cultivo aeróbico, sua aplicação é semelhante ao desenvolvimento de RNAs. Os autores basearam-se no Perceptron multicamada, no algoritmo de treinamento de Levenberg-Marquardt com regularização Bayesiana e na função

de ativação tansig. As variáveis de entrada incluíam concentração celular, concentração de glicose, tensão superficial, concentração de oxigênio dissolvido e tensão superficial dissolvida em dez ou cem vezes. A saída da RNA era a concentração de biossurfactante bruto. O uso da Densidade Óptica (D.O.) como entrada da RNA foi adotado devido à rapidez desse método em comparação com a gravimetria. Os resultados revelaram que a RNA obteve um coeficiente de determinação (R^2) de 0,9955, o que permitiu o desenvolvimento de um sensor virtual neural (SANTOS *et al.*, 2018).

E mais recentemente, Silva *et al.* (2021) utilizou na criação do sensor, duas estratégias foram empregadas. Na primeira estratégia, as variáveis X (concentração de células) e S (concentração de açúcares redutores) foram previstas separadamente por duas RNAs. Na segunda estratégia, uma única RNA previu ambas as variáveis simultaneamente. Tendo um sensor virtual desenvolvido com potencial para monitorar e otimizar a produção de bebidas, visando maximizar o rendimento e a produtividade, também empregando como dados de entrada variáveis como pH, D.O. e °Brix.

Em resumo, as RNAs são ferramentas poderosas que podem aprender padrões complexos e fazer previsões com base em dados. Elas são amplamente utilizadas em diversas áreas, desde a detecção de padrões em dados climáticos até aplicações médicas, como diagnóstico, prognóstico de doenças, processos químicos desde fermentações e tratamentos de efluentes entre outras diversas áreas.

4 MÉTODOS

Na presente parte de métodos, detalha-se a abordagem adotada desde a seleção de variáveis até a análise dos resultados. Inicia-se com a coleta de dados por meio de experimentos de fermentação, seguida pelo tratamento desses dados e a configuração de uma rede neural. Após o treinamento e validação da rede, realizam-se simulações para, finalmente, equacionar e analisar os resultados obtidos, garantindo uma compreensão profunda do processo em estudo. Representado na Figura 8, está o panorama geral de obtenção de uma rede neural:

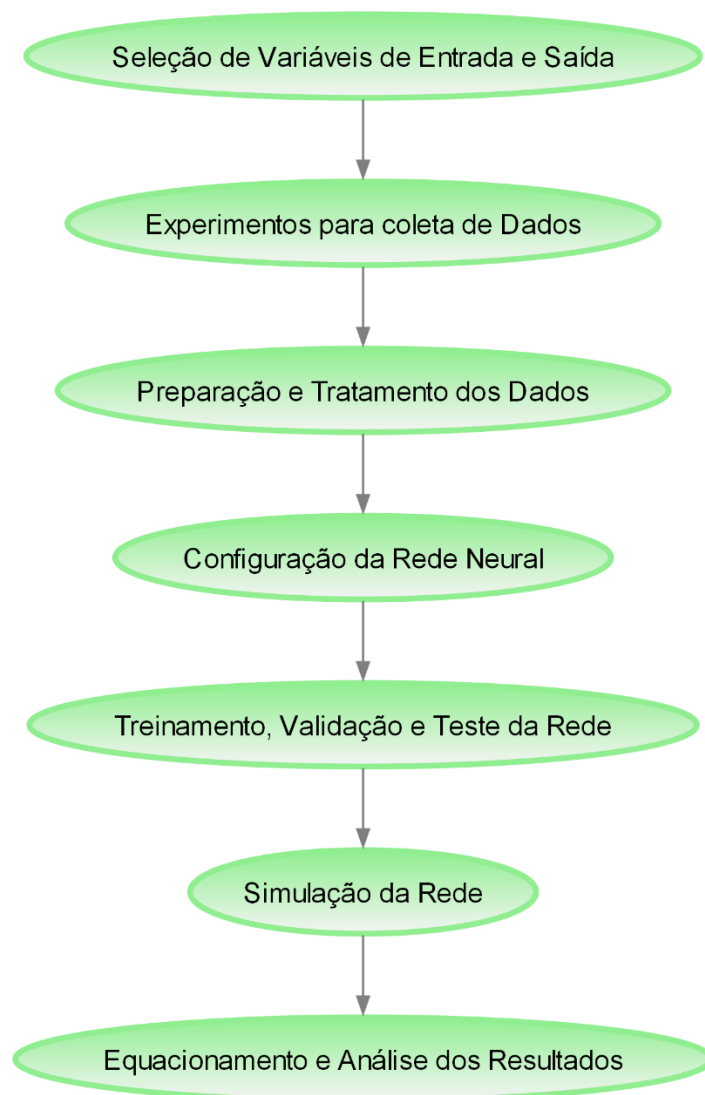


Figura 8 - Processo geral de obtenção de uma rede neural. Fonte: Autoria Própria.

4.1 FERMENTAÇÃO

O panorama geral dos métodos experimentais será fornecido e advém, de forma completa, do presente trabalho de iniciação científica de COSTA, B. S. G. em 2021.

Para a preparação do meio de cultivo, foi adotada uma formulação composta por mel, adquirido de produtores rurais na região de São Miguel Arcanjo – SP, que foi diluído em água mineral até atingir uma concentração de 30 °Brix. Adicionalmente, o meio foi enriquecido com 0,5% de extrato de levedura e 1% de peptona. Após a formulação, o meio de cultivo passou por um processo de pasteurização a 65 °C por um período de 30 minutos e, posteriormente, foi submetido a esterilização em autoclave por 20 minutos, garantindo a total assepsia do meio.

Antes da inoculação no fermentador, uma etapa crucial de preparação do inóculo foi executada. Essa etapa consistiu na hidratação do inóculo, para a qual 1,08 g de *Saccharomyces cerevisiae* da marca comercial Premier Blanc, da Fermentis, foram adicionados a 15 mL de água destilada. Em seguida, o inóculo foi mantido em uma estufa a 30 °C por um período de 30 minutos, assegurando sua adequada preparação.

A fermentação em si foi conduzida em um fermentador do modelo Labfors 5, fabricado pela Infors HT na Suíça, com a temperatura mantida constantemente a 25 °C. A agitação foi realizada com o auxílio de duas turbinas equipadas com pás planas, operando a 200 rpm, conforme descrito por Ferraz (2015). O volume total do meio de cultivo utilizado foi de 3,6 litros, proporcionando um ambiente propício para o desenvolvimento do processo fermentativo (COSTA, 2022).

4.2 OBTENÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS

Neste estudo, foram adotadas diversas técnicas para a determinação e análise de diferentes parâmetros relacionados à fermentação e composição de amostras. A concentração celular foi determinada utilizando a técnica gravimétrica. As amostras foram submetidas à centrifugação a uma velocidade de 4000 rpm durante 15 minutos, utilizando-se uma centrífuga modelo 5702 R da Eppendorf. O precipitado obtido após a centrifugação foi lavado em duas etapas consecutivas e, em seguida, seco em estufa a 70°C, conforme metodologia proposta por Andrade *et al.* (2013).

Para a quantificação da concentração de açúcares redutores, que compreendem a glicose e frutose, o sobrenadante das amostras foi analisado utilizando o método do 3,5 dinitrossalicílico (DNS), baseado no protocolo estabelecido por Miller (1959).

O monitoramento do pH durante o processo de fermentação foi realizado em tempo real, utilizando um sensor autoclavável adquirido a partir da empresa Mettler Toledo.

A análise da absorbância das amostras, que foram previamente diluídas em uma proporção de 1:15, foi conduzida em um espectrofotômetro modelo Genesys 10S da marca Thermo Scientific, com um comprimento de onda fixado em 600 nm. Adicionalmente, a quantificação de sólidos solúveis, que serve como uma predição da concentração de sacarose, ou °Brix, no sobrenadante, foi realizada utilizando um refratômetro digital modelo HI96801 da marca Hanna Instruments.

4.3 OBTENÇÃO E SIMULAÇÃO DAS RNAs

O desenvolvimento de Redes Neurais Artificiais (RNAs) é uma área de pesquisa em rápido crescimento, com aplicações significativas em diversos campos industriais e científicos. A metodologia empregada na construção e treinamento dessas redes é essencial para assegurar sua eficácia e precisão. Este estudo propõe uma abordagem metodológica para o desenvolvimento de RNAs, cobrindo etapas críticas desde a preparação dos dados até a avaliação dos resultados.

A fase inicial envolve a preparação e tratamento dos dados experimentais. É imperativo que os dados coletados sejam organizados, limpos e formatados corretamente para garantir sua relevância para análises subsequentes (GOODFELLOW *et al.*, 2016).

A seleção de variáveis de entrada e saída é a próxima etapa crítica. A escolha apropriada dessas variáveis é vital para a capacidade da RNA de aprender e prever as características essenciais do processo (GOODFELLOW *et al.*, 2016).

Definir parâmetros para avaliar a eficiência da rede é outra etapa crucial. Métricas como erro quadrático médio e coeficiente de determinação (R^2) são frequentemente usadas para essa finalidade (BISHOP, 2006).

A configuração das RNAs, incluindo a seleção do número de camadas, neurônios, algoritmo de otimização e funções de transferência, é fundamental para o desempenho da rede (LECUN *et al.*, 2015).

O treinamento, validação e teste das RNAs são etapas vitais. Durante o treinamento, a RNA ajusta seus pesos com base nos dados fornecidos. A validação ajusta parâmetros para evitar *overfitting*, enquanto os dados de teste avaliam a capacidade de generalização da rede (SCHMIDHUBER, 2015).

Após o treinamento, a RNA é testada e os resultados são avaliados para determinar sua precisão em prever as variáveis de interesse (HINTON *et al.*, 2012).

4.3.1 Tratamento dos dados experimentais

Para realizar a modelagem da fermentação, foram utilizados os dados experimentais disponíveis. No entanto, devido à limitação na quantidade de dados coletados, foi adotada uma estratégia comum em estudos envolvendo Redes Neurais Artificiais (RNAs), que consiste na geração de dados adicionais por meio de ajuste de equações suaves. Essa abordagem tem sido amplamente empregada (BECKER *et al.*, 2002; SILVA; FILETI, 2016) e foi aplicada com êxito em estudos recentes conduzidos pelo grupo CHOJI *et al.* (2021) e Irizawa, Martins e Veggi (2021).

Por meio desse procedimento, foram gerados 200 novos pontos, mantendo um intervalo de tempo constante. Isso resultou em uma base de dados expandida que melhorou significativamente o processo de treinamento da RNA. O período total de fermentação abrangeu um período de 73 horas, e os detalhes do espaçamento dos dados gerados podem ser encontrados na Tabela 1.

Tempo (horas)	Espaçamento (horas)
0	-
14	14
24	10
27	3
43	16
48	5
63	15
73	10
MÉDIA	10,4

Tabela 1 - Média e espaçamento dos tempos de fermentação. Fonte: Autoria Própria.

Essa estratégia de geração de dados adicionais foi fundamental para garantir que a RNA fosse devidamente treinada e pudesse aprender com maior precisão as complexas interações do processo de fermentação ao longo do tempo. Dessa forma, aumentou-se a robustez e a capacidade de generalização da RNA para prever com precisão as variáveis-chave da fermentação.

4.3.2 Seleção das variáveis de entrada e saída

A abordagem envolveu o desenvolvimento de uma única Rede Neural Artificial (RNA) capaz de prever simultaneamente três variáveis essenciais no processo de fermentação: X (concentração de células), S (concentração dos açúcares redutores) e P (concentração de produto) em g.L^{-1} . Para alcançar esse objetivo, foram selecionadas cuidadosamente as variáveis de entrada que seriam utilizadas na RNA, levando em consideração diversos aspectos cruciais para o sucesso da modelagem.

Na escolha das variáveis de entrada, foram considerados vários fatores importantes. O pH, por exemplo, foi incluído devido à sua relevância como uma variável crítica a ser monitorada, uma vez que baixos valores de pH podem inibir o crescimento de diversos microrganismos no processo. A densidade óptica (D.O.) foi outra variável de entrada escolhida, pois se relaciona com o crescimento microbiano, desempenhando um papel crucial na caracterização do processo. Além disso, também foi incorporada a concentração de sólidos solúveis ($^{\circ}\text{Brix}$), uma vez que a presença de altas concentrações de substrato pode resultar em efeitos indesejáveis, como a inibição por substrato e o aumento do tempo de fermentação.

Outro aspecto relevante na escolha dessas variáveis de entrada foi sua facilidade de medição, uma vez que é fundamental que as variáveis sejam práticas e acessíveis de se obter durante o processo de fermentação. A Figura 9 (a) oferece uma representação esquemática da RNA, com uma única camada intermediária (oculta), que gera as três variáveis de saída: concentração de células, açúcares redutores e produto. A Figura 9 (b) por outro lado, ilustra uma RNA com duas camadas intermediárias prevendo P, S e X.

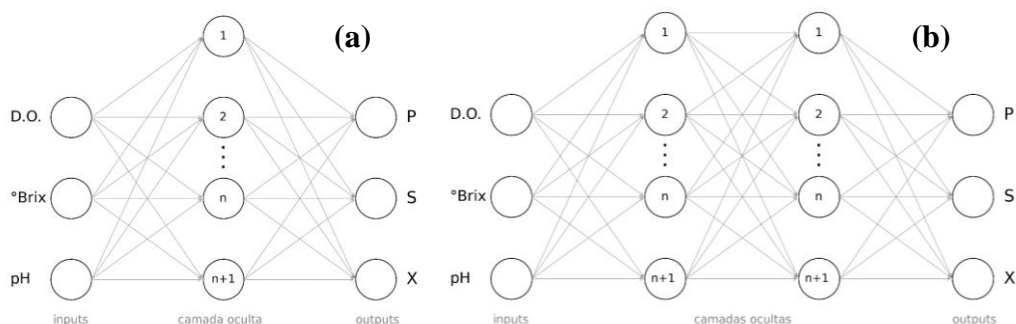


Figura 9 - Rede de uma e duas camadas intermediárias. Fonte: Autoria própria.

4.3.3 Definição dos parâmetros de eficiência da rede

Para avaliar a eficácia da rede neural, foram utilizados três parâmetros fundamentais: 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 para uma análise abrangente do desempenho da rede (SILVA, 2021).

A função objetivo escolhida foi a média da diferença quadrática entre os valores calculados pela RNA e os valores experimentais reais, conhecida como Mean Squared Error (MSE), conforme expresso na Equação 12:

$$F_{OBJ} = MSE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (h_{j,exp} - h_{j,rede})^2 \quad (12)$$

Nesta equação, n representa o número de pontos experimentais, $h_{j,rede}$ é o valor previsto pela RNA, e $h_{j,exp}$ é o valor real para o ponto experimental j . É crucial destacar que quanto mais próxima de zero for a função objetivo (F_{OBJ}), menor será a discrepância entre os dados experimentais e as previsões da RNA, indicando, em geral, um melhor desempenho da rede.

O erro médio percentual absoluto (MAPE) foi calculado com base na Equação 13 a seguir:

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{|h_{j,exp} - h_{j,rede}|}{h_{j,exp}} \cdot 100\% \quad (13)$$

O coeficiente de correlação de Pearson, por sua vez, é um parâmetro que avalia a intensidade e a direção da correlação entre duas variáveis, variando de -1,0 a 1,0 (SILVA, 2021). Dado o contexto fornecido, a equação para o coeficiente de correlação de Pearson (ρ) é:

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (14)$$

Onde: x_i é o valor da variável x para o ponto experimental i ; y_i é o valor previsto pela RNA (Rede Neural Artificial) para o ponto experimental i ; \bar{x} é a média aritmética dos valores de x ; \bar{y} é a média aritmética dos valores de y .

O numerador da fração representa a covariância entre x e y , enquanto o denominador é o produto dos desvios padrão de x e y . Quando o coeficiente de Pearson é calculado desta forma, ele fornece uma medida da força e direção da relação linear entre as duas variáveis.

Esses parâmetros fornecem uma visão abrangente da precisão da RNA, permitindo avaliar a concordância entre os resultados previstos e os dados experimentais reais. Quanto menor o

MSE e o MAPE, e quanto mais próximo de 1 for ρ , melhor o desempenho da rede neural no processo de modelagem e simulação (AWANG, 2018).

4.3.4 Configuração e detalhes do treinamento das RNAs

As fases de obtenção e simulação foram conduzidas no ambiente de desenvolvimento Mathworks Matlab® R2016b. Durante o processo, foram criadas e treinadas redes neurais artificiais (RNAs) com diferentes arquiteturas, incluindo aquelas com uma ou duas camadas intermediárias (também conhecidas como camadas ocultas). Além disso, variaram-se o número de neurônios em cada camada intermediária para avaliar o impacto dessas configurações na performance da RNA.

Para a otimização do treinamento das RNAs, foram explorados quatro algoritmos de otimização distintos: o Scaled Conjugate Gradient (*trainscg*), o Levenberg-Marquardt (*trainlm*) e o Levenberg-Marquardt com Regularização Bayesiana (*trainbr*), o Resilient Backpropagation (*trainrp*) e o Gradiente Conjugado com Reinicializações de Powell-Beale (*traincgb*). Cada um desses algoritmos possui características específicas que podem influenciar a convergência e a eficiência do treinamento.

No que diz respeito às funções de transferência utilizadas nas camadas intermediárias, foram testadas três opções: a função logaritmo-sigmoide (*logsig*), a tangente hiperbólica-sigmoide (*tansig*) e a linear (*purelin*). Essas funções desempenham um papel fundamental na modelagem das relações entre as camadas da RNA, e sua escolha pode afetar significativamente o desempenho da rede.

Para as camadas de saída das RNAs, as funções de ativação "*tansig*" e "*purelin*" foram avaliadas em configurações de uma única camada intermediária. Além disso, quando duas camadas intermediárias estavam presentes, a função "*logsig*" também foi adicionada como opção. Essas escolhas foram feitas com o intuito de analisar como as diferentes combinações de funções de ativação influenciariam a capacidade da RNA de representar e generalizar os dados de forma eficaz.

A Tabela 2 resume as diversas configurações testadas durante este estudo, abrangendo as variações nos algoritmos de treinamento, nas funções de transferência e na estrutura geral das RNAs. Essa análise abrangente permitiu uma avaliação abrangente do desempenho das RNAs em relação a diferentes parâmetros e configurações, proporcionando insights valiosos para a modelagem e simulação do processo em questão.

Camadas intermediárias	Algoritmos de otimização	Funções de ativação (intermediária)	Funções de ativação (saída)	Neurônios (camada 1)	Neurônios (camada 2)
1	trainscg, trainlm, traincgb, trainbr	tansig, purelin	tansig, purelin	5 - 35	-
2	trainscg, trainlm, trainrp, trainbr	tansig, logsig	tansig, logsig, purelin	5 - 35	5 - 30

Tabela 2 - configuração dos treinamentos gerais. Fonte: Autoria Própria.

Conforme apresentado na Tabela 2, optou-se por utilizar um número reduzido de neurônios na segunda camada intermediária das redes neurais. Essa decisão foi motivada pela intenção de evitar que as RNAs com duas camadas intermediárias se tornassem excessivamente complexas, com um número excessivo de parâmetros a serem ajustados. Limitou-se, portanto, o intervalo de neurônios nessa camada intermediária a uma faixa entre 5 e 30 unidades.

Essa abordagem foi adotada com o objetivo de mitigar possíveis impactos adversos no desempenho computacional e no tempo de resposta do processo de treinamento das redes. Evitar uma excessiva complexidade nas RNAs é fundamental para garantir que o treinamento seja eficiente e que a RNA seja capaz de aprender as relações entre as variáveis de entrada e saída de maneira adequada.

Dessa forma, ao equilibrar o número de neurônios nas camadas intermediárias, buscou-se encontrar um ponto ótimo que permitisse que as RNAs com duas camadas continuassem eficazes na modelagem do processo, ao mesmo tempo em que mantinham um desempenho computacional gerenciável e um tempo de resposta aceitável. Esse equilíbrio é essencial para garantir que as RNAs sejam uma ferramenta viável e eficiente na abordagem do problema em questão.

4.3.5 Obtenção da rede

É compreensível o conceito de “obtenção da rede” pela estruturação das seguintes etapas: treinamento, teste e por fim, a validação. Logo após o fornecimento dos 200 dados, foi aderida a escolha de reservar 150 dados para a obtenção da rede (aplicação nas três etapas) e os 50 dados remanescentes para a simulação da rede. No entanto, dos 150 pontos experimentais, a escolha de utilização foi distribuída em 70% de treinamento, 15% de teste e 15% de validação.

É fulcral salientar que, a distribuição percentual dos dados experimentais destinados ao treinamento, teste e validação, foi feita de maneira sortida pelo software Matlab®. Nesta fase, a rede é submetida a análise da influência de uma gama de fatores de predição regendo as variáveis de saída, tais como funções de ativação, quantidade de camadas ocultas, número geral de neurônios por camada, algoritmos de otimização.

4.3.6 Simulação da rede e análise dos resultados obtidos

A fase de simulação das redes neurais foi executada utilizando-se os 50 pontos experimentais restantes. Essa etapa desempenha um papel crucial na identificação do modelo mais apropriado para o processo em análise, além de evitar possíveis problemas de superajuste (overfitting). Durante essa simulação, novos conjuntos de dados foram introduzidos como variáveis de entrada, permitindo avaliar a capacidade de generalização da rede e, por conseguinte, determinar qual modelo efetivamente melhor descreveu o processo de fermentação para a produção de hidromel.

Após a obtenção dos resultados por meio do software Mathworks Matlab® R2016b, a seleção da melhor RNA baseou-se na análise do erro médio percentual absoluto (MAPE) e do coeficiente de correlação de Pearson obtidos na etapa de simulação. Em linhas gerais, a busca concentrava-se em identificar a estrutura que apresentasse o menor valor de MAPE e o maior coeficiente de correlação. Além desses critérios, também foi ponderado o número de parâmetros presentes na RNA.

Dessa forma, a escolha do modelo ótimo levou em consideração uma combinação de fatores, incluindo a capacidade de generalização da rede, precisão na predição dos resultados e a complexidade do modelo. Essa abordagem visa garantir que a RNA selecionada não apenas se adapte bem aos dados de treinamento, mas também seja capaz de generalizar efetivamente para novos conjuntos de dados, tornando-se uma ferramenta eficaz na modelagem do processo de produção de hidromel.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

No presente estudo, diversas estratégias foram meticulosamente avaliadas em relação ao desempenho de redes neurais artificiais. Para cada estratégia considerada, foram exploradas configurações com uma e duas camadas intermediárias. Durante essa avaliação, houve uma variação sistemática dos algoritmos de otimização, da quantidade de neurônios presentes em cada camada e das respectivas funções de ativação utilizadas. As variáveis de entrada selecionadas para este estudo foram o pH, °Brix e a densidade óptica (D.O.). O processo de treinamento foi realizado em um total de 2128 vezes, sendo distribuídos em 112 treinamentos para configurações com uma camada intermediária e 2016 com RNAs de duas camadas. Vale ressaltar que cada configuração de rede foi submetida a um treinamento repetido por cinco vezes, resultando em um total de 10.640 redes neurais artificiais treinadas.

Para um treinamento utilizando o algoritmo de Levenberg-Marquardt por exemplo, será posta uma configuração de trainlm, com funções de ativação da camada oculta com ‘tansig’ e saída ‘tansig’, repetindo esse padrão com 5, 10, 15, 20, 25, 30 e 35 neurônios. Depois começando novamente com ‘tansig-purelin’, ‘purelin-tansig’ e ‘purelin-purelin’ variando a quantidade de neurônios e alterando entre os quatro algoritmos de otimização.

5.1 DADOS EXPERIMENTAIS EMPREGADOS NA OBTENÇÃO DA REDE

Na Tabela 3, encontram-se os dados experimentais das variáveis que foram utilizadas na obtenção e simulação das RNAs. Pode-se observar que o teor final de açúcar obtido após 3 dias de fermentação foi em torno de 3 g/L, sendo obtido um hidromel caracterizado como seco (MAPA, 2012), o que resultou em uma conversão de 98,58 % dos açúcares redutores (glicose e frutose) inicial. Vale a pena observar que o tempo de fermentação neste trabalho foi inferior ao de 11 dias, considerado por Pereira (2017) como curto, devido ao uso de uma condição otimizada de fermentação. Os resultados de D.O. apresentados na Tabela 3 foram para amostras brutas, após diluição de 1:15.

tempo (horas)	°Brix	D.O (600 nm).	pH	Açúcares redutores (g/L)	células (g/L)	Produto (g/L)
0	25,5	0,162	4,07	211,580	0,268	0,000
14	22,8	0,480	3,68	176,517	2,360	20,835
24	18,1	0,656	3,61	109,915	4,308	51,554
27	16,7	0,706	3,65	93,652	4,483	61,085
43	11,3	0,822	3,78	23,474	6,863	99,295
48	10,4	0,794	3,79	11,325	7,013	103,690
63	9,8	0,781	3,91	3,052	6,587	109,115
73	9,9	0,780	3,93	3,010	6,433	110,034

Tabela 3 - Dados Experimentais para a Fermentação. Fonte: Autoria Própria.

5.2 ANÁLISE DAS REDES OBTIDAS E CLASSIFICAÇÃO GERAL

O objetivo primordial dessa abordagem era desenvolver uma única Rede Neural Artificial (RNA) capaz de efetuar previsões simultâneas para três variáveis críticas: X, S, e P. Para construir essa RNA abrangente, empregamos dados experimentais que englobavam informações vitais de pH, grau Brix (°Brix), D.O., além das concentrações X, S e P. Os resultados e conclusivos são apresentados na Tabela 4, que compila os dez conjuntos de parâmetros mais promissores para ambos os modelos, de uma camada intermediária e de duas camadas intermediárias.

A Tabela 4 proporciona uma visão abrangente dos resultados, incluindo os algoritmos de otimização empregados, as funções de objetivo utilizadas nas fases de treinamento, validação e teste, bem como o Erro Médio Percentual Absoluto (MAPE) para cada uma das variáveis, ou seja, X, S e P. As RNAs elencadas na Tabela 4 estão classificadas em ordem decrescente de acordo com a soma total do MAPE das variáveis X, S e P (Σ MAPE).

Esse enfoque meticuloso visou identificar a configuração de RNA que oferecesse o desempenho mais consistente e preciso na previsão das concentrações de células, açúcares redutores e produto, considerando todas as fases críticas do processo de treinamento e validação. Os resultados detalhados na tabela fornecem uma base sólida para a seleção da melhor RNA que pode ser empregada com confiança na modelagem e simulação do processo de fermentação para a produção de hidromel.

ID [0]	Estrutura [1]	Algoritmo de Otimização [2]	Funções de Ativação [3]	Treino F _{obj} [4]	Valid F _{obj} [5]	Teste F _{obj} [6]	Açúcares redutores (S)	Etanol (P)	Células (X)	Σ MAPE Simu. (%) [7]	NP [8]
							MAPE Simu. (%)	MAPE Simu. (%)	MAPE Simu. (%)		
1	3-20-5-3	trainbr	logsig-tansig-purelin	1,25E-08	2,01E-08	7,73E-09	2,04E-03	1,18E-03	1,53E-03	1,58E-03	203
2	3-30-25-3	trainbr	tansig-tansig-purelin	1,36E-08	8,66E-09	9,35E-09	1,39E-03	4,89E-04	2,98E-03	1,62E-03	973
3	3-25-20-3	trainbr	logsig-logsig-purelin	1,44E-08	1,40E-08	1,10E-08	1,76E-03	3,22E-03	1,22E-03	2,07E-03	683
4	3-15-10-3	trainlm	tansig-logsig-purelin	8,81E-09	1,00E-08	1,66E-08	1,31E-03	9,37E-04	4,43E-03	2,23E-03	253
5	3-35-10-3	trainbr	tansig-logsig-purelin	8,57E-09	1,46E-08	1,05E-08	1,68E-03	3,48E-03	1,94E-03	2,37E-03	533
6	3-20-3	trainbr	tansig-purelin	1,22E-08	2,92E-08	1,12E-08	2,42E-03	3,62E-03	1,80E-03	2,62E-03	143
7	3-30-3	trainbr	tansig-purelin	9,92E-09	1,47E-08	7,64E-09	1,79E-03	1,98E-03	4,68E-03	2,82E-03	213
8	3-15-3	trainbr	tansig-purelin	1,37E-08	6,68E-09	6,83E-09	2,30E-03	1,72E-03	7,35E-03	3,79E-03	108
9	3-25-3	trainbr	tansig-purelin	1,72E-08	1,52E-08	1,77E-08	1,48E-03	1,58E-02	1,12E-02	9,47E-03	178
10	3-10-3	trainbr	tansig-purelin	1,75E-08	1,04E-08	1,63E-08	2,14E-03	1,77E-02	9,86E-03	9,90E-03	73

Tabela 4 - Panorama geral de desempenho para as 10 melhores RNAs. Fonte: Autoria Própria.

Legenda:

[0] Código de identificação da RNA.

[1] Arquitetura da RNA: neurônios na camada de entrada - na camada intermediária 1 - na camada intermediária 2 - na camada de saída.

[2] Método de otimização empregado durante o treinamento da RNA.

[3] Função de ativação na camada intermediária 1 - na camada intermediária 2 - na camada de saída.

[4] Critério de desempenho durante a fase de treinamento.

[5] Critério de desempenho durante a etapa de validação.

[6] Critério de desempenho durante a etapa de teste.

[7] Somatório dos erros médios percentuais absolutos para X, S e P.

[8] Número de parâmetros para a rede - ilustra os pesos, por exemplo, na ID 8: (3*15 + 15*3) e depois a soma dos biases (15+3) = 108.

Nesta abordagem, considerando-se três variáveis de saída, foram avaliados o Erro Médio Percentual Absoluto (MAPE) e o Coeficiente de Correlação de Pearson (ρ) para cada variável. Os resultados para o Coeficiente destas métricas, embora omitido da Tabela 4, apresentou um valor uniforme de 1,0 para todas as variáveis. A fim de fornecer uma avaliação abrangente do desempenho das Redes Neurais Artificiais (RNAs), foi realizado o cálculo acumulado do erro para os três outputs, bem como o Número de Parâmetros (NP) associado a cada RNA. A Tabela 4 detalha os valores correspondentes a estas métricas.

A análise dos dados revela uma predominância de configurações com duas camadas ocultas. No entanto, para uma avaliação mais abrangente, as cinco melhores redes de uma camada foram combinadas com as cinco melhores de duas camadas. Estas foram posteriormente classificadas com base no menor erro acumulado (MAPE). É crucial destacar que a quantidade de camadas intermediárias não foi o único fator determinante para a excelência dos resultados. Embora as redes de duas camadas tenham apresentado um erro acumulado mais favorável, com 112 resultados na faixa de 0,0001 a 0,001% de erro, as redes de uma camada apresentaram apenas 6 resultados nessa mesma faixa.

Conforme antecipado, o algoritmo de otimização Levenberg-Marquardt com Regularização Bayesiana (trainbr) emergiu como o mais eficaz na predição simultânea das variáveis X, S e P, dada a propensão de overfitting nos conjuntos de dados. Notavelmente, uma RNA treinada com o método "trainlm" também exibiu resultados notáveis. A combinação de funções de ativação mais recorrente foi tansig-purelin para redes de uma camada e tansig-logsig-purelin para redes de duas camadas. Esta combinação demonstrou ser a mais eficiente para a estratégia em questão, reforçando a importância de experimentações extensivas com diferentes configurações de RNA.

Excetuando-se as duas últimas redes, que apresentaram valores de MAPE ligeiramente elevados para a concentração do produto, a maioria das redes exibiu erros comparativamente baixos, na magnitude de 10^{-3} . Com base no erro acumulado (Σ MAPE), todas as RNAs produziram resultados consistentemente satisfatórios.

Em uma análise preliminar, a RNA configurada como 3-20-5-3 – trainbr – logsig-tansig-purelin destacou-se por sua precisão na predição das variáveis X, S e P, tendo o menor erro acumulado (Σ MAPE). Esta análise objetivou identificar uma RNA capaz de prever as variáveis de saída com um erro global mínimo. No entanto, a seleção final também levou em consideração o Número de Parâmetros (NP) da RNA.

5.3 SELEÇÃO DA MELHOR REDE COM BASE NA ESTRATÉGIA ABORDADA

A determinação do número ideal de parâmetros (NP) em Redes Neurais Artificiais (RNAs) é um tópico amplamente debatido na literatura científica. O consenso é orientado para a configuração de uma rede com o mínimo de parâmetros, sem comprometer significativamente a precisão, conforme indicado pelo Σ MAPE. No contexto de monitoramento e controle de processos industriais, a otimização do número de parâmetros é de suma importância. Uma RNA com menos parâmetros não apenas garante uma eficiência computacional superior, mas também assegura uma resposta mais ágil, essencial para aplicações em tempo real.

Com base nesse entendimento, conduziu-se uma análise detalhada, levando em consideração o equilíbrio entre precisão e eficiência computacional.

Dado que as RNAs derivadas da estratégia proposta exibiram desempenhos notavelmente semelhantes, a seleção recaiu sobre a rede com o menor número de parâmetros. Assim, a RNA mais adequada para o monitoramento do processo de fermentação do hidromel foi identificada como tendo a estrutura 3-15-3 – trainbr – tansig-purelin, composta por 108 parâmetros. As Figuras 10, 11 e 12 ilustram os resultados da simulação dessa RNA, destacando sua capacidade exemplar de prever as concentrações de células (X), açúcares redutores (S) e produto (P) com base em variáveis facilmente mensuráveis, como pH, °Brix e Densidade Óptica (D.O.).

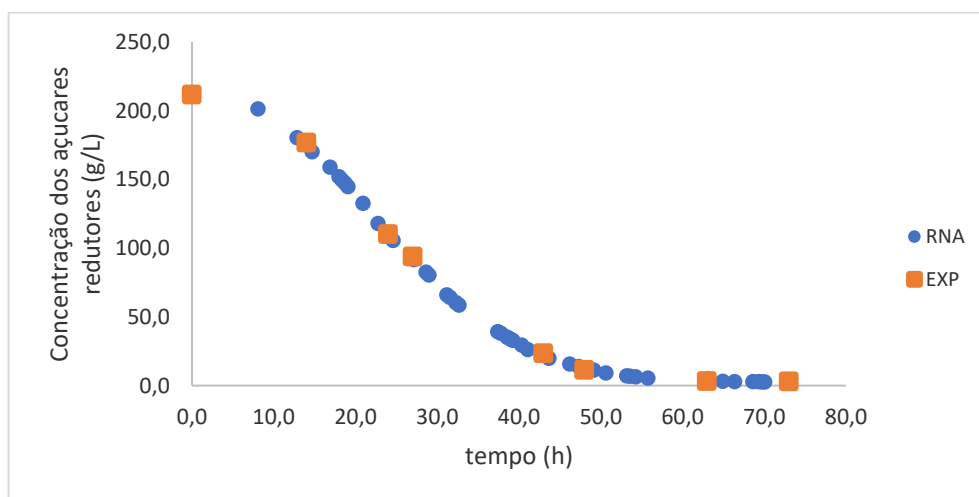


Figura 10 - Concentração de açúcares redutores em função do tempo: comparativo do ajuste dos dados simulados em relação com os experimentais. Fonte: Autoria própria.

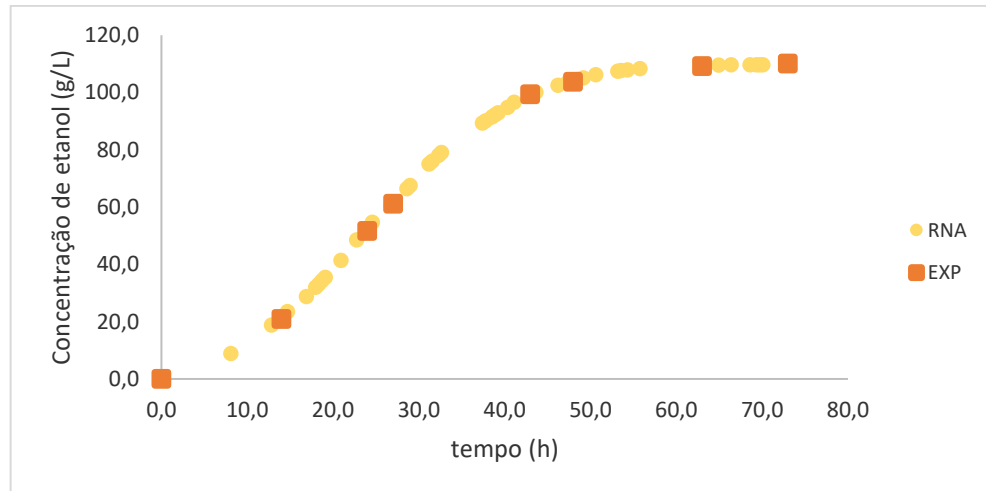


Figura 11 - Concentração de produto (etanol) em função do tempo: comparativo do ajuste dos dados simulados em relação com os experimentais. Fonte: Autoria própria.

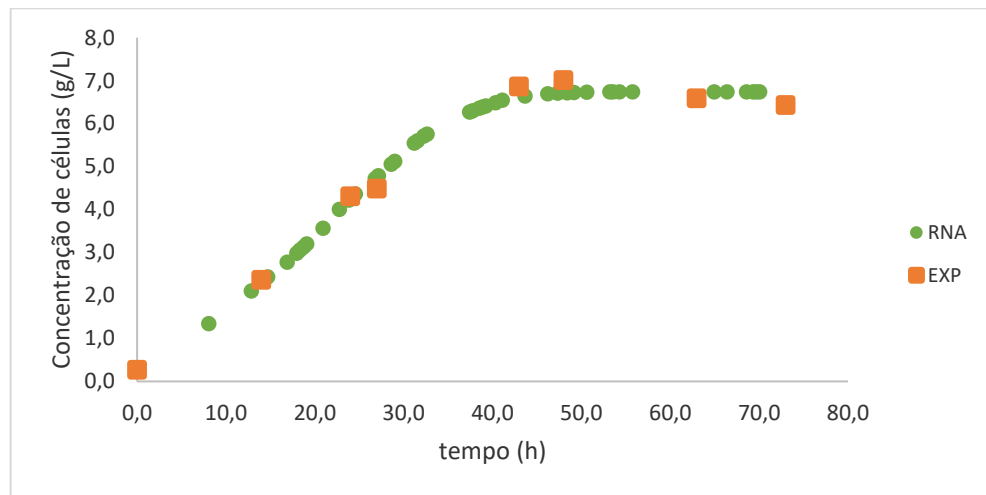


Figura 12 - Concentração de células em função do tempo: comparativo do ajuste dos dados simulados em relação com os experimentais. Fonte: Autoria própria.

A rede 3-15-3 escolhida, apresenta 55 graus de liberdade com 108 parâmetros, considerando um conjunto de dados composto por 150 amostras, tem-se implicações estatísticas relevantes. Os graus de liberdade representam a quantidade de parâmetros ajustáveis em um modelo, enquanto os parâmetros são os elementos que o modelo pode modificar durante o treinamento para se ajustar aos dados. Nesse contexto, a relação entre o número de graus de liberdade, parâmetros e dados é essencial para a interpretação estatística do modelo (LI; ZHOU; GRETTON, 2021).

A recomendação de que o número de dados disponíveis seja superior ao número de parâmetros em um modelo desempenha um papel crucial na análise estatística e modelagem. Essa diretriz busca garantir uma estimativa confiável dos parâmetros do modelo, ao mesmo tempo em que minimiza o risco de sobreajuste, onde o modelo se ajusta excessivamente aos

dados de treinamento, comprometendo sua capacidade de generalização para novos dados. No contexto deste estudo, em que uma rede neural é configurada com 150 dados e 108 parâmetros (55 graus de liberdade), observamos a conformidade com essa orientação, o que sugere uma base sólida para as estimativas dos parâmetros do modelo. É importante destacar que essa relação entre dados e parâmetros não é uma regra inflexível e pode variar dependendo da complexidade do problema, exigindo uma avaliação cuidadosa para garantir a adequação do modelo aos objetivos da análise (LI; ZHOU; GRETTON, 2021).

Na discussão dos resultados apresentados nas figuras 10, 11 e 12, é evidente a eficácia da Rede Neural Artificial (RNA) na simulação das concentrações dos açúcares redutores, produto e células. A figura 11, que representa a concentração dos açúcares redutores, mostra um ajuste quase perfeito entre os valores simulados pela RNA e os experimentais, corroborado por um MAPE de apenas $2,30 \cdot 10^{-3} \%$. Similarmente, a figura 11, referente à concentração do produto, também exibe uma concordância notável, com um MAPE de $1,72 \cdot 10^{-3} \%$. A figura 12, que ilustra a concentração de células, apesar de apresentar o MAPE mais elevado entre as três variáveis, ainda assim demonstra uma precisão impressionante, com um erro de apenas $7,35 \cdot 10^{-3} \%$.

O coeficiente de correlação de Pearson (ρ) próximo de um reforça a acurácia da RNA na simulação dessas variáveis. Esse alto grau de correlação sugere que a RNA foi capaz de capturar a dinâmica subjacente do sistema biológico em estudo, resultando em previsões altamente confiáveis. O erro médio percentual absoluto combinado (Σ MAPE) de $3,79 \cdot 10^{-3} \%$ para as três variáveis reitera a robustez do modelo proposto.

A estratégia adotada por Silva (2021) para obter uma Rede Neural Artificial (RNA) com estrutura 3-12-2 difere significativamente da abordagem do presente trabalho, que resultou em uma RNA 3-15-3. A principal distinção entre as duas estratégias reside no objetivo de previsão das redes. Enquanto a RNA de Silva focou exclusivamente na previsão das variáveis X e S, a RNA do presente estudo foi desenvolvida para prever simultaneamente X, S e P.

No estudo de Silva (2021), a RNA escolhida, com estrutura 3-12-2, apresentou um desempenho notável na previsão da concentração de células (X) e substrato (S), com um erro médio percentual absoluto combinado (Σ MAPE) de apenas $1,37 \times 10^{-4} \%$ e um coeficiente de correlação de Pearson (ρ) próximo de 1. Esta alta capacidade de previsão foi atribuída à estrutura da RNA e à seleção de variáveis mais simples de serem medidas, como pH, °Brix e D.O.

Por outro lado, no presente trabalho, a RNA 3-15-3 demonstrou uma precisão notável na previsão das três variáveis. A concordância entre os valores simulados pela RNA e os valores

experimentais foi quase perfeita para a concentração dos açúcares redutores e do produto, com MAPEs de $2,30 \cdot 10^{-3} \%$ e $1,72 \cdot 10^{-3} \%$, respectivamente. No entanto, a previsão da concentração de células apresentou um MAPE ligeiramente mais elevado, de $7,35 \cdot 10^{-3} \%$, ainda assim indicando uma precisão impressionante.

É importante considerar que o emprego do extrato de jabuticaba no presente estudo pode ter influenciado o erro observado, que se mostrou ligeiramente maior em comparação ao estudo de Silva. Além disso, enquanto Silva (2021) identificou o algoritmo de otimização de Levenberg-Marquardt como o mais eficaz para sua RNA, o presente trabalho encontrou os melhores resultados com o algoritmo de regulação bayesiana.

Em resumo, ambas as estratégias, embora distintas em seus objetivos e abordagens, demonstraram eficácia na modelagem e previsão de processos fermentativos. No entanto, a escolha de variáveis, a estrutura da RNA e os algoritmos de otimização adotados podem influenciar significativamente o desempenho e a precisão das previsões.

Na análise da Figura 13, observa-se uma notável concordância entre os valores experimentais de concentração dos açúcares redutores e aqueles obtidos pela Rede Neural Artificial (RNA) com arquitetura 3-15-3, especificamente a de identificação 08. Esta figura destaca a precisão e a acurácia do modelo de RNA em simular e prever a concentração dos açúcares redutores em comparação com os dados experimentais.

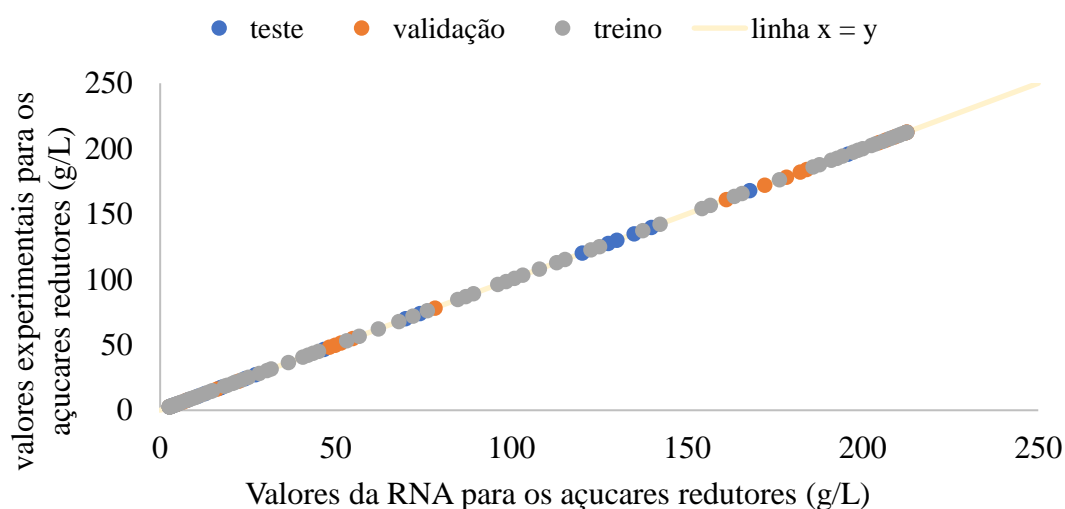


Figura 13 - Ajuste dos dados simulados da RNA para os açúcares redutores em relação com seus respectivos dados experimentais. Fonte: Autoria própria.

Quando se observa o gráfico de dispersão, onde o eixo X representa as concentrações previstas pela RNA e o eixo Y as concentrações experimentais, é evidente que os pontos

referentes aos conjuntos de teste, validação e treino se alinham quase perfeitamente à curva $y = x$. Esta linha representa uma correspondência ideal entre os valores previstos e os observados, indicando que o modelo de RNA tem uma capacidade excepcional de replicar os dados experimentais.

A proximidade dos pontos de teste, validação e treino à linha $y = x$ sugere que o modelo de RNA foi bem treinado e validado, minimizando o erro entre as previsões e os valores reais. Esta concordância reforça a robustez e a confiabilidade do modelo, demonstrando sua capacidade de generalizar bem para novos dados, além de replicar com precisão os dados nos quais foi treinado.

Em um contexto geral, analisando também o mesmo comportamento gráfico na Figura 14 (a) e (b) da qual representam as concentrações de produto (P) e células (X), respectivamente, infere que, a capacidade do modelo de RNA em se ajustar tão estreitamente aos dados experimentais foi de grande sucesso. Isso não apenas valida a abordagem adotada na modelagem e treinamento da rede, mas também sugere que a RNA pode ser uma ferramenta valiosa para a previsão e otimização de processos relacionados à concentração dos açúcares redutores em estudos futuros.

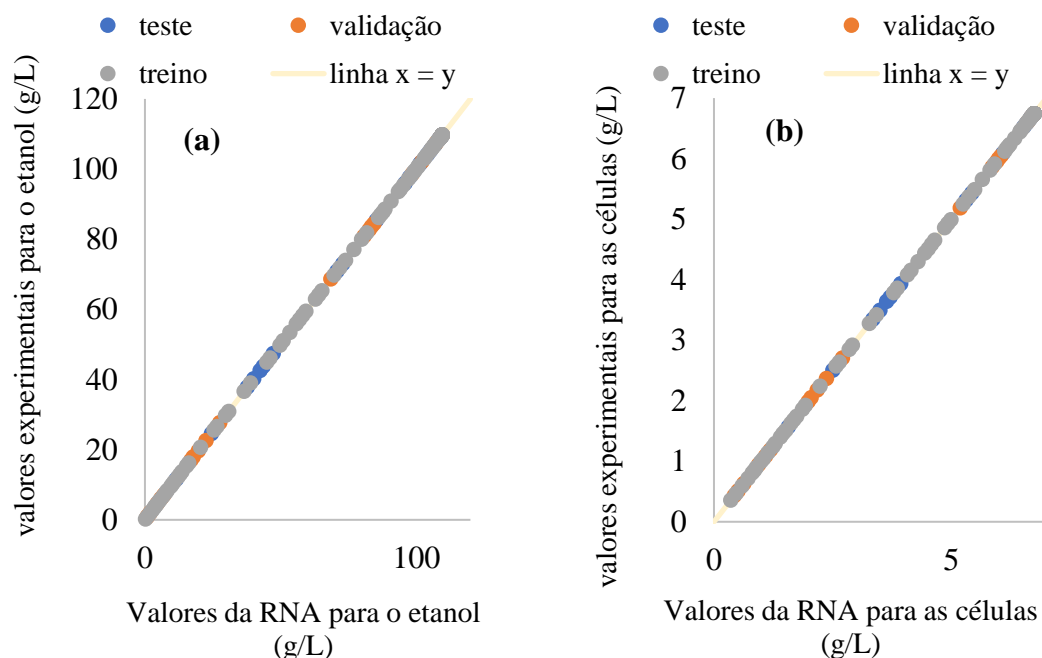


Figura 14 - Ajuste dos dados simulados da RNA para o produto e células em relação com os respectivos dados experimentais. Fonte: Autoria própria.

A consistência observada entre os valores experimentais e os previstos pela RNA reforça a aplicabilidade prática deste modelo em ambientes industriais e de pesquisa, onde decisões baseadas em previsões precisas são cruciais para a eficiência e eficácia do processo.

Conforme elucidado por Martins (2018), uma RNA pode ser conceituada como uma equação matemática complexa e não linear, composta por uma multiplicidade de parâmetros, incluindo os pesos e os biases associados a cada neurônio artificial. Durante a fase de treinamento, esses parâmetros são meticulosamente ajustados. A representação matemática para a variável de saída de uma RNA que possui uma única camada intermediária é delineada pela Equação (15).

$$y_n = f \left(\sum_{j=1}^W w_{jk} g \left(\sum_{i=1}^Z w_{ij} x_i + b_j \right) + b_k \right)_n \quad (15)$$

Nesta equação, n denota o número total de saídas, y_n representa a saída específica da RNA, f é a função de ativação da camada de saída, W é a contagem de neurônios na camada intermediária, g é a função de ativação pertinente à camada intermediária, e Z é o conjunto de entradas. Os termos b_j e b_k referem-se aos biases, enquanto w_{ij} e w_{jk} são os pesos sinápticos das camadas intermediária e de saída, respectivamente. Com base nessa formulação, a RNA ótima para monitorar o processo de fermentação do hidromel é descrita pela Equação (16).

$$y_n = purelin \left(\sum_{j=1}^{15} w_{jk} tansig \left(\sum_{i=1}^3 w_{ij} x_i + b_j \right) + b_k \right)_n \quad (16)$$

No entanto, é imperativo ressaltar que, devido à extensiva quantidade de dados e à necessidade de precisão decimal exigida pelo software Matlab®, este estudo não detalha os pesos e biases da RNA. Para informações adicionais ou detalhes específicos, os interessados são encorajados a entrar em contato diretamente com o orientador através do e-mail: tdmartins@unifesp.br.

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

6.1 CONCLUSÕES

Neste estudo, foi concebido um sensor virtual fundamentado em Redes Neurais Artificiais (RNAs) com o propósito de prever, de maneira precisa, as concentrações de células (X), açúcares redutores (S) e do produto final (P) ao longo do processo fermentativo na produção de hidromel. A pesquisa também se dedicou a discernir os algoritmos de treinamento mais eficazes e as funções de ativação mais propícias para tal aplicação. Estes insights são cruciais para orientar investigações subsequentes no domínio da produção de hidromel, bem como para ampliar o escopo da aplicação de técnicas de aprendizado de máquina e inteligência artificial na indústria.

Os resultados obtidos, em termos de eficiência, demonstraram consistência entre as duas estratégias adotadas. Dada essa congruência, a rede identificada como ID 08 (detalhada na Tabela X) emergiu como a mais propícia, sugerindo a viabilidade de empregar uma RNA singular para a previsão simultânea de X, S e P.

Na abordagem que contemplou duas camadas intermediárias, foram geradas 10.080 RNAs, com cada rede encarregada de prever as três variáveis em simultâneo. Notavelmente, a RNA 3-20-5-3 – trainbr – logsig-tansig-purelin alcançou previsões para as concentrações de células (X), dos açúcares redutores (S) e produto (P) com MAPEs de 1,53E-03, 2,04E-03 e 1,18E-03%, respectivamente. Esta RNA apresentou um coeficiente de correlação de Pearson (ρ) de 1,0, composta por um total de 203 parâmetros.

Por outro lado, a estratégia que envolveu uma única camada intermediária também culminou na geração de uma RNA distinta para a previsão de X, S e P. Dada a similaridade no desempenho entre as RNAs, a seleção da rede mais apropriada foi pautada no critério do menor número de parâmetros (NP). Sob essa ótica, a RNA ideal para o monitoramento da fermentação de hidromel foi identificada como 3-15-3 – trainbr – tansig-purelin, compreendendo 108 parâmetros, o que representa uma complexidade 53,2% inferior em relação à rede mais proeminente entre as 10 melhores.

A Figura 15 ilustra o arranjo de como seria a estrutura da rede selecionada.

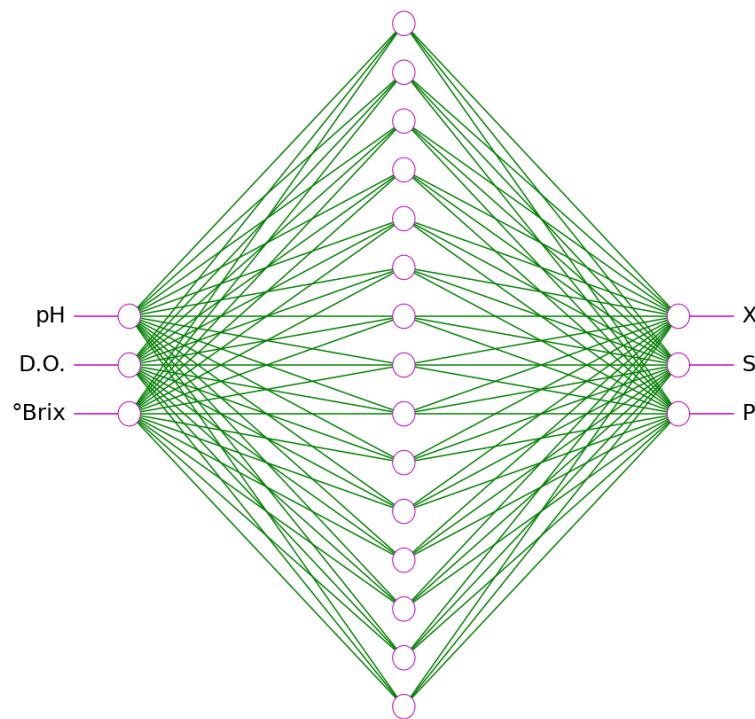


Figura 15 - Rede neural obtida de configuração 3-15-3. Fonte: Autoria Própria.

Para esta RNA específica, o Σ MAPE registrou 3,79E-03, e o ρ aproximou-se de 1,0, com uma variação ínfima na nona casa decimal para o produto (P). Adicionalmente, esta RNA demonstrou competência na previsão das concentrações com erros mínimos, registrando MAPEs de 7,35E-03, 2,30E-03 e 1,72E-03 para X, S e P, respectivamente.

Ao avaliar o desempenho dos algoritmos de otimização, os mais destacados, em ordem decrescente, foram: “trainbr”, “trainlm”, “trainrp”, “trainscg” e “traincgb”. A seleção de funções de ativação variou conforme a estratégia adotada, sublinhando a relevância de explorar distintas combinações para alcançar resultados ótimos. Em uma análise global, observou-se que a função tangente hiperbólica (“tansig”) mostrou-se mais apropriada para as camadas intermediárias, enquanto a função linear (“purelin”) foi predominante para a camada de saída, refletindo sua recorrência nos resultados mais promissores de ambas as estratégias.

A eficiência dos algoritmos de otimização em redes neurais é um tópico de pesquisa contínuo. A seleção do algoritmo de otimização mais adequado para um modelo de Rede Neural é uma das etapas mais críticas no campo do Aprendizado Profundo e em todas as classes de Redes Neurais. A escolha do algoritmo pode influenciar significativamente a precisão, eficiência e desempenho da rede. Em um estudo realizado por Fatima (2020), foi feita uma análise comparativa de vários algoritmos de otimização populares, incluindo “trainbr”, “trainlm”, “trainrp”, “trainscg” e “traincgb”, em diferentes conjuntos de dados. O estudo

concluiu que a escolha do otimizador pode ter um impacto significativo no desempenho da rede neural profunda (FATIMA, 2020).

Em relação à seleção de funções de ativação, a função tangente hiperbólica ("tansig") e a função linear ("purelin") têm sido amplamente utilizadas em diversas aplicações. A função "tansig" é frequentemente preferida para camadas intermediárias devido à sua capacidade de capturar não linearidades e proporcionar uma melhor propagação do gradiente (INOUE *et al.*, 2022). Por outro lado, a função "purelin" é comumente usada na camada de saída, especialmente em problemas de regressão, pois permite que a rede produza uma gama mais ampla de valores de saída. A combinação dessas funções de ativação tem mostrado resultados promissores em várias estratégias, conforme observado em estudos recentes (NGUYEN *et al.*, 2022).

É essencial que os pesquisadores continuem explorando diferentes combinações de algoritmos de otimização e funções de ativação para determinar as melhores configurações para suas aplicações específicas.

6.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A partir dos resultados e conclusões obtidos neste estudo, percebe-se a relevância de expandir a pesquisa no campo das Redes Neurais Artificiais (RNAs) aplicadas ao monitoramento da fermentação na produção de hidromel. Uma direção promissora seria a ampliação da base de dados, incorporando mais ciclos fermentativos e diferentes condições operacionais, o que permitiria uma avaliação mais robusta da capacidade preditiva da rede em cenários diversificados.

Embora os algoritmos "trainbr", "trainlm", "trainrp", "trainscg" e "traincgb" tenham se destacado (FATIMA, 2020), a exploração de outros algoritmos de otimização poderia revelar abordagens potencialmente mais eficientes. Por exemplo, "trainoss" refere-se a um algoritmo de otimização baseado em busca global, que pode ser eficaz em evitar mínimos locais (YI SHANG, WAH, 1996). Já "trainbfg" é uma variação do método Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno, um algoritmo quase-Newton que pode oferecer convergência mais rápida em certos cenários (BROYDEN, 1967).

No que diz respeito às funções de ativação, enquanto a função "tansig" e "purelin" mostraram eficácia nas camadas intermediárias e de saída, respectivamente (INOUE *et al.*, 2022), funções como "logsig" e "softmax" poderiam oferecer nuances distintas. A função "logsig" é uma função sigmoide logística, frequentemente usada em problemas de classificação binária, enquanto "softmax" é adequada para problemas de classificação multiclasse,

convertendo a saída da rede em uma distribuição de probabilidade (GOODFELLOW *et al.*, 2016).

A eficácia da RNA no monitoramento da fermentação de hidromel sugere seu potencial aplicabilidade em outros processos fermentativos. Assim, estudos futuros poderiam explorar a utilização da RNA em fermentações de cerveja, vinho, entre outros produtos. A integração desta RNA a sistemas de controle avançado também se mostra como um caminho interessante, permitindo ajustes em tempo real no processo fermentativo com base nas previsões da rede.

Além disso, considerando a evolução contínua no campo da inteligência artificial, a exploração de técnicas mais avançadas de aprendizado profundo, como redes neurais convolucionais ou redes recorrentes, poderia trazer insights adicionais. Por fim, avaliar a aplicabilidade e eficácia da RNA em um ambiente industrial, com suas condições dinâmicas, certamente enriqueceria o campo de estudo, abrindo portas para aplicações práticas em larga escala.

7 PRODUÇÃO CIENTÍFICA

O estudo desenvolvido neste trabalho irá gerar um artigo, o qual será submetido a uma revista científica nacional.

GOMES NETO, O.; ANDRADE, R.R.; MARTINS, T.D. **Rede neural artificial para predição de perfis de concentração na fermentação de mel com adição de extrato de casca de jabuticaba**, 2023.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AMGARTEN, E. L. **Estudo Da Viabilidade de Uso de Redes Neurais Artificiais Para a Predição Do Rendimento Da Fermentação Alcoólica**. Repositório Institucional UP Campus sede – Ecoville Dissertação, Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia Industrial, 2012. [Link para a Dissertação.](#)↵
- AMORIM, T. S.; LOPES, S. B.; BISPO, J. A. C.; BONAFE, C. F. S.; CARVALHO, G. B. M. de; MARTÍNEZ, E. A. **Influence of acerola pulp concentration on mead production by *Saccharomyces cerevisiae***. LWT, v. 97, p. 561-569, ISSN 0023-6438, 2018. [Link para o Artigo.](#)↵
- ANDRADE, R. R; COSTA. A. **Modelagem cinética do processo de produção de etanol a partir de hidrolisado enzimático de bagaço de cana-de-açúcar concentrado com melaço considerando reciclo de células**. 262 p. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP, 2012. [Link para a Dissertação.](#)↵
- 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, v.130, p. 351-359, 2013. [Link para o Artigo.](#)↵
- ANDRADE, R. R.; MARTINS, T.D.; SILVA, R.M.R. **Sensor virtual neural para monitoramento da fermentação de hidromel**. Revista de Engenharia e Tecnologia, v. 14, n. 1, 2021. [Link para o Artigo.](#)↵
- ARCHILIA, M. D.; NETO, A. A. L.; MARCUCCI, M. C.; ALONSO, R. C. B.; CAMARGO, T. C.; CAMARGO, R. C.; SAWAYA, A. C. H. F. **Characterization of Brazilian monofloral and polyfloral honey by UHPLC-MS and classic physical-chemical analyses**. Journal of Apicultural Research, v. 62, n. 3, p. 578-589, 2023. [Link para o artigo.](#)↵
- AWANG, M. K.; ISMAIL, M.; MAKHTAR, M.; RAHMAN, M. A.; MAMAT, A. R. **Performance Comparison of Neural Network Training Algorithms for Modeling Customer Churn Prediction**. International Journal of Engineering & Technology, v. 7, n. 2.15, p. 35-37, 2018. [Link para o Artigo.](#)↵
- BISHOP, C. M. **Pattern Recognition and Machine Learning**. Springer New York, NY, Ed. 1, 2006. [Link para o Livro.](#)↵
- BEALE, E. M. L. **A derivation of conjugate gradients In Numerical Methods for Non-linear Optimization**. Academic Press. p. 39-43, 1972.
- BRAGA, A. P.; LUDERMIR, T. B.; CARVALHO, A. P. L. F. **Redes neurais artificiais: teoria e aplicações**. Rio de Janeiro: LTC. 2 Ed. [Link para o Livro.](#)↵
- BRITO, A. F. S. **Análise cinética e estudos dos parâmetros fermentativos para a produção de hidromel**. 67f. (Trabalho de Conclusão de Curso - Monografia), Curso de Engenharia de

Biotecnologia e Bioprocessos, Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido, Universidade Federal de Campina Grande, Sumé - PA, Brasil, 2015. [Link para a Dissertação.](#)↵

- BROYDEN, C. G. **Quasi-Newton Methods and Their Application to Function Minimisation**. Mathematics of Computation. Comp. 21, p. 368-381, 1967. [Link para o artigo.](#)↵

- BRUNELLI, L. T. **Caracterização físico-química, energética e sensorial de hidromel**. 85f. Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências Agrônômicas de Botucatu, 2015. [Link para a Dissertação.](#)↵

- BURNS, J.; MULLEN, W.; LANDRAULT, N.; TEISSEDRE, P. L.; LEAN, M. E. J.; CROZIER, A. **Variations in the profile and content of anthocyanins in wines made from Cabernet sauvignon and hybrid grapes**. Journal of Agriculture and Food Chemistry, v. 50, n. 14, p. 4096–4102, 2002. [Link para o Artigo.](#)↵

- BUSSE-VALVERDE, N.; GÓMEZ-PLAZA, E.; LÓPEZ-ROC, J. M.; GIL-MUNOZ, R.; BAUTISTA-ORTIN, A. B. **The extraction of anthocyanins and proanthocyanidins from grapes to wine during fermentative maceration is affected by the enological technique**. Journal of Agriculture and Food Chemistry, v. 59, n. 10, p. 5450–5455, 2011. [Link para o Artigo.](#)↵

- CARNEIRO JÚNIOR, J. B. A.; SILVA, M. C.; NAGAYAMA, R. R.; VONA, T. S. P. **Aplicação de redes neurais artificiais na análise financeira das empresas do setor de petróleo**. Revista Brasileira de Administração Científica, v.13 n.2, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵

- CHOJI, T. T.; OTTAIANO, G. Y.; SEOLATTO, A. A.; SILVA, E. A.; MARTINS, T. D. **Cinética da biossorção da mistura Ni²⁺-Cr³⁺ via redes neurais artificiais**. REVISTA DE ENGENHARIA E TECNOLOGIA, v. 13, p. 200-210, 2021. [Link para o Artigo.](#)↵

- COSTA, J. S.; SILVA, G. M. A.; SCÁRDUA, L. A. **Uso de Redes Neurais Artificiais para classificação de propostas dependentes e independentes em licitações no ramo de óleo e gás**. Peer Review, v. 5, n. 7, p. 38–57, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵

- COSTA, B. S. G. **Produção de Hidromel com adição de casca de jabuticaba: Influência dos parâmetros fermentativos, qualidade da bebida e concentração de antocianinas**. 2022. 59 f. Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado em Química) - Instituto de Ciências Ambientais, Química e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, 2022. [Link para a Dissertação.](#)↵

- DAL'BOIT, S. **Predição do equilíbrio líquido-vapor através de redes neurais artificiais**. 70f. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP, 2008. [Link para o Artigo.](#)↵

- DAYHOFF, J.; DELEO, J. **Artificial neural networks. Conference on Prognostic Factors and Staging in Cancer Management: Contributions of Artificial Neural Networks and Other Statistical Methods Supplement to Cancer**. American Cancer Society, v. 3, n. 3, p. 1615-1635, 2001. [Link para o Artigo.](#)↵

- DE QUEIROZ, J. C. F.; DE FARIAS RAMOS, D.; ALVES, A. S. S.; RODRIGUES, J. S. L.; DE LIMA SOUZA, J. W. **Produção de Hidromel de Forma Artesanal e Avaliação dos**

Parâmetros durante o Processo Fermentativo. Revista Saúde Ciência Online. v. 3, n. 3, p. 321-328, 2014. [Link para o Artigo.](#)↵

- DUFOUR, C.; SAUVAITRE, I. **Interactions between anthocyanins and aroma substances in a model system. Effect on the flavor of grape-derived beverages.** Journal of Agriculture and Food Chemistry, v. 48, p. 1784–1788, 2000. [Link para o Artigo.](#)↵

- FATIMA, N. **Enhancing Performance of a Deep Neural Network: A Comparative Analysis of Optimization Algorithms.** ADCAIJ: Advances in Distributed Computing and Artificial Intelligence Journal, 9(2), p. 79–90, 2020. [Link para o artigo.](#)↵

- FERRAZ, F. D. O. **Estudo dos parâmetros fermentativos, características físico-químicas e sensoriais de hidromel.** 129 f. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena, 2015. [Link para a Dissertação.](#)↵

- FLECK, L.; TAVARES, M. H. F.; EYNG, E.; HELMANN, A.; ANDRADE, M. **Redes neurais artificiais: princípios básicos.** Revista Eletrônica Científica Inovação e Tecnologia, v. 1, n. 13, p. 47-57, 2016. [Link para o Artigo.](#)↵

- FREITAS, V. De; MATEUS, N. **Formation of pyranoanthocyanins in red wines: a new and diverse class of anthocyanin derivatives.** Analytical and Bioanalytical Chemistry, v.401, p.1463-1473, 2011. [Link para o Artigo.](#)↵

- FU, Y.; SHI, X.; LI, F.; YAN, X.; LI, B.; LUO, Y.; JIANG, G.; LIU, X.; WANG, L. **Fermentation of mead using *Saccharomyces cerevisiae* and *Lactobacillus paracasei*: Strain growth, aroma components and antioxidant capacity.** Food Bioscience, v. 52, p. 102402, 2023. ISSN 2212-4292. [Link para o Artigo.](#)↵

- GOMES, T. M. C., **Produção de Hidromel: efeito das condições de fermentação.** Instituto Politécnico de Bragança, Escola Superior Agrária. Dissertação de Mestrado em Biotecnologia, 2010. [Link para o Artigo.](#)↵

- GOMES NETO, O. **Project 1: Neural virtual sensor for monitoring the fermentation of mead with jabuticaba extrat.** GitHub [linguagem em Python, Desenvolvido no Software Spyder], 2023. [Link para o Projeto.](#)↵

- GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. **Deep Learning.** MIT Press. Nature, v.521, n.7553, p.436-444, 2015. [Link para o artigo.](#)↵

- GUPTA, J. K.; SHARMA, R. **Production technology and quality characteristics of mead and fruit-honey wines: A review.** Natural Product Radiance, New Delhi, v.8, p.345-355, 2009. [Link para o Artigo.](#)↵

- GURIAN, G. F. **Bebidas fermentadas brasileiras: considerações histórico-semânticas sobre aluás.** Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi. Ciências Humanas, Vol. 18, no. 2, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵

- HAGAN, M. T., & MENHAJ, M. B. (1994). **Training feedforward networks with the Marquardt algorithm.** IEEE transactions on Neural Networks, v.5, n.6, p.989-993. [Link para o artigo.](#)↵

- HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. **The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction**. 2nd ed. New York: Springer, 2009. [Link para o Livro.](#)↵
- HAYKIN, S. **Redes Neurais: princípios e prática**. Trad. Paulo Martins Engel. 2.ed. Porto Alegre: Bookman, 2000. Consultado em biblioteca em: 14 set. 2023.
- HE, F.; LIANG, N. N.; MU, L.; PAN, Q. H.; WANG, J.; REEVERS, M. J.; DUAN, C. Q. **Anthocyanins and their variation in red wines I. Monomeric anthocyanins and their color expression**. *Molecules*, v. 17, n. 2 p. 1571-1601, 2012. [Link para o Artigo.](#)↵
- HE, F.; LIANG, N. N.; MU, L.; PAN, Q. H.; WANG, J.; REEVERS, M. J.; DUAN, C. Q. **Anthocyanins and their variation in red wines II. Anthocyanin derived pigments and Their color evolution**. *Molecules*, v. 17, n. 12, p. 1483-1519, 2012(b). [Link para o Artigo.](#)↵
- HINTON, G.E.; SRIVASTAVA, N.; KRIZHEVSKY, A.; SUTSKEVER, I.; SALAKHUTDINOV, R.R. **Improving neural networks by preventing co-adaptation of feature detectors**. *Journal of Machine Learning Research* v. 15, p. 1929-1958 arXiv, 2012. [Link para o Artigo.](#)↵
- ILHA, E. C.; BERTOLDI, F. C.; DOS REIS, V. D. A.; SANT'ANNA, E. **Rendimento e eficiência da fermentação alcoólica na produção de hidromel**. *Embrapa Pantanal-Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento*, 2008. [Link para o Documento.](#)↵
- INOUE, S., GOODRICH, D., SAHA, S., NIMRI, R., KAMINENI, A., FLANN, N., & ZANE, R. **Fast Design Optimization Method Utilizing a Combination of Artificial Neural Networks and Genetic Algorithms for Dynamic Inductive Power Transfer Systems**. *IEEE Open Journal of Power Electronics*, v.3, p.915-929, 2022. [Link para o artigo.](#)↵
- 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*, v.13, n.2, p.112-124, 2021. [Link para o Artigo.](#)↵
- IVORRA, C.; PÉREZ-ORTÍN, J. E.; DEL OLMO, M. **An inverse correlation between stress resistance and stuck fermentations in wine yeasts. A molecular study**. *Biotechnol Bioeng*, v.64, n.6, p.698-708, 1999. [Link para o Artigo.](#)↵
- KARHE, R. R.; KALE, S. N. **Classification of Cardiac Arrhythmias Using Feed Forward Neural Network**. *Helix*, v.10 n.5, p.15-20, 2020. [Link para o Artigo.](#)↵
- KAVEH, M.; MESGARI, M. S. **Application of Meta-Heuristic Algorithms for Training Neural Networks and Deep Learning Architectures: A Comprehensive Review**. *Springer - Neural Processing Letters*, v.55, p.4519-4622, 2022. [Link para o Artigo.](#)↵
- KAWA-RYDLEWSKA, J.; KUCHARSKA, A. Z.; WASZKIW, M. D.; SROKA, P. **How Do Different Ingredients and Additives Affect the Production Steps and the Bioactive Potential of Mead?** *National library of Medicine - Food Technol Biotechnol*, v.61, n.2, p.179-190, 2023. [Link para o artigo.](#)↵

- KINGMA, D. P.; BA, J. **Adam: A method for stochastic optimization**. arXiv preprint arXiv:1412.6980. Disponível em: arXiv. Publicado em: 2014. [Link para o artigo.](#)↵
- LECUN, Y.; BENGIO, Y.; HINTON, G. **Deep learning**. Nature, v.521, n.7553, p.436-444, 2015. [Link para o artigo.](#)↵
- LI, Z; ZHOU, Z; GRETTON, A. **Towards an Understanding of Benign Overfitting in Neural Networks**. arXiv – Cornell University, 2021. [Link para o Artigo.](#)↵
- LIMA, S. S. **Modelagem e simulação da produção de hidromel em biorreator em batelada utilizando a levedura *Saccharomyces Cerevisiae***. 59f. Trabalho de Conclusão de Curso – Monografia), Curso de Engenharia de Biotecnologia e Bioprocessos, Centro de Desenvolvimento Sustentável do Semiárido, Universidade Federal de Campina Grande, Sumé – Paraíba – Brasil, 2022. p.12-25, 2022. [Link para a Dissertação.](#)
- MAICAS, S.; MATEO, J. J. **The Life of Non-Saccharomyces Yeasts in Wine**. Preprints – microorganisms, v.11, p.1178, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵
- MAPA. MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E ABASTECIMENTO. Instrução Normativa nº34. 2012. [Link para a norma.](#)↵
- MARTINS, T. D. **Predição da recorrência de tromboembolismo venoso via Redes Neurais Artificiais**. 2018. 128 p. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP. [Link para a Dissertação.](#)↵
- 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 170, p.1-5, 2006. [Link para o Comunicado Técnico.](#)↵
- MAZZA, G.; FRANCIS, F. J. **Anthocyanins in grapes and grape products**. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, v.35, p.341–371, 2005. [Link para o Artigo.](#)↵
- MCCULLOCH, W., PITTS, W. **A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity**. Bulletin of Math. Bio., n.5, p.115-133, 1943. [Link para o Livro.](#)↵
- 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, v.506, p.112411, 2020. [Link para o Artigo.](#)↵
- MELO, H. F. D. **Resposta ao estresse ácido em leveduras da fermentação alcoólica industrial**. 110p. Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Pernambuco, Recife/PE, 2006. [Link para a Dissertação.](#)↵
- MORAES, G. L. de; LIMA, V. U. B. C. de. **Ragnarök: uma análise da Völuspa e sua influência nas sociedades escandinavas da era viking**. Ed. 5, v.2, p.27-48, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵
- MICHAELIDES, S.; PATTICHIS, C.; KLEOVOULOU, G. **Classification of rainfall variability by using artificial neural networks**. INTERNATIONAL JOURNAL OF CLIMATOLOGY Int. J. Climatol. v.21, p.1401-1414, 2001. [Link para o Artigo.](#)↵

- MILESKE, J. P. F. **Produção e caracterização de hidromel utilizando diferentes cepas de leveduras *Saccharomyces***. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, 2016. [Link para a Dissertação.](#)↵
- MILLER, G. L. **Use of dinitrosalicylic acid reagent for determination of reducing sugar**. Analytical Chemistry, v.31, n.3, p.426-428, 1959. [Link para o Artigo.](#)↵
- MØLLER, M. F. **A scaled conjugate gradient algorithm for fast supervised learning**. Science Direct: Neural Networks, v.6, n.4, p. 525-533, 1993. [Link para o artigo.](#)↵
- NAKADA, P. E.; CACIATORI, R.; PANDOLFI, J. R. **O renascimento do hidromel e sua relação com a cultura geek**. Revista de Bebidas e Cultura, v.5, n.2, p.45-60, 2020.
- NAVRÁTIL, M.; ŠTURDÍK, E.; GEMEINER, P. **Batch and continuous mead production with pectate immobilised, ethanol-tolerant yeast**. Biotechnology Letters, v.23, p.977-982, 2001. [Link para o artigo.](#)↵
- NELSON, D. L.; COX, M. M. **Princípios de Bioquímica de Lehninger**. 6. ed. Porto Alegre: Armed, Cap.14-14.1, p.543-557, ISBN: 9788582710722, 2014.
- NGUYEN, B., TRAN, T., NGUYEN, T., NGUYEN, G. **An Improved Sea Lion Optimization for Workload Elasticity Prediction with Neural Networks**. International Journal of Computational Intelligence Systems, v.15, n.90, 2022. [Link para o artigo.](#)↵
- NYHAN, L.; SAHIN, A. W.; ARENDT, E. K. **Co-fermentation of non-*Saccharomyces* yeasts with *Lactiplantibacillus plantarum* FST 1.7 for the production of non-alcoholic beer**, European Food Research and Technology, v.249, n.1, p.167-181, 2022. [Link para o artigo.](#)↵
- OGANESYANTS, L. A.; PANASYUK, A. L.; KUZMINA, E. I.; SVIRIDOV, D. A. **Modern analysis methods use in order to establish the geographic origin of food products**. Published as a conference paper at ICLR, arXiv:1412.6980, v.9, 2015. [Link para o artigo.](#)
- ORTIZ-SÁNCHEZ, M., INOCENCIO-GARCÍA, P.-J., ALZATE-RAMÍREZ, A. F., & ÁLZATE, C. A. C. **Potential and Restrictions of Food-Waste Valorization through Fermentation Processes**. Alessia Tropea. v.9, n.3, p.274, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵
- PATI, S.; DE, S.; CHOWDHURY, R. **Exploring the hybrid route of bio-ethanol production via biomass co-gasification and syngas fermentation from wheat straw and sugarcane bagasse: Model development and multi-objective optimization**. Science Direct: Journal of Cleaner Production, v.395, p.136441, 2023. ISSN 0959-6526. [Link para o Artigo.](#)↵
- PEREIRA, A. P. **Caracterização de mel com vista à produção de hidromel**. Instituto Politécnico de Bragança, Escola Superior Agrária, Dissertação de Mestrado em Qualidade e Segurança Alimentar, 2008. [Link para a Dissertação.](#)↵
- POWELL, M. J. D. **Restart procedures for the conjugate gradient method**. Mathematical Programming, Springer - Mathematical Programming, v.12, n.1, p.241-254, 1977. [Link para o artigo.](#)↵

- RADKE, E. **Desenvolvimento de modelos híbridos-neurais para fermentação alcoólica e estudo de técnicas de otimização do processo**, p133. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP, 2002. [Link para a Dissertação.](#)↵
- RIBÉREAU-GAYON, J.; PEYNAUD, E.; RIBÉREAU-GAYON, P.; SUDRAUD, P. **Effect of three processes of vinification on chemical composition and quality of Cabernet Franc wine**. Sciences et techniques du vin. Paris: Dunod, v.3, p.719, 1976.
- RIZZON, L. A.; MIELE, A.; MENEGUZZO, J.; ZANUZ, M. C. **Efeito de três processos de vinificação sobre a composição química e a qualidade do vinho Cabernet Franc**. Pesq. agropec. bras., Brasília, v.34, n.7, p.1285-1293, 1999. [Link para o Artigo.](#)↵
- RIEDMILLER, M., & BRAUN, H. **A direct adaptive method for faster backpropagation learning: The RPROP algorithm**. In IEEE International Conference on Neural Networks, vol. 1, p.586-591, 1993. [Link para o artigo.](#)↵
- RIEDMILLER, M. **Advanced supervised learning in multi-layer perceptrons — From backpropagation to adaptive learning algorithms**. Computer Standards & Interfaces, v.16, n.3, p.265-278, 1994 [Link para o artigo.](#)↵
- RIPLEY, B.; RIPLEY, R. **Neural networks as statistical methods in survival analysis** in Clinical applications of artificial neural networks edited by DYBOWSKI, R. and GANT, V., published by the press syndicate of the university of Cambridge, v.11, p.237-255, 2001. [Link para o Artigo.](#)↵
- 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, v.35, p.1355-1367, 2018. [Link para o Artigo.](#)↵
- SANTOS, I.; BOSMAN, G.; DU TOIT, W.; ALEIXANDRE-TUDO, J. L. **The use of non-invasive fluorescence spectroscopy to quantify phenolic content under red wine real-time fermentation conditions**. Science Direct: Food Control, v.147, p.109616, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵
- SCHMIDHUBER, J. **Deep learning in neural networks: An overview**. Science Direct: Neural Networks, v.61, p.85-117, 2015. [Link para o Artigo.](#)↵
- SHERALI H. D., ULULAR, O. **Conjugate gradient methods using quasi-Newton updates with inexact line searches**, Journal of Mathematical Analysis and Applications, v.150, n.2, p.359-377, ISSN 0022-247X, 1990. [Link para o Artigo.](#)↵
- SILVA, I. N; SPATTI, D. H. & FLAUZINO, R. A. **Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas**. 2ª ed. São Paulo: Artliber Editora. 2016. Consultado em biblioteca em: 15 set. 2023.

- SROKA, P.; TUSZYŃSKI, T. **Changes in organic acid contents during mead wort fermentation**. Science Direct: Food Chemistry - FOOD CHEM, v.104, p.1250-1257, 2007. [Link para o Artigo.](#)↵

SPERDUTI, A. **Neural Networks for Adaptive Processing of Structured Data**. In: DORFFNER, G., BISCHOF, H., HORNIK, K. (eds) Artificial Neural Networks, Springer, Berlin, Heidelberg - ICANN 2001. Lecture Notes in Computer Science, v.2130. p.5-12, 2001. [Link para o Artigo.](#)↵

- TEKIN, S.; CAN, T. **Slide type landslide susceptibility assessment of the Büyük Menderes watershed using artificial neural network method**. Environmental Science and Pollution Research, Environ, v.29, p.47174–47188, 2021. [Link para o Artigo.](#)↵

- VASCONCELOS, N. M.; PINTO, G. A. S.; ARAGAO, F. A. S. de. **Determinação de açúcares redutores pelo ácido 3,5-dinitrosalicílico: histórico do desenvolvimento do método e estabelecimento de um protocolo para o laboratório de bioprocessos**. Fortaleza: Embrapa Agroindústria Tropical, 2013. (Embrapa Agroindústria Tropical. Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento, v.87). [Link para o Boletim.](#)↵

- YI SHANG and WAH, B. W. **Global optimization for neural network training**, in Computer IEEE, v.29, n.3, p.45-54, 1996. [Link para o artigo.](#)↵

- ZHANG, Q.; REID, J. F.; BRUCE LITCHFIELD, J.; REN, J.; CHANG, S. W. **A prototype neural network supervised control system for *Bacillus thuringiensis* fermentations**. Biotechnology and bioengineering. v.43, n.6, p.483-489, 1994. [Link para o Artigo.](#)↵

- ZHANG, Y.; AI, Y. Q.; WU, Q.; LI, C. F.; CHEN, W. X. **Optimization of Fermentation Conditions of Mead by Response Surface Methodology**. Advanced Materials Research, v.881-883, p.789-792, 2014. [Link para o Artigo.](#)↵

- ZHOU, T.; ZHOU, T.; REJI, R.; KAIRON, R. S.; CHIAM, K. H. **A review of algorithmic approaches for cell culture media optimization**. Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, Frontiers in Bioengineering and Biotechnology, v.11, 2023. [Link para o Artigo.](#)↵