



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO PAULO
CAMPUS DIADEMA



ORLANDO GOMES NETO

**SENSOR VIRTUAL NEURAL PARA MONITORAMENTO DA FERMENTAÇÃO DE
HIDROMEL ADICIONADO DE EXTRATO DE CASCA DE JABUTICABA**

DIADEMA

2023

ORLANDO GOMES NETO

**SENSOR VIRTUAL NEURAL PARA MONITORAMENTO DA FERMENTAÇÃO DE
HIDROMEL ADICIONADO DE EXTRATO DE CASCA DE JABUTICABA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado como exigência parcial para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química ao Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas da Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema.

Orientador: Prof. Dr. Tiago Dias Martins.

Coorientador: Prof. Dr. Rafael Ramos de Andrade.

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 carboidratos 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 terá como objetivo a elaboração de um sensor virtual baseado em Redes Neurais Artificiais capaz de prever a concentração de células (X), açúcares totais (S) e etanol (P) durante a fermentação para o fabrico de hidromel com adição polpa de casca de jabuticaba. Para que isto seja possível, escolher-se-á como variáveis de entrada: temperatura operacional (T), pH do meio, concentração de sólidos solúveis totais (°Brix) e a densidade óptica (D.O.) Para a obtenção e simulação da rede *feedforward* com treinamento supervisionado, utilizar-se-ão dados experimentais de uma fermentação realizada durante o projeto de IC de Costa (2020) (Processo FAPESP: 19/24444-1).

As redes neurais serão testadas em diversas configurações e será feita a identificação de quais serão 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.

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

ABSTRACT

Mead is an alcoholic beverage fermented from water and honey produced by the action of yeasts, typically strains of *Saccharomyces cerevisiae*, on carbohydrates such as glucose and fructose. Producers often face challenges stemming from limited knowledge and lack of control over important process parameters. The present work aims to develop a virtual sensor based on Artificial Neural Networks capable of predicting the concentration of cells (X), total sugars (S) and ethanol (P). during the fermentation to produce mead with the addition of Jaboticaba peel pulp. To make this possible, the chosen input variables will be operational temperature (T), culture media pH, concentration of total soluble solids (°Brix), and optical density (D.O.). For the acquisition and simulation of the *feedforward* network with supervised training, experimental data from a fermentation conducted during Costa's scientific initiation project (2020) (FAPESP Process: 19/24444-1) will be used.

The neural networks will be evaluated in various configurations, and the identification of the best training algorithms, activation functions, number of intermediate layers, and the number of neurons in each layer will be made to optimize the prediction of the output variables by the network.

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

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Processo geral para obtenção do hidromel.....	6
Figura 2: Processo fermentativo do hidromel	8
Figura 3: Pigmentos derivados de antocianinas	10
Figura 4: Neurônio Biológico.....	13
Figura 5: Neurônio matemático.....	15
Figura 6: Perceptron com uma camada intermediária.....	16
Figura 7: Funções de ativação empregadas	20
Figura 8: Processo geral de obtenção de uma rede neural.....	26
Figura 9: Rede de uma (a) e duas camadas (b) intermediárias.....	30
Figura 10: Concentração de sólidos solúveis (°Brix) dos experimentos em função do tempo	39
Figura 11: Densidade óptica (D.O.) dos experimentos em função do tempo.....	40
Figura 12: pH dos experimentos em função do tempo.....	40
Figura 13: Concentração de açúcares redutores (S) dos experimentos em função do tempo ..	41
Figura 14: Concentração de células (X) dos experimentos em função do tempo	41
Figura 15: Concentração de etanol (P) dos experimentos em função do tempo	42

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: configuração dos treinamentos gerais.....	35
Tabela 2: Número do experimento e suas respectivas temperaturas	40

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	OBJETIVO	3
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	4
3.1	O HIDROMEL	4
3.2	DEFINIÇÃO E IMPORTÂNCIA HISTÓRICA DO HIDROMEL.....	4
3.3	CONSUMO ATUAL CONTEXTUALIZADO	5
3.4	OTIMIZAÇÃO E DESAFIOS EM BIOPROCESSOS	5
3.5	PROCESSO PRODUTIVO.....	5
3.6	PROCESSO FERMENTATIVO.....	6
3.6.1	Reações químicas que envolvem a fermentação	9
3.6.2	Adição da casca de jabuticaba.....	10
3.7	MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO DA FERMENTAÇÃO DO HIDROMEL.....	11
3.8	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS.....	12
3.8.1	Estrutura, Funcionamento e Treinamento	12
3.8.2	Algoritmos de Otimização	18
3.8.3	Funções de Ativação	19
3.8.4	Treinamento, Validação, Teste e Simulação	21
3.8.5	Aplicações de RNAs em Processos Fermentativos.....	22
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	29
4.3.3	Métodos analíticos e obtenção das variáveis empregadas	31
4.3.4	Configuração e detalhes do treinamento das RNAs.....	34
4.3.5	Definição dos parâmetros de eficiência da rede.....	36
4.3.6	Obtenção da rede.....	37
4.3.7	Simulação da rede e análise dos resultados obtidos.....	37

5	RESULTADOS ESPERADOS E CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	39
6	PRODUÇÕES CIENTÍFICAS.....	44
7	CRONOGRAMA E PLANEJAMENTO	45
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	46

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 utilizado na produção do mosto. Esta variação influencia características como teor de ácido orgânico, pH, açúcar residual e teor alcoólico (Kawa-Rytlewska *et al.*, 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, se observa 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, temperatura 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, dos açúcares redutores e do produto é crucial para a análise e controle do processo fermentativo. No entanto, as técnicas tradicionais de medição dessas variáveis são demoradas. Assim, sensores virtuais baseados em Redes Neurais Artificiais (RNAs) são vistos como uma solução inovadora para prever variáveis importantes do processo, de forma mais rápida e eficiente.

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, o etanol (P). Para alcançar tal objetivo, se recorreu a dados experimentais, incluindo como variáveis de entrada: a temperatura operacional (T), concentração de sólidos solúveis (°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, Gradiente Conjugado com Reinicializações de Powell-Beale, Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno, Gradiente Descendente com Momentum e Taxa de Aprendizagem Adaptativa, One Step Secant entre outros. Paralelamente, se analisou o impacto de diversas funções de ativação, tais como logaritmo, tangente hiperbólica, linear, softmax e ReLu, 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%, de acordo com a legislação brasileira, 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 se inicia com a

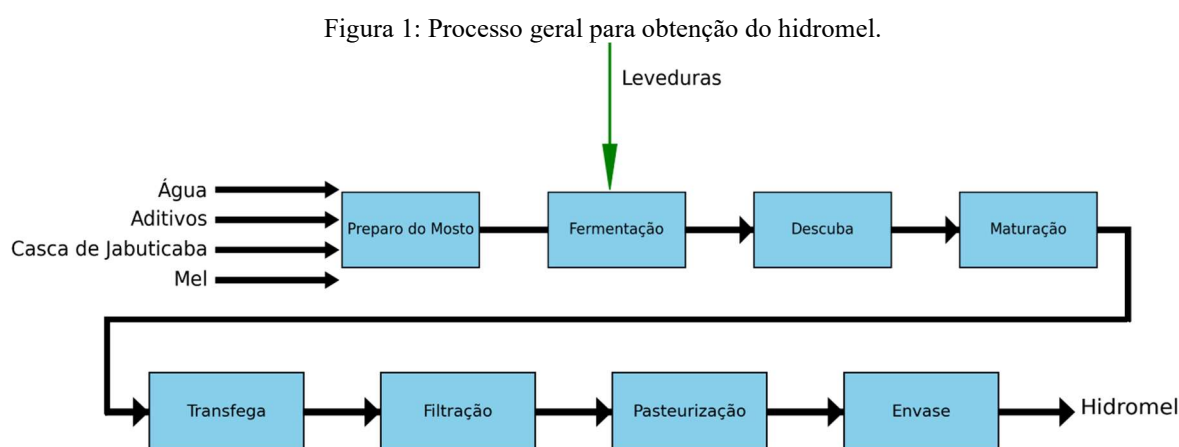
preparação do mosto, onde o mel é diluído em água até atingir 22 °Brix de sólidos solúveis (Brunelli, 2015). Pode-se adicionar frutas, ervas e especiarias para diversificar o sabor. A correção do pH e a adição de suplementos nutricionais são essenciais, dado que o mel não fornece nutrientes suficientes 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 (Mileski, 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.



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).

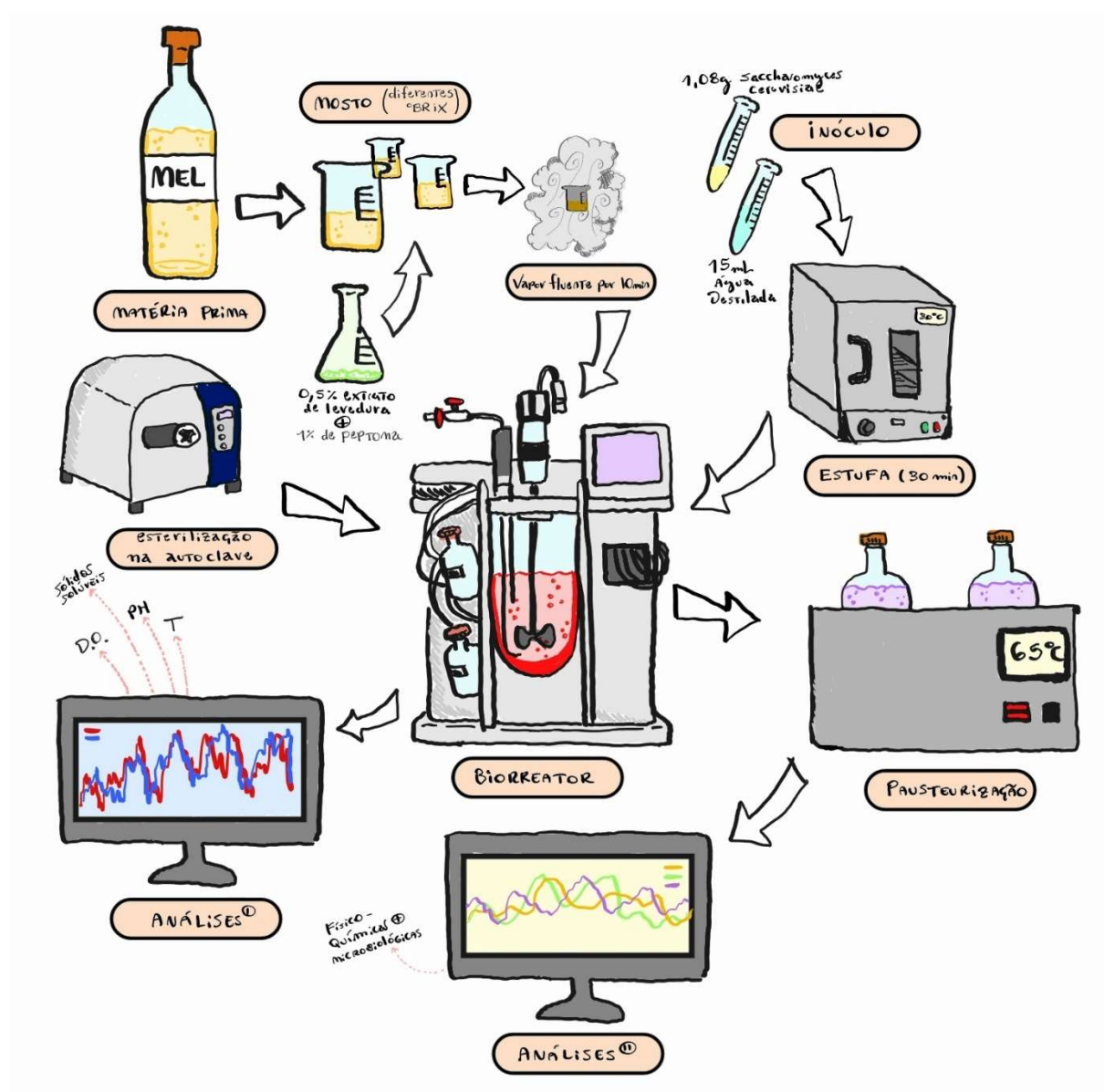
Esta seção abordará com maior detalhe os principais fatores que influenciam o processo fermentativo, sendo um deles, a temperatura, do qual é um parâmetro de grande influência na cinética do processo fermentativo, pois afeta as taxas de consumo de substrato (e, conseqüentemente, o tempo de fermentação), 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 a *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, são detalhados os passos do processo fermentativo, 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.

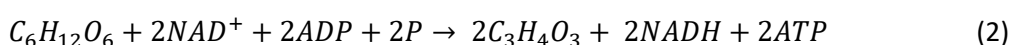
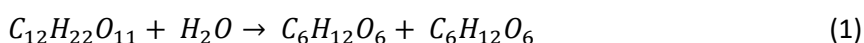
Outro fator de importância nas fermentações é a concentração de açúcares no mosto, uma vez que um alto teor desse composto pode tornar o processo fermentativo extremamente lento. Türkmen & Ekşi (2011) definem o grau Brix (°Brix) como uma escala numérica baseada no índice de refração que quantifica o 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).

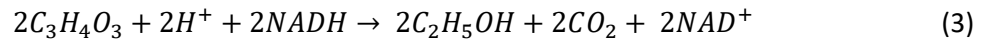
Em fermentações conduzidas em batelada, o valor de concentração de sólidos solúveis sofre alterações ao longo do processo. Esta concentração excessivamente elevada pode resultar na inibição por substrato, levando ao acúmulo de açúcares no produto final. Por outro lado, um valor muito baixo dessa variável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

Diante do exposto, a análise da concentração de sólidos solúveis 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.

3.6.1 Reações químicas que envolvem a fermentação

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):



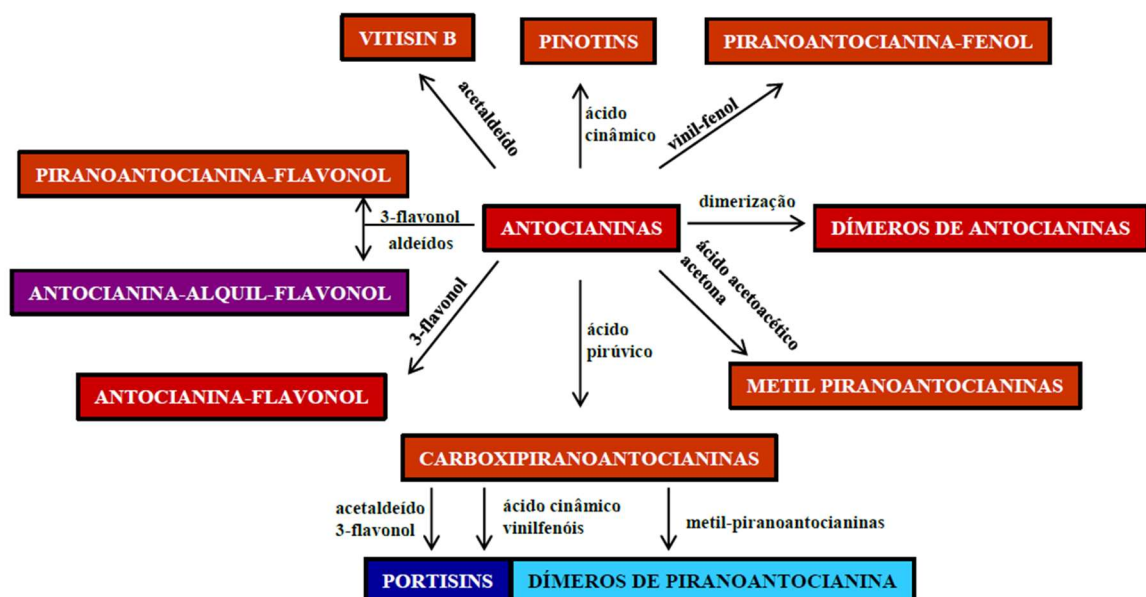


As Equações 1, 2 e 3 são representados, respectivamente por: quebra da sacarose em seus monômeros, frutose e glicose, por meio da catalisação da hidrólise, graças à ação da enzima invertase presente no microrganismo *Saccharomyces cerevisiae* (1). Em seguida, os monômeros são convertidos em piruvato, 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).

3.6.2 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 se encontram localizadas, principalmente, na película da uva, 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). Estas podem também ser encontradas na casca da jabuticaba.

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 MODELAGEM E OTIMIZAÇÃO DA 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 do meio de cultura, que é crucial para obter alto rendimento em produto, alta qualidade e reduzir o 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 de superfície de resposta 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, consequentemente, oferecer suporte para a obtenção de um hidromel de alta qualidade.

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).

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).

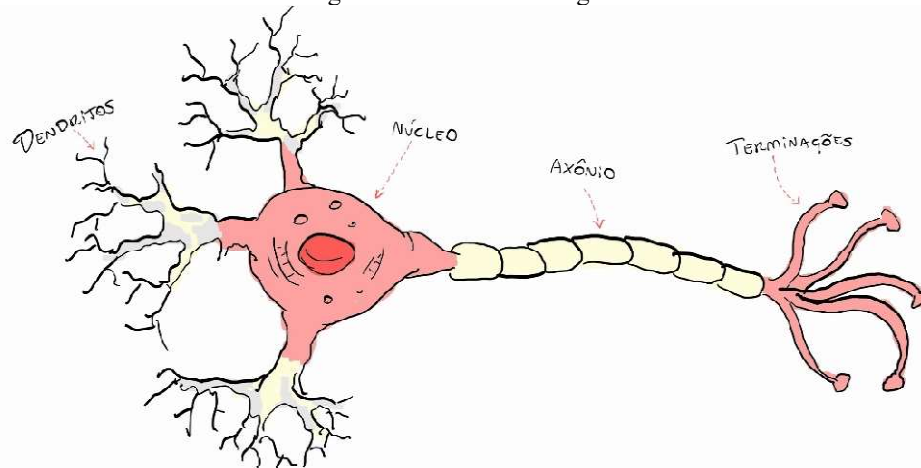
A eficácia de uma rede neural artificial (RNA) é avaliada pela precisão com que ela pode replicar os dados de saída desejados. Para isso, o neurônio artificial precisa ser treinado para executar uma tarefa específica (Fleck *et al.*, 2016).

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" se refere 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).

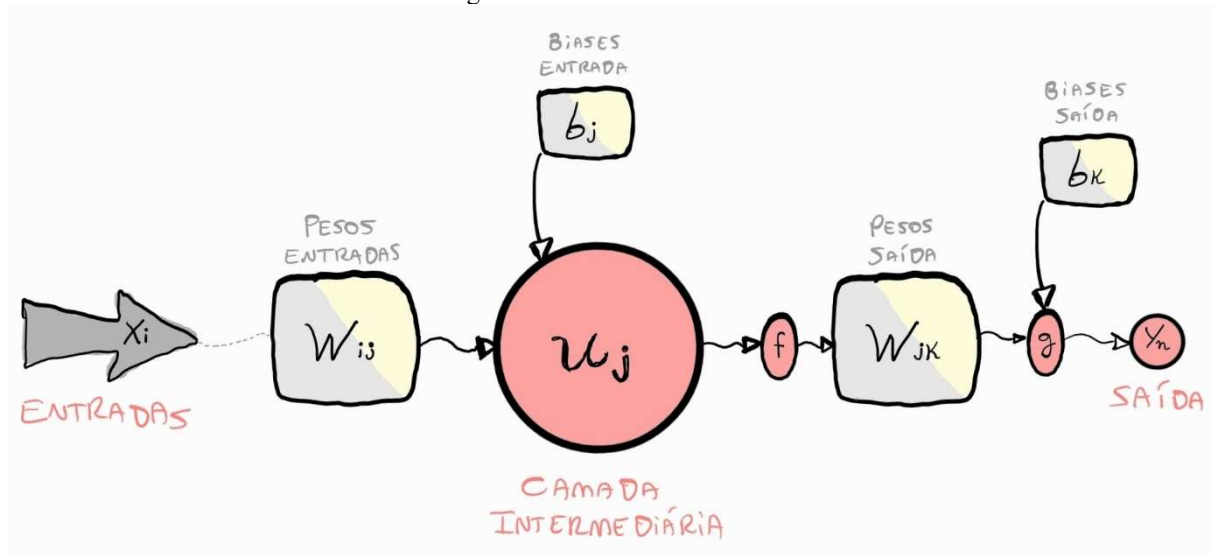
Para que o impulso seja transmitido à célula nervosa seguinte, é essencial que o limiar de excitação (threshold) seja alcançado. Segundo Braga *et al.* (2000), o disparo de um neurônio depende do acúmulo de uma grande quantidade de entradas, incluindo entradas inibitórias e excitatórias, avaliadas pelo 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 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).

A Figura 5 apresenta o modelo matemático de uma rede neural artificial de uma camada intermediária (oculta), representado unitariamente por uma quantidade k e uma função u_k . Nesse modelo, o neurônio recebe n entradas (inputs), identificadas como x_i . Cada entrada está associada ao seu peso w_{ik} . O limiar (bias) da camada intermediária 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



Fonte: Autoria Própria.

Matematicamente, o neurônio k pode ser representado pelas Equações (4) e (5). É importante destacar que essas equações permitem determinar o valor de ativação de cada neurônio (Braga, 2000).

$$u_j = g \left(\sum_{i=1}^x w_{ij} x_i + b_j \right)_j \quad (4)$$

$$y_n = f \left(\sum_{j=1}^z w_{jk} u_k + b_k \right)_n \quad (5)$$

Cada neurônio em uma RNA recebe uma série de entradas (definidas por x_i), as processa e produz uma saída (podendo ser “ n ” saídas). 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 de saída (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).

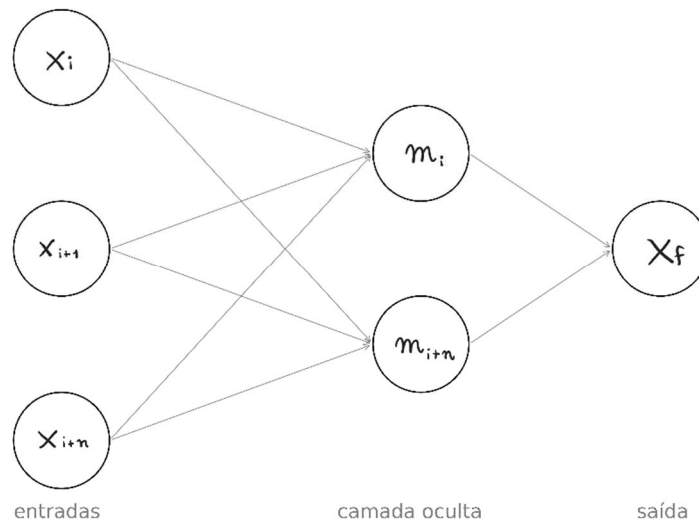
Unindo as equações (4) e (5), tem-se a modelagem que fornece a equação (6) para uma rede de uma camada genérica (podendo ser expandida para mais camadas intermediárias):

$$y_k = f \left(\sum_{j=1}^Z w_{jk} g \left(\sum_{i=1}^X w_{ij} x_i + b_j \right) + b_k \right) \quad (6)$$

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, Z é a contagem de neurônios na camada intermediária, g é a função de ativação pertinente à camada intermediária, e X 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.

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.

Aqui, x_i representa o valor de entrada da rede, enquanto x_{i+n} é um valor genérico subsequente a x_i e x_{i+n} , um valor tão alto quanto se queira em relação ao número de variáveis de entrada. A camada oculta m_i representam os neurônios (que podem ser diversos, indo até m_{i+n} , um número qualquer) que realizam a comunicação entre a entrada (*input*) e a saída (*output*), com x_f representando uma saída unitária.

Tal processo genérico ilustrado pela Figura 6, poderia (por exemplo), representar uma gama de eventos, tais como: temperatura (T), pressão (P) e Calor (Q) prevendo volume (V) como saída, ou processos mais complexos ainda, como ser utilizado em um sistema de previsão de vendas para uma loja de varejo, onde as três variáveis de entrada são o preço do produto, os gastos em publicidade e a temporada do ano. A saída desejada seria o número de unidades de um produto específico vendido em um determinado dia.

Nesse contexto, a rede neural aprenderia a relação entre as variações no preço do produto, os gastos em publicidade e a temporada, e como essas variáveis afetam as vendas da loja. Com base em dados históricos, a rede neural seria treinada para fazer previsões precisas, permitindo à loja ajustar suas estratégias de preços e publicidade com base nas previsões da rede neural, visando maximizar as vendas. Esse exemplo ilustra como a abordagem das redes neurais com três variáveis de entrada pode ser aplicada a processos complexos de previsão.

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 (2015), 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, 2015).

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 (Riedmiller; Braun, 1993).

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 (Møller, 1993)

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 (Marquardt, 1963).

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 (MacKay, 1992; 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).

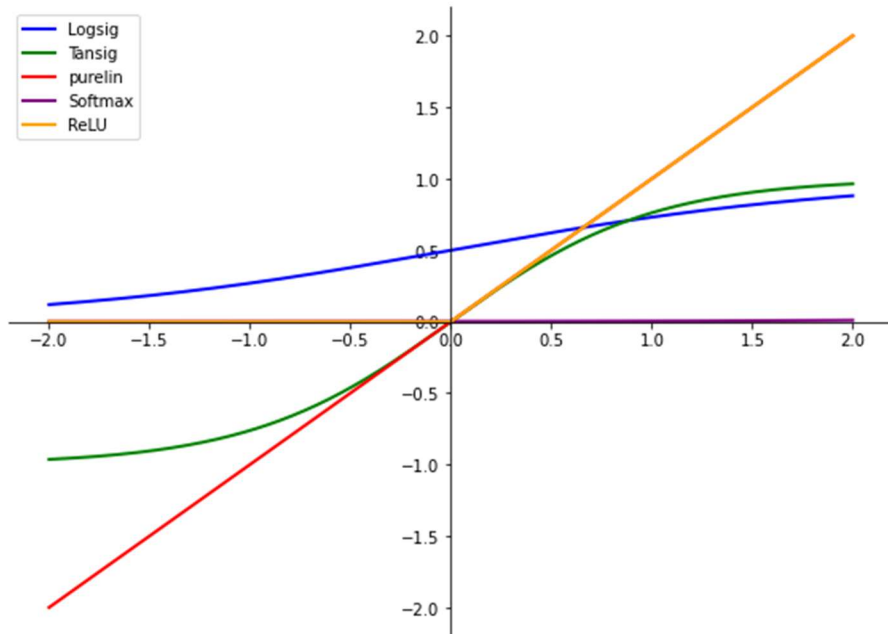
É imperativo enfatizar que a seleção do algoritmo de treinamento deve ser meticulosamente realizada, considerando as peculiaridades do problema e dos dados em análise. Processos de experimentação e validação cruzada são essenciais para determinar o algoritmo mais propício para cada contexto (Tekin; Can,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



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 de (9) a (13) 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.

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

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

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

$$f(x)_i = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^k e^{x_j}} \quad (12)$$

$$f(x) = \max(0, x) \quad (13)$$

A equação 10, pode ser chamada comumente 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, pode existir uma etapa adicional chamada de simulação, na qual a RNA é testada sob outras condições de interpolação 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.

Ademais, outro trabalho que ratifica a importância da parte da simulação, é o de Valera (2021). Neste trabalho, mostra que um dos métodos mais comuns para controlar o SO₂ é o processo de dessulfurização usando torre de pulverização. Devido ao grande número de parâmetros a serem avaliados e à complexidade do processo, houve dificuldades na proposição de modelos matemáticos para prever a eficiência de remoção e o coeficiente volumétrico de transferência de massa em fase gasosa (k_{ga}). O objetivo deste estudo foi obter uma rede neural artificial (RNA) para prever a eficiência de remoção e o k_{ga} em uma torre de pulverização para remoção de SO₂. Os resultados mostraram que a escolha do melhor modelo a partir das etapas de treinamento e validação não gerou resultados confiáveis. A melhor estrutura foi definida analisando os resultados de uma etapa de simulação, que utilizou dados independentes. O melhor modelo foi obtido com a estrutura 5-9-2, treinada usando o algoritmo Levenberg-Marquardt com Regulação Bayesiana (*trainbr*) e tendo as funções de transferência softmax e linear nas camadas ocultas e de saída, respectivamente. Essa rede apresentou um erro médio de 8,44% para a concentração de SO₂ na saída e 4,53% para o k_{ga} . Este trabalho demonstrou que o uso de redes neurais é promissor na previsão de variáveis importantes nos processos de remoção de poluentes do ar em torres de pulverização.

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 baseado em RNAs para monitorar as fermentações em batelada 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 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 a supervisão 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 concentração de sólidos solúveis (°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 de crescimento microbiano.

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 (concentração de: X - células, S – Substrato, P - etanol) como entradas da RNA e obteve resultados satisfatórios na aproximação de dados desconhecidos de concentração celular, de açúcares redutores e produto (etanol). O segundo modelo híbrido usou variáveis secundárias (pH, turbidez e concentração de sólidos solúveis

(°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 tangente hiperbólica. As variáveis de entrada incluíam concentração celular, concentração de glicose, tensão superficial, concentração de oxigênio dissolvido e tensão superficial diluída 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).

Silva, em 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 concentração de sólidos solúveis (°Brix).

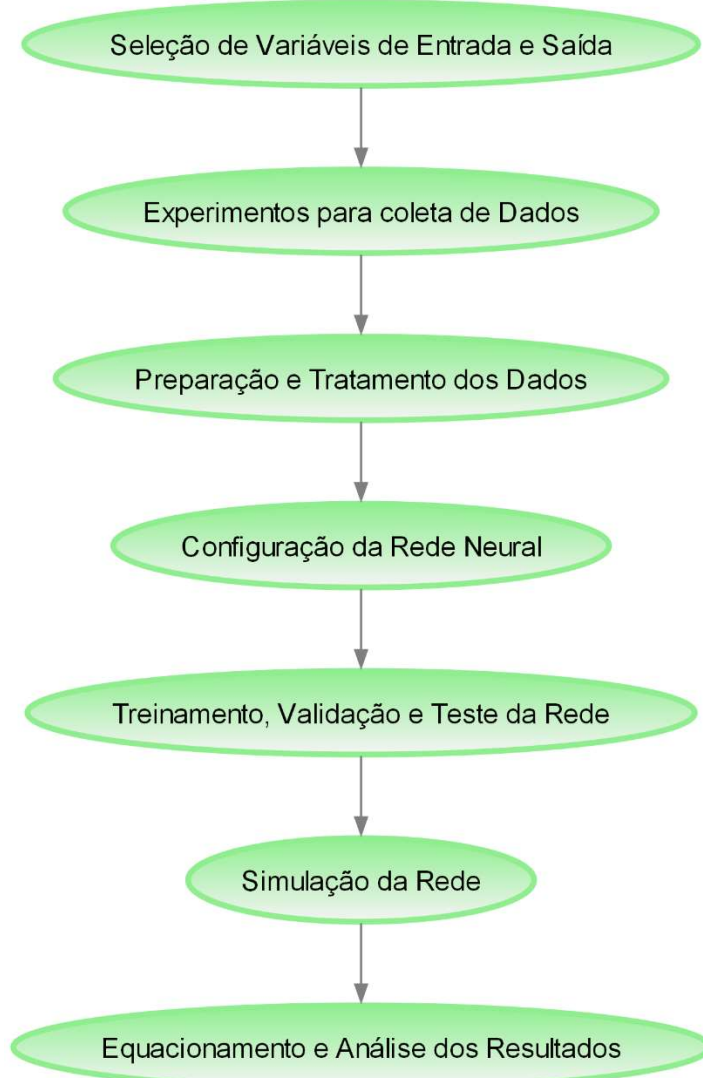
E mais recentemente, em um estudo envolvendo a fermentação de mel com adição de extrato de casca de jabuticaba, foi obtida uma rede que fornece previsões simultâneas de X, S e P com soma dos erros MAPE (Erro médio absoluto percentual) de 10^{-3} % com somente uma camada intermediária de configuração 3-15-3 utilizando também pH, D.O. e concentração de sólidos solúveis (°Brix) como variáveis de entrada (Gomes, 2023). Apesar do bom resultado, o trabalho considerou apenas a temperatura de 25 °C.

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 futura parte de métodos, detalhar-se-á a abordagem que será adotada desde a seleção de variáveis até a análise dos resultados. Iniciar-se-á 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, realizar-se-ão simulações para, finalmente, equacionar e analisar os resultados que serão 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 foi fornecido e advém, de forma completa, do trabalho de iniciação científica de Costa, em 2021.

Para o preparo do extrato de casca de jabuticaba, a ser utilizado nas fermentações, foi adicionado 50 % (m/m) de casca de jabuticaba, e 50 % de água mineral. Após, a mistura foi triturada em liquidificador por 5 minutos, peneirada usando peneiras de 60 mesh. A fração líquida, denominada de extrato, foi armazenada.

O meio de cultivo utilizado foi uma mistura de 2/3 (vol) de mel (adquirido de produtores rurais na região de São Miguel Arcanjo – SP), diluído com água mineral até atingir uma concentração de sólidos solúveis de 30 °Brix, e 1/3 de extrato de casca de jabuticaba adicionalmente, o meio foi enriquecido com 0,5% de extrato de levedura e 1% de peptona.

Após o preparo, o meio foi submetido a vapor fluente por 10 minutos. Previamente, o fermentador vazio fora esterilizado em autoclave por 20 minutos.

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. Essa quantidade foi utilizada para obter uma concentração inicial de inóculo no fermentador de 0,36 g/L, de acordo com recomendações do fabricante. Em seguida, o inóculo foi mantido em uma estufa a 30 °C por um período de 30 minutos.

As fermentações foram conduzidas em um fermentador do modelo Labfors 5, fabricado pela Infors HT na Suíça, em temperaturas de 20, 25 e 30°. A agitação foi realizada com o auxílio de duas turbinas de pás planas, operando a 200 rpm, conforme descrito por Ferraz (2015). O volume total do meio de cultivo utilizado foi de 3,0 L, (Costa, 2021).

4.2 OBTENÇÃO DOS DADOS EXPERIMENTAIS

No estudo de Costa (2021) 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. Para isso, 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 descrita por Andrade *et al.* (2013).

Para a quantificação da concentração de açúcares redutores, que compreendem a glicose e frutose, e etanol, o sobrenadante das amostras foi analisado utilizando cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC), equipado com a coluna Aminex HPX-87 H (Biorad Laboratories), e detector de índice de refração. O volume de injeção foi de 20 μL , temperatura do forno de 30°C, e vazão de fase móvel (solução de H_2SO_4 em pH 1,4) de 0,6 $\text{mL}\cdot\text{min}^{-1}$ (Andrade *et al.*, 2013).

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 (densidade óptica), 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 ($^{\circ}\text{Brix}$), que serve como uma predição da concentração de sacarose, 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 que será empregada na construção e treinamento dessas redes será essencial para assegurar sua eficácia e precisão. Este estudo proporá uma abordagem metodológica para o desenvolvimento de RNAs, cobrindo etapas críticas desde a preparação dos dados até a avaliação dos resultados.

A fase inicial envolverá a preparação e tratamento dos dados experimentais. Será imperativo que os dados coletados sejam organizados, limpos e formatados corretamente para garantir sua relevância para análises subsequentes (Goodfellow *et al.*, 2015).

A seleção de variáveis de entrada e saída será a próxima etapa crítica. A escolha apropriada dessas variáveis será relevante para a capacidade da RNA de aprender e prever as características essenciais do processo (Goodfellow *et al.*, 2015).

Definir parâmetros para avaliar a eficiência da rede será outra etapa crucial. Métricas como erro quadrático médio e coeficiente de determinação (R^2) serão 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, será fundamental para o desempenho da rede (Lecun *et al.*, 2015).

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

Após o treinamento, a RNA será testada e os resultados serão 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, serão utilizados os dados experimentais disponíveis de Costa (2021). No entanto, devido à limitação na quantidade de dados que serão coletados, adotar-se-á uma estratégia comum em estudos envolvendo Redes Neurais Artificiais (RNAs), que consistirá na geração de dados adicionais por meio de ajuste de equações suaves. Essa abordagem será amplamente empregada (Becker *et al.*, 2002; Silva; Fileti, 2016) e será aplicada com êxito em estudos recentes conduzidos pelo grupo Choji *et al.* (2021) e Irizawa, Martins e Veggi (2021).

Por meio desse procedimento, serão gerados 200 pontos para cada uma das variáveis de entrada e saída abrangendo os 5 experimentos, mantendo um intervalo de tempo constante. Isso resultará em uma base de dados expandida que melhorará significativamente o processo de treinamento da RNA. O tempo total de fermentação do experimento mais longo perdurou por um período de 377 horas.

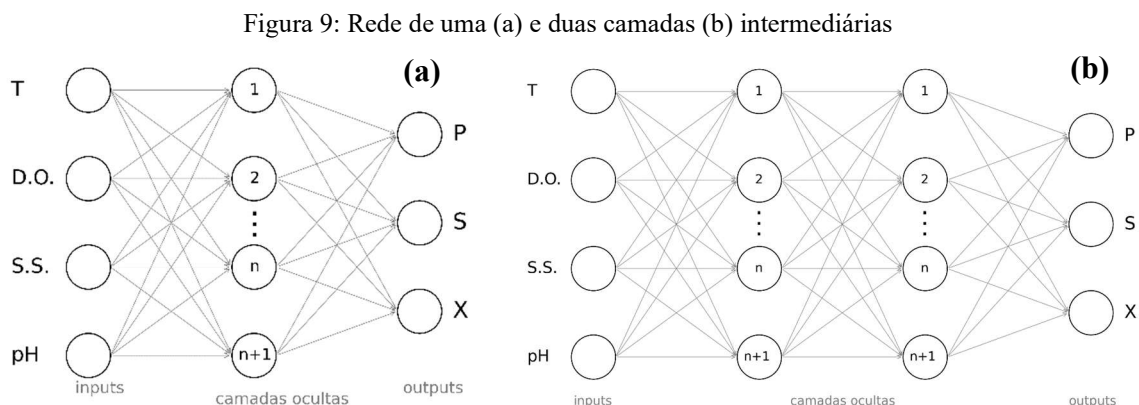
Essa estratégia de geração de dados adicionais será fundamental para garantir que a RNA seja devidamente treinada e possa aprender com maior precisão as complexas interações do processo de fermentação ao longo do tempo. Dessa forma, aumentar-se-á a robustez e a capacidade de generalização da RNA para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

4.3.2 Seleção das variáveis de entrada e saída

A abordagem envolverá 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, selecionar-se-ão cuidadosamente as variáveis de entrada que serão utilizadas na RNA, levando em consideração diversos aspectos cruciais para o sucesso da modelagem.

Na escolha das variáveis de entrada, considerar-se-ão vários fatores importantes. O pH, por exemplo, será incluído devido à sua relevância como uma variável crítica que indica a produção no processo. A temperatura, que rege o processo, tendo ligação diretamente proporcional com as conversão dos reagentes e as velocidades de reação. A densidade óptica (D.O.) será outra variável de entrada escolhida, pois se relacionará com o crescimento microbiano, desempenhando um papel crucial na caracterização do processo. Além disso, também incorporar-se-á a concentração de sólidos solúveis (S.S.), uma vez que esta indica o consumo do substrato ao longo da fermentação.

Outro aspecto relevante na escolha dessas variáveis de entrada será sua facilidade de medição, uma vez que será fundamental que as variáveis sejam práticas, rápidas 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 gerará as variáveis de saída: concentração de células, de açúcares redutores e etanol. A Figura 9 (b), por outro lado, ilustra uma RNA com duas camadas intermediárias prevendo X, S e P.



Fonte: Autoria própria.

Na Figura 9 (a), podemos observar a confirmação da interação entre as variáveis de entrada, os *inputs* (T, pH, Sólidos Solúveis (S.S.) e densidade óptica (D.O.)) com a camada intermediária. Cada seta que conecta essas camadas representa um peso que indica a intensidade da comunicação entre elas, ou seja, o impacto que cada variável tem sobre o neurônio intermediário. Da camada intermediária para a camada de saída, os *outputs* (neurônios de saída), temos as concentrações das três variáveis: X (células), S (Açúcares redutores) e P (etanol). Normalmente, as setas que se deslocam dos neurônios intermediários para os de saída representam os pesos que facilitam a comunicação nesse nível.

De forma semelhante, na Figura 9 (b), é apresentada uma arquitetura com apenas uma camada intermediária adicional (rede de duas camadas), o que aumenta a complexidade da rede e, consequentemente, o número de parâmetros envolvidos.

4.3.3 Métodos analíticos e obtenção das variáveis empregadas

Com isso, é precipuamente incisivo destacar a importância dos métodos analíticos na obtenção das variáveis de entrada e saída ao longo da fermentação.

- **Variáveis de Entrada (T, pH, D.O. e S.S.):**

O pH e a temperatura, como já exposto, foram medidos ao longo da fermentação pelo próprio aparato acoplado ao fermentador, já as técnicas analíticas empregadas nas outras variáveis (outras 5), serão aqui detalhadas.

A análise da densidade óptica (D.O.) é um método rápido e simples, embora indireto, para prever 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).

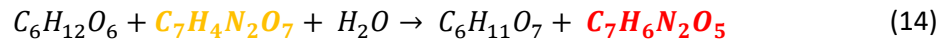
Existe uma relação linear até certo ponto entre a absorvância e a concentração celular. No entanto, é importante notar que a medida da densidade óptica não distingue entre células viáveis e células mortas. Esse método é principalmente utilizado para confirmar o crescimento celular ou monitorar esse crescimento com base no aumento da absorvância 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 14, mostra, de forma resumida o processo envolvente:



Na Equação 4, $C_6H_{12}O_6$ é a sacarose, $C_7H_4N_2O_7$ é o DNS em sua forma pura, $C_6H_{11}O_7$ é o ácido glucônico e $C_7H_6N_2O_5$ é o ácido 3-amino-5-nitrosalicílico, que se torna avermelhado ao longo da reação.

Dado que o °Brix está associado à concentração total de açúcares, opta-se por empregar uma medida mais específica para determinar a concentração de sacarose, no meio de fermentação. Essa análise é de suma importância, uma vez que é a sacarose que irá hidrolisar e gerar, como produtos, 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 sólidos solúveis (°Brix), uma das variáveis de entrada da RNA.

- **Variáveis de Saída (X, S e P)**

A técnica gravimétrica é um método analítico amplamente utilizado para determinar a concentração de substâncias em uma amostra, com base na medição precisa da massa dos componentes de interesse. No contexto da concentração celular, essa abordagem é empregada para estimar a quantidade de células presentes na amostra.

Na obtenção de uma das variáveis de saída, a concentração de células (X), é empregado o método analítico, a técnica gravimétrica. Procedimento gravimétrico típico para a determinação da concentração celular envolve várias etapas. Primeiro, as amostras são submetidas à centrifugação em uma centrífuga de alta velocidade, como a modelo 5702 R da Eppendorf. Esse processo de centrifugação separa as células do meio líquido da amostra, formando um precipitado.

Em seguida, o precipitado obtido após a centrifugação é submetido a um processo de lavagem em duas ou mais etapas consecutivas. A lavagem é realizada para remover

contaminantes e resíduos da amostra, garantindo que o precipitado seja composto principalmente de células.

Após a lavagem, o precipitado é transferido para uma estufa e seco a uma temperatura específica, comumente a 70°C. A estufa é usada para eliminar completamente a umidade da amostra, assegurando que a massa medida seja representativa das células. Por fim, a massa do precipitado seco é medida com precisão utilizando uma balança analítica. Essa massa medida é então usada para calcular a concentração celular com base na relação massa-volume e na estequiometria da amostra.

A gravimetria é apreciada pela sua alta precisão e exatidão na determinação de concentrações, sendo útil em situações em que outras técnicas de análise podem não ser aplicáveis. Essa técnica é frequentemente utilizada em laboratórios de pesquisa e controle de qualidade para diversas aplicações, incluindo análises de sólidos, precipitações e concentração de células, como ilustrado no exemplo apresentado.

Durante a condução do experimento, foram realizadas medições periódicas das concentrações de sacarose (através da análise de sólidos solúveis, a análise DNS, como exposto), frutose glicose (pelo método de HPLC - Cromatografia Líquida de Alta Eficiência) para avaliar o progresso do processo fermentativo. Essas análises proporcionaram informações relevantes sobre as transformações bioquímicas em andamento no fermentador, incluindo o aumento gradual na concentração de álcool etílico, evidenciando o sucesso do processo de fermentação. Esses resultados destacam a importância da enzima invertase e do metabolismo da levedura na conversão eficiente de sacarose em álcool etílico, com implicações significativas em aplicações industriais e biotecnológicas (Nelson; Cox, 2014).

O HPLC é uma técnica analítica amplamente reconhecida pela sua capacidade de separar, identificar e quantificar componentes individuais em uma mistura complexa. No caso deste experimento, uma amostra da solução foi cuidadosamente preparada e injetada na coluna cromatográfica do equipamento HPLC. Dentro da coluna, os componentes da amostra foram separados com base em suas interações com a fase estacionária e móvel. A fase móvel, composta por um solvente específico, o ácido sulfúrico (H_2SO_4) em pH 1,4 com vazão de 0,6 mL.min⁻¹, transportou os componentes através da coluna, enquanto a fase estacionária retinha e separava esses componentes de acordo com suas características químicas. Detectores sensíveis foram empregados para registrar os sinais cromatográficos, permitindo a quantificação precisa das concentrações de glicose, frutose e etanol ao longo do tempo. Esse método desempenhou um papel fundamental ao fornecer dados precisos que permitiram

acompanhar de perto o progresso da fermentação e avaliar a eficiência da conversão de sacarose em álcool etílico no decorrer do experimento.

4.3.4 Configuração e detalhes do treinamento das RNAs

As fases de obtenção e simulação serão conduzidas no ambiente de desenvolvimento Mathworks Matlab® R2016b. Durante o processo, criar-se-ão e treinar-se-ão redes neurais artificiais (RNAs) com diferentes arquiteturas, incluindo aquelas com uma ou duas camadas intermediárias (também conhecidas como camadas ocultas). Além disso, variar-se-á 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, explorar-se-ão diversos algoritmos de otimização: o Scaled Conjugate Gradient (*trainscg*), o Levenberg-Marquardt (*trainlm*), o Levenberg-Marquardt com Regularização Bayesiana (*trainbr*), o Resilient Backpropagation (*trainrp*), o Gradiente Conjugado com Reinicializações de Powell-Beale (*traincgb*), o Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (*trainbfg*), o Gradiente Descendente com Momentum e Taxa de Aprendizagem Adaptativa (*traingdx*), o One Step Secant (*trainoss*) e outros que forem interessantes ao estudo. Cada um desses algoritmos possui características específicas que poderão influenciar a convergência e a eficiência do treinamento.

No que diz respeito às funções de transferência utilizadas nas camadas intermediárias, testar-se-ão cinco opções: a função logaritmo-sigmoide (*logsig*), a tangente hiperbólica-sigmoide (*tansig*), a linear (*purelin*), a linear retificada (ReLU ou *poslin*) e a exponencial normalizada (*softmax*). Essas funções desempenharão um papel fundamental na modelagem das relações entre as camadas da RNA, e sua escolha poderá afetar significativamente o desempenho da rede.

Para as camadas de saída das RNAs, todas as cinco funções de ativação também serão testadas e avaliadas em configurações de uma única camada intermediária. Essas escolhas serão feitas com o intuito de analisar como as diferentes combinações de funções de ativação influenciarão a capacidade da RNA de representar e generalizar os dados de forma eficaz.

Para cada um dos algoritmos de otimização, será testada de 5 a 35 neurônios na primeira camada e de 5 a 30 na segunda (variando de 5 em 5), com todas as 5 possíveis funções de ativação, totalizando 3750 redes, sendo cada uma retreinada 5 vezes, resultando, portanto, em 18.750 redes. Se a configuração que apresentar o menor MAPE (do qual será o \sum MAPE de células, produto e açúcares redutores somados e divididos por 3) for inferior ao limite de 20%,

a configuração será levada para um retreinamento múltiplo de si mesma que poderá variar de 1000 a 3000 vezes a fim de encontrar o menor erro possível.

É válido salientar ainda que, a estratégia tida como principal prevê em torno de 200.000 possíveis redes neurais obtidas, trazendo a luz, uma avaliação criteriosa para encontrar a configuração soberana.

A Tabela 1 resume as diversas configurações que serão testadas durante este estudo, abrangendo as variações nos algoritmos de treinamento, nas funções de transferência e na estrutura geral das RNAs. Essa análise abrangente irá permitir 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.

Tabela 1: configuração dos treinamentos gerais

Camadas intermediárias	Algoritmos de otimização	Funções de ativação (intermediária)	Funções de ativação (saída)	Neurônios (camada 1)	Neurônios (camada 2)
1	<i>trainscg, trainlm, traicgb, trainbr, trainbfg, traingdx, trainrp, trainoss</i>	<i>tansig, purelin, softmax, logsig, poslin</i>	<i>tansig, purelin, softmax, logsig, poslin</i>	5 - 35	-
2	<i>trainscg, trainlm, traicgb, trainbr, trainbfg, traingdx, trainrp, trainoss</i>	<i>tansig, purelin, softmax, logsig, poslin</i>	<i>tansig, purelin, softmax, logsig, poslin</i>	5 - 35	5 - 30

Fonte: Autoria Própria.

Conforme apresentado na Tabela 1, 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 tornem excessivamente complexas, com um número excessivo de parâmetros a serem ajustados. Será ser limitado, portanto, o intervalo de neurônios nessa camada intermediária a uma faixa entre 5 e 30 unidades.

Essa abordagem será 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, quando se equilibrar o número de neurônios nas camadas intermediárias, a busca será para encontrar um ponto ótimo que permita que as RNAs com duas camadas continuem eficazes na modelagem do processo, ao mesmo tempo em que mantenham 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 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 serão armazenados para uma análise abrangente do desempenho da rede (Silva, 2021).

A função objetivo escolhida será a média da diferença quadrática entre os valores calculados pela RNA e os valores experimentais reais, conhecida como Mean Squared Error (MSE), conforme será expresso na Equação 15:

$$F_{OBJ} = MSE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (h_{j,exp} - h_{j,rede})^2 \quad (15)$$

Nesta equação, n representa o número de pontos experimentais, $h_{j,rede}$ é o valor que será 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 16 a seguir:

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{|h_{j,exp} - h_{j,rede}|}{h_{j,exp}} \cdot 100\% \quad (16)$$

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:

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \cdot \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (17)$$

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 fornecerão uma visão abrangente da precisão da RNA, permitindo avaliar a concordância entre os resultados a serem previstos e os dados experimentais reais. Quanto menor o MSE e o MAPE, e quanto mais próximo de 1 for ρ , melhor será o desempenho da rede neural no processo de modelagem e simulação (Awang, 2018).

4.3.6 Obtenção da rede

Será compreensível o conceito de “obtenção da rede” pela estruturação das seguintes etapas: treinamento, teste e por fim, a validação da qual serão fornecidos 4 experimentos. Logo após, quando for fornecido os 1000 dados (200 para cada um dos experimentos) e, aderir-se-á a escolha de reservar 600 dados para a obtenção da rede (com 150 dados de cada experimento ou 75% para aplicação nas três etapas: de treinamento, validação e teste) e os 200 dados remanescentes para a simulação da rede (50 de cada experimento ou 25% dos outros 4) e de forma semelhante, um experimento completo (200 dados, escolhido aleatoriamente) e reservado somente para a simulação.

Precipuamente, já se torna fulcral salientar que, a distribuição percentual dos dados experimentais destinados ao treinamento, teste e validação, será feita de maneira sortida pelo software Matlab® (distribuída em 70% de treinamento, 15% de teste e 15% de validação). Sendo, a rede submetida à 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.

4.3.7 Simulação da rede e análise dos resultados obtidos

A fase de simulação das redes neurais será executada utilizando-se os 200 dados restantes (50 dados ou 25% de cada experimento utilizado no treinamento, distribuídos de forma aleatória) mais os outros 200 dados reservados de um único experimento escolhido aleatoriamente, totalizando 400 dados. Essa etapa desempenhará 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 serão introduzidos como variáveis de entrada, permitindo avaliar a capacidade de generalização da rede e, por conseguinte, determinar qual modelo efetivamente melhor descreverá 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 basear-se-á na análise do erro médio percentual absoluto (MAPE) e do coeficiente de correlação de Pearson obtidos na etapa de simulação. Além desses critérios, também será ponderado o número de parâmetros presentes na RNA.

Dessa forma, a escolha do modelo ótimo levará 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 ESPERADOS E CONSIDERAÇÕES FINAIS

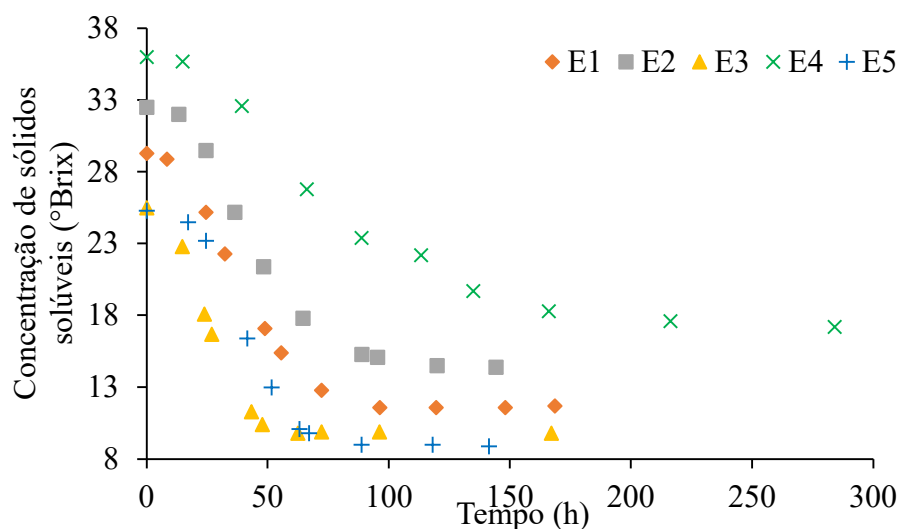
Visa-se criar um sensor virtual fundamentado em RNAs para prever acuradamente a concentração de células (X), açúcares redutores (S) e etanol (P) durante a fermentação na produção de hidromel com adição de extrato de casca de jabuticaba. Almeja-se determinar os algoritmos de treinamento e funções de ativação mais eficazes para aprimorar a precisão das previsões da rede, auxiliando em pesquisas futuras sobre a produção de hidromel.

Ao empregar leveduras para produzir determinado item via fermentação alcoólica, o monitoramento de variáveis cruciais (X, S, P) é fundamental para assegurar a operação em condições ideais, consolidar um período de fermentação adequado, garantir a concentração e qualidade do produto desejado e outros elementos que viabilizem economicamente o processo.

Ambiciona-se que o referido sensor forneça *insights* relevantes para um entendimento mais detalhado das variáveis envolvidas, possibilitando um controle mais estrito dos parâmetros que influenciam a qualidade do produto e fundamentando decisões, caso ajustes sejam requeridos. Prevê-se que o sensor virtual possa, através do entendimento das variáveis de processo (X, S e P), orientar decisões durante a fermentação, maximizando a produção da bebida e assegurando eficiência, produtividade e excelência no produto final.

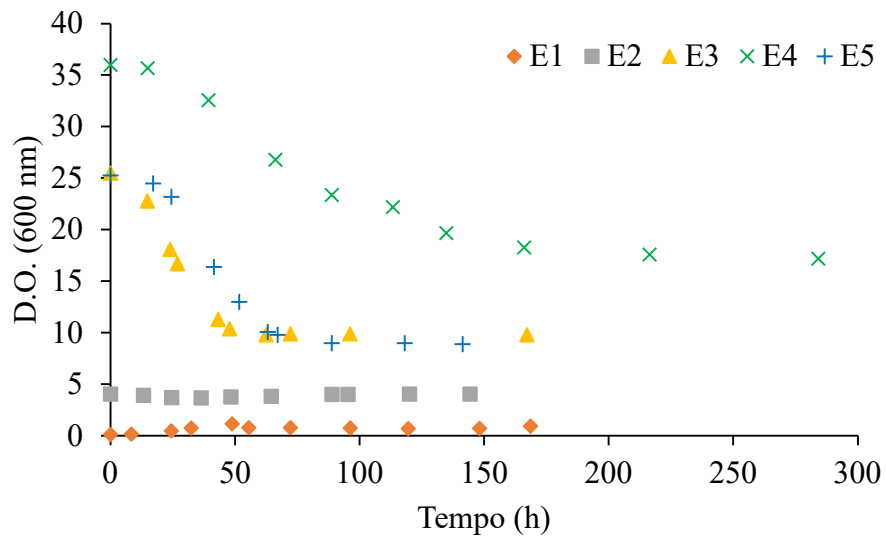
As Figuras 10, 11 e 12 mostram as variáveis de entrada dispostas na futura rede em função do tempo, bem como a Tabela 2 mostra a respectiva temperatura da qual cada um dos experimentos foi submetido:

Figura 10: Concentração de sólidos solúveis (°Brix) dos experimentos em função do tempo



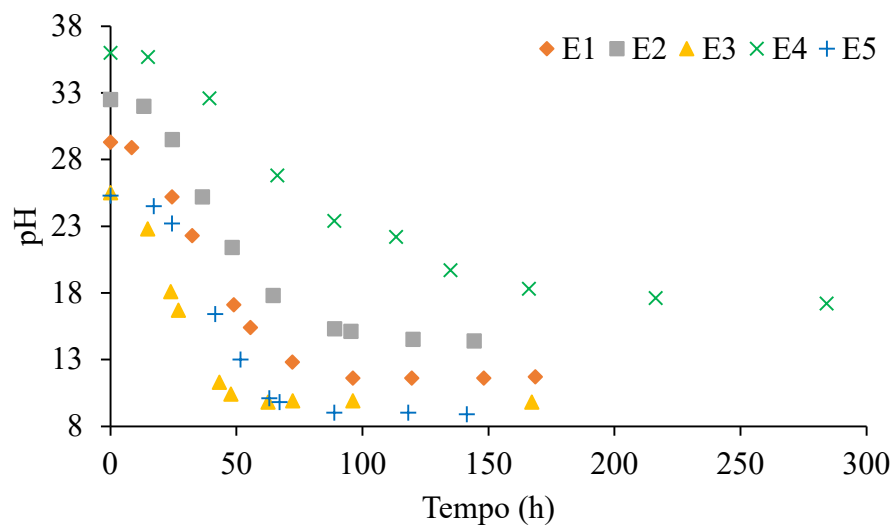
Fonte: Autoria Própria.

Figura 11: Densidade óptica (D.O.) dos experimentos em função do tempo



Fonte: Autoria Própria.

Figura 12: pH dos experimentos em função do tempo



Fonte: Autoria Própria.

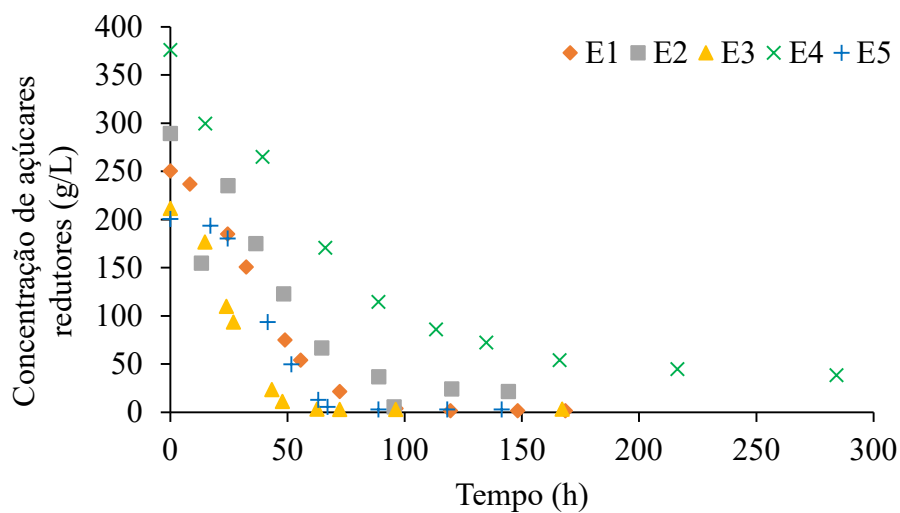
Tabela 2: Número do experimento e suas respectivas temperaturas

n° EXP.	Temperatura (°C)
1	25,0
2	25,0
3	30,0
4	20,0
5	20,0

Fonte: Autoria Própria.

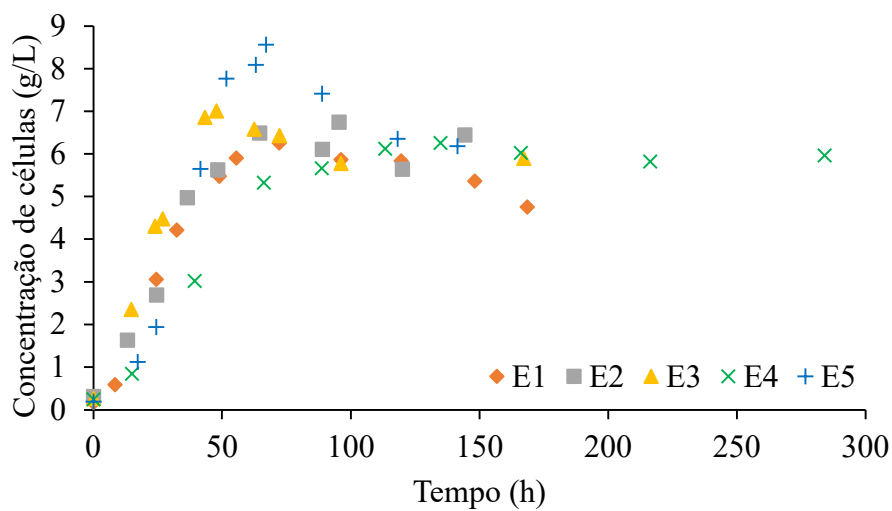
Por outra via, as Figuras 13, 14 e 15 mostram as concentrações das variáveis de saída em função do tempo:

Figura 13: Concentração de açúcares redutores (S) dos experimentos em função do tempo



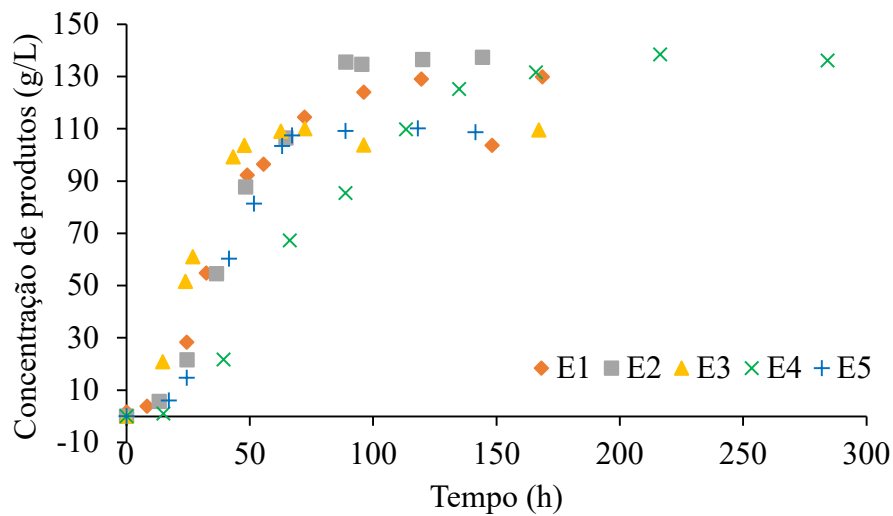
Fonte: Autoria Própria.

Figura 14: Concentração de células (X) dos experimentos em função do tempo



Fonte: Autoria Própria.

Figura 15: Concentração de etanol (P) dos experimentos em função do tempo



Fonte: Autoria Própria.

A análise da Figura 14 revela que a concentração inicial de açúcar em cada processo fermentativo está alinhada com os valores de ° Brix empregados. Observa-se que, ao término das fermentações, mesmo com a presença de 8 a 18 °Brix, os açúcares residuais apresentam-se substancialmente inferiores a 60 g/L, com a exceção do processo E5, que registra 70 g/L. Este último apresenta uma concentração inicial de substrato significativamente alta, resultando em maior inibição por substrato durante a fermentação.

Conforme ilustrado na Figura 13, o perfil de crescimento celular nas fermentações segue um padrão específico. Inicialmente, ocorre um aumento rápido, indicativo da fase exponencial, seguido por uma fase estacionária e de declínio celular. Notadamente, a fermentação E6, conduzida a 20°C com menor concentração de sólidos solúveis (25 °Brix), demonstrou um desenvolvimento maior da levedura, o que corrobora com as indicações do fabricante sobre a preferência da levedura por temperaturas mais baixas e menor concentração de açúcares, condições que minimizam o efeito inibidor sobre seu crescimento. Além disso, a taxa de crescimento celular tende a ser mais elevada em temperaturas reduzidas (Andrade, 2012; Costa, 2021).

A utilização da rede oferece diversos benefícios. Se a concentração de células estiver muito baixa, o sensor pode orientar ao operador, a mudança de alguma condição operacional, como abaixar a temperatura para favorecer o crescimento microbiano. Ela também auxilia na predição do teor alcoólico do produto, assegurando sua conformidade com a legislação nacional. Uma alta concentração de etanol pode causar inibição, e a rede possibilita o monitoramento e controle

dessa concentração durante a fermentação. Além disso, a rede proporciona uma visão atual do processo, orientando futuras decisões e ajustes.

A RNA pode ser adaptada para outras variações de hidromel e bebidas fermentadas, mas requer retreinamento. Espera-se que este trabalho gere impactos sociais, econômicos e ambientais positivos, incentivando a produção da bebida. A ferramenta pode ser útil para pequenos agricultores na otimização e monitoramento da produção artesanal de hidromel, potencialmente aumentando sua renda, valorizando o mel nacional e fortalecendo a apicultura no país. Isso pode também favorecer a preservação das abelhas, promovendo sustentabilidade. A previsão de X, S e P é específica para hidromel com adição de polpa de casca de jaboticaba, mas a rede neural pode ser adaptada para outras bebidas fermentadas e variações de hidromel, desde que seja retreinada.

Alguns riscos foram identificados que podem comprometer a criação do sensor virtual neural e as análises propostas neste estudo. Entre eles estão a possibilidade de que a quantidade de dados experimentais fornecidas para o treinamento não sejam adequadas e, pelo modelo prever também a temperatura como variável de entrada, não conseguir se adaptar bem. Além disso, os algoritmos de treinamento e as funções de ativação escolhidas podem não proporcionar uma resposta eficaz da rede.

6 PRODUÇÕES CIENTÍFICAS

O estudo desenvolvido neste trabalho irá gerar um artigo do qual será submetido a uma revista científica internacional Estadunidense:

GOMES NETO. O; COSTA, B. S. G.; ANDRADE, R. R.; BRAGA, M. B.; MACIEL FILHO, R.; TOVAR, L. P.; BRAGA, A. R. C.; MARTINS, T.D. **Neural Virtual Sensor For Monitoring The Fermentation Of Hydromel Added To Jabuticaba Peel Extract**, 2023.

7 CRONOGRAMA E PLANEJAMENTO

Atividades	Trimestre		
	Nov/2023 -Jan/2024	Fev/2024 - Abr/2024	Mai/2024 - Jul/2024
Revisão Bibliográfica			
Entrega do Relatório de TCC I			
Obtenção e Simulação da Rede			
Análise e Discussão dos Resultados			
Elaboração do Relatório de TCC II			
Ajustes Finais			
Apresentação do Relatório de TCC II			

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.](#)↵

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 Ni^{2+} - Cr^{3+} 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.](#)↵

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.** [linguagem em Python, Desenvolvido no Software Spyder]. GitHub, 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.](#)↵

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.](#)↵

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.](#)

MACKAY, D. J. C. **Bayesian Interpolation**, *Neural Comput.* v. 4, p. 415–447, 1992. [Link para o Artigo.](#)↵

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.](#)↵

MARQUARDT, D. W. **An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters**, *J. Soc. Ind. Appl. Math.* v. 11, n. 2, p. 431–441, 1963. [Link para o Artigo.](#)↵

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 Tese.](#)↵

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.; KLEVOULOU, 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.](#)↵

MILESKI, 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.

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.](#)↵

PATL, 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.](#)↵

VALERA, V. Y.; CODOLO, M. C.; MARTINS, T. D. **Artificial neural network for prediction of SO₂ removal and volumetric mass transfer coefficient in spray tower.** Chemical Engineering Research and Design, v. 170, p. 1-12, 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.](#)↵

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.](#)↵