

MODELAGEM DA CINÉTICA DA FERMENTAÇÃO DE MEL COM EXTRATO DE CASCA DE JABUTICABA VIA REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Thiago Puglia Ogata, Rafael Ramos de Andrade, Voluspa Michelle Jarpa Ramos, Gustavo Camanho Bender, Tiago Dias Martins

Universidade Federal de São Paulo, Diadema, Brasil (thiago.puglia@unifesp.br)

Resumo: O processo de fermentação do mel exige rigoroso controle operacional para atingir suas características desejáveis, tornando o estudo da cinética fermentativa essencial para otimizar a produção. Neste trabalho, empregaram-se redes neurais para modelar a cinética de fermentação de mel com extrato de casca de jabuticaba a 25 °C, utilizando as concentrações de células, substrato e etanol, de forma que, a partir dos valores iniciais, obtém-se a curva cinética até o fim do processo.

Palavras-chave: inteligência artificial; cinética; fermentação alcoólica; bebidas.

INTRODUÇÃO

O hidromel é uma bebida fermentada obtida a partir da fermentação dos açúcares presentes em um mosto de mel e água. Seu consumo remonta à antiguidade, sendo associado a povos como vikings, gregos e romanos. Atualmente, é comercializado como bebida fermentada fina de alto valor agregado, com variações que incluem a adição de extratos de frutas ao mosto, visando benefícios à fermentação e maior diversidade de aromas (Gardezani, 2025).

A jabuticaba, fruto da jabuticabeira (*Myrciaria cauliflora*), apresenta elevada concentração de compostos fenólicos, com destaque para as antocianinas presentes em sua casca. Essa fração do fruto, frequentemente descartada após o consumo da polpa, constitui uma matéria-prima de interesse biotecnológico (Fernandes, 2020). A incorporação do extrato da casca (casca triturada com água e posteriormente separada) ao mosto fermentativo pode agregar valor ao processo, uma vez que esses compostos podem sofrer transformações bioquímicas durante a fermentação, originando metabólitos de maior bioatividade (Quatrin et al, 2020). Além disso, a presença dessas substâncias pode contribuir para características desejáveis do produto, como coloração, perfil antioxidante e complexidade sensorial, além de potencial influência sobre o metabolismo microbiano ao longo da fermentação.

Dessa forma, a modelagem da cinética fermentativa do mosto contendo extrato de casca de jabuticaba se torna relevante, uma vez que permite compreender o comportamento do processo e desenvolver estratégias de modelagem e controle operacional. Tal abordagem contribui para a condução adequada da fermentação, de modo a assegurar que o produto final apresente as

características de qualidade adequadas para sua comercialização (Costa, 2022).

Devido à complexidade dos processos microbianos de fermentação, a modelagem da cinética fermentativa é desafiadora quando realizada por modelos matemáticos tradicionais. Por exemplo, ao se considerar na cinética de crescimento da levedura, diversos foram propostos, como o de Monod, que simplifica a velocidade específica de crescimento do microrganismo considerando apenas a concentração de substrato, desconsiderando outros fatores relevantes ao metabolismo celular, como pH, temperatura e presença de inibidores (Monod, 1950).

Alternativamente, técnicas computacionais têm se tornado relevantes, com destaque para a aplicação de Redes Neurais Artificiais (RNAs), cuja principal capacidade é aprender o comportamento de um processo a partir da alimentação com dados experimentais.

As RNAs apresentam características como a capacidade de modelar sistemas não-lineares e generalizar o comportamento do processo, sendo capazes de prever tendências sem se ajustar estritamente aos dados de treinamento. Tais redes são estruturadas em camadas: uma de entrada, responsável por receber os dados iniciais, uma ou mais camadas ocultas, onde ocorre o processamento por meio de funções de ativação não-lineares e uma camada de saída, que fornece a resposta do modelo. (Haykin, 2009)

Conforme demonstrado por Bannoud et al (2021), a modelagem cinética da fermentação para produção de etanol apresentou resultados satisfatórios quando comparadas ao modelo proposto por Andrade et al. (2013), evidenciando a aplicabilidade das Redes

Neurais Artificiais na representação de sistemas cinéticos complexos. O uso de RNA mostrou-se adequado para descrever o comportamento dinâmico de um processo bioquímico não linear, como a produção fermentativa de etanol, permitindo capturar relações entre variáveis de processo que seriam de difícil representação por modelos fenomenológicos convencionais.

Nesse contexto, este trabalho propõe a modelagem da cinética de fermentação do mel com extrato de casca de jabuticaba utilizando uma rede neural artificial do tipo Multilayer Perceptron (MLP) de duas camadas com abordagem autorregressiva, visando representar o comportamento dinâmico e não-linear do processo.

Adicionalmente, buscou-se avaliar a influência da discretização temporal dos dados, analisando até que intervalo entre pontos experimentais ocorre perda significativa na capacidade da rede em acompanhar a tendência da cinética do processo.

MATERIAL E MÉTODOS

Os dados experimentais utilizados neste trabalho foram obtidos do projeto de iniciação científica de Voluspa (2025), que consistiu na produção de mel com adição de extrato de casca de jabuticaba com altas concentrações de células. O microrganismo empregado foi *Saccharomyces bayanus*, e as fermentações foram conduzidas em batelada à temperatura constante de 25 °C. Naquele trabalho 5 fermentações foram realizadas, totalizando 56 pontos experimentais. A Tabela 1 apresenta as faixas das concentrações de açúcar (S), microrganismos (X) e etanol (P) em função do tempo para as cinco fermentações.

Tabela 1. Faixa dos valores de tempo e concentrações de S, X e P de fermentação do mosto de cada ensaio.

	Tempo (h)	Açúcar (kg/m ³)	Células (kg/m ³)	Etanol (kg/m ³)
I	0 – 63	192,181 – 2,252	0,37 – 7,66	0 – 84,349
II	0 – 63	203,37 – 2,853	0,51 – 8,27	0 – 93,624
III	0 – 63	195,324 – 2,546	1,31 – 9,63	0 – 86,543
IV	0 – 63	195,957 – 2,527	2,29 – 18,83	0 – 86,279
V	0 – 63	195,919 – 2,575	2,91 – 10,05	0 – 87,884

A arquitetura com discretização temporal considera como entrada, além dos valores atuais das variáveis, valores em instantes anteriores, dessa forma, o modelo incorpora a dependência temporal do processo ao utilizar atrasos nas variáveis de entradas

para prever o comportamento do sistema ao longo do tempo (Haykin, 2009). Assim, neste trabalho, a rede receberá como entradas as concentrações de células (X), substrato (S) e etanol (P) nos instantes t e $t - 1$, a fim de prever a evolução da cinética fermentativa no instante $t + 1$.

Para a geração dos atrasos e o arranjo das variáveis de entrada, utilizou-se um arranjo de blocos no Simulink (MATLAB R2025a) com diferentes intervalos, para interpolar os dados experimentais e suavizar os dados. Foram gerados conjuntos com intervalos de 1 e 3 horas, totalizando 248 e 80 pontos respectivamente, a fim de avaliar a interferência da densidade de dados no desempenho da rede. Os dados do terceiro ensaio foram reservados para validação. A escolha foi realizada aleatoriamente. A Figura 1 apresenta o arranjo das variáveis de entradas e saídas da rede.

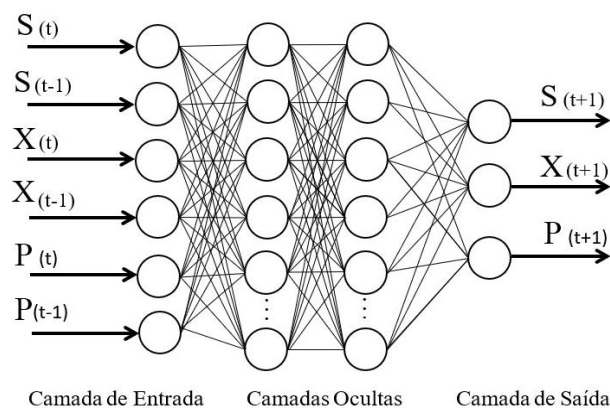


Figura 1. Representação esquemática da Rede Neural Artificial experimental.

Para uma RNA do tipo multi-layer perceptron (MLP) com duas camadas ocultas, a saída y_n é obtida a partir de sucessivas combinações lineares das entradas e saídas intermediárias, seguidas pela aplicação de funções de ativação não lineares. A saída de um neurônio em uma única camada pode ser expressa genericamente pela Equação 1.

$$y_1 = f \left(\sum_{i=1}^n w_{i1} * x_{i1} + b_{i1} \right) \quad (1)$$

Assim, x representa as variáveis de entrada dessa camada, y as variáveis de saída previstas, W os pesos das conexões entre os neurônios, e b os termos de polarização (bias) adicionados às combinações lineares em cada camada.

Os experimentos I, II, IV e V foram utilizados no desenvolvimento da RNA. Os dados foram divididos em treinamento (70%), teste (15%) e validação (15%). O experimento 3 foi reservado para validação externa, sendo utilizado como conjunto independente

para avaliar a capacidade de generalização do modelo.

Foram testadas combinações com 6 funções de ativação, representada pelas equações 2 a 7: a sigmoide tangente hiperbólica (2), a log-sigmoide (3), a linear (4), a de saturação simétrica (5), base radial (6), e a base radial normalizada (7), sendo n a entrada para as funções de ativação.

$$\text{tansig}(n) = \frac{2}{1 + e^{-2n}} \quad (2)$$

$$\text{logsig}(n) = \frac{1}{1 + e^{-n}} \quad (3)$$

$$\text{purelin}(n) = n \quad (4)$$

$$\text{satlins}(n) = -1 \text{ (se } n \leq -1) \\ n \text{ (se } -1 \leq n \leq 1) \text{ ou } 1 \text{ (se } 1 \leq n) \quad (5)$$

$$\text{radbas}(n) = e^{-n^2} \quad (6)$$

$$\text{radbasn}(n) = \frac{e^{-n^2}}{\sum e^{-n^2}} \quad (7)$$

O número de neurônios utilizados nas camadas intermediárias é um múltiplo de 5, variando de 5 a 35 na primeira camada e de 5 a 20 na segunda camada.

O treinamento da RNA consiste no ajuste dos pesos sinápticos por meio de um algoritmo de otimização, com o objetivo de minimizar a função objetivo, representada pelo erro quadrado médio, conforme a Equação 8. O algoritmo de aprendizagem utilizado foi o de Levenberg-Marquardt (*trainlm*) e todos os cálculos foram realizados no MATLAB R2025a.

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_{RNA} - y_{exp})^2}{n} \quad (8)$$

onde y_{exp} é o valor real fornecido a rede, y_{RNA} é o valor estimado pela rede e n é o número total de dados experimentais fornecidas a rede.

Por fim, realizou-se uma etapa de simulação para obtenção do perfil completo da cinética da fermentação III, permitindo a comparação com os dados experimentais. Para realizar essa simulação a partir da RNA treinada, forneceu-se os valores de X, S e P nos tempos 0 e 1 h (ou 3 h), e a partir disso a RNA era capaz de gerar o perfil completo da cinética retroalimentando a saída calculada como entrada.

O desempenho das redes neurais artificiais foi avaliado por meio do erro médio percentual absoluto (MAPE), onde menores valores indicam uma maior fidelidade dos valores gerados pelas RNAs aos valores experimentais, conforme a Equação 9.

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|y_{exp} - y_{RNA}|}{y_{exp}} \times 100 \quad (9)$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As Tabelas 2 e 3 apresentam os valores calculados para os três melhores arranjos de RNAs com intervalo de tempo de 1 h e 3 h respectivamente.

Dessas Tabelas, pode-se perceber que o desempenho da RNA cujo intervalo de tempo foi de 1 h foi superior às RNAs com intervalo de tempo de 3 h. Isso mostra que a escolha de um intervalo de tempo adequado para o treinamento é crucial para se ter um bom resultado.

Tabela 2. Resultados obtidos para as 3 melhores RNAs com Δt igual a 1.

	Funções de Ativação	Estutura da RNA	MAPE Simulação (%)	F _{obj} Treino
I	tansig-logsig-tansig	6-30-10-3	10,58	0,30
II	logsig-tansig-tansig	6-35-20-3	13,17	0,39
III	logsig-tansig-tansig	6-15-20-3	13,90	0,35

Tabela 3. Resultados obtidos para as 3 melhores RNAs com Δt igual a 3.

	Funções de Ativação	Estutura da RNA	MAPE Simulação (%)	F _{obj} Treino
I	logsig-logsig-tansig	6-35-20-3	15,79	1,79
II	tansig-logsig-purelin	6-25-10-3	17,15	2,56
III	tansig-tansig-purelin	6-25-20-3	17,70	1,80

As Figuras 2 e 3 apresentam o perfil cinético obtido pelas melhores RNAs na etapa de validação externa para as RNAs com Δt iguais 1 e 3, respectivamente..

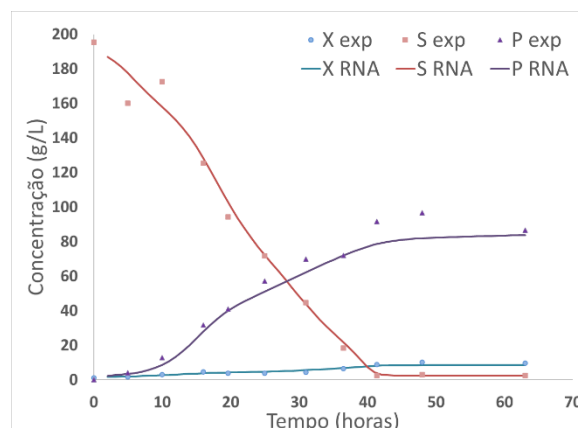


Figura 2. Perfil cinético obtida para a melhor estrutura com Δt de 1.

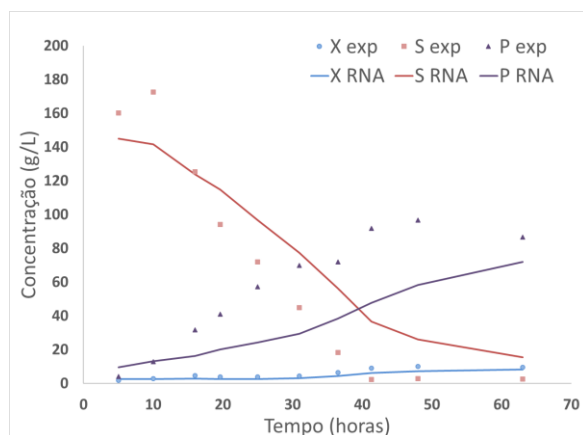


Figura 3. Perfil cinético obtida para a melhor estrutura com Δt de 3.

Pode-se notar que a RNA treinada com a configuração tansig-logsig-tansig (6-30-10-3) e intervalo $\Delta t = 1$ (Figura 2) apresentou bom desempenho, sendo capaz de prever a tendência das curvas cinéticas sem ser afetada por variações de pontos discrepantes decorrentes da variabilidade experimental. Já, a rede treinada com a configuração logsig-logsig-tansig (6-35-20-3) e intervalo $\Delta t = 3$ não foi capaz de prever a tendência, apresentando elevada variação em relação aos pontos experimentais, demonstrando que a perda de precisão ocorre de forma análoga a métodos numéricos iterativos, nos quais Δt maiores resultam em acúmulo de erros a cada retroalimentação.

CONCLUSÃO

No presente trabalho, foram utilizadas RNAs para modelar a cinética fermentativa do mel com extrato de casca de jaboticaba. A melhor estrutura obtida apresentou erro médio relativo de 10,58%, demonstrando capacidade de prever a tendência de uma cinética complexa e não linear, como a observada em processos fermentativos. Foi possível evidenciar a capacidade de generalização da RNA, configurando-a como uma alternativa à modelagem fenomenológica. Além disso, conclui-se que, embora o aumento do intervalo de tempo reduza o custo computacional em razão da diminuição da quantidade de dados de treinamento, tal abordagem não se mostra viável para cinéticas complexas e não lineares, como as de processos microbiológicos.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos à FAPESP pelo apoio financeiro para esta pesquisa. Processos N° 2023/13835-5 e 2024/06851-7.

REFERÊNCIAS

- Al Bannoud et al. Modelagem cinética da fermentação alcoólica integrando primeira e segunda geração utilizando redes neurais artificiais. Workshop de engenharia química (WENDEQ), 2021.
- Andrade et al. Kinetics of ethanol production from sugarcane bagasse enzymatic hydrolysate concentrated with molasses under cell recycle. *Bioresource Technology*, v. 130, p. 351-359, 2013.
- Costa, B. S. G. Produção de hidromel com adição de casca de jaboticaba: influência dos parâmetros fermentativos, qualidade da bebida e concentração de antocianinas. 2022. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Química) – Instituto de Ciências Ambientais, Química e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, 2022.
- Fernandes et al. Ultrasound-assisted extraction of anthocyanins and phenolics from jaboticaba (*Myrciaria cauliflora*) peel: kinetics and mathematical modeling. *Journal of Food Science and Technology*, 2020.
- Gardezani, O. P. Sensor virtual para monitoramento da fermentação de hidromel com adição de extrato de casca de jaboticaba aplicando redes neurais artificiais. 2025. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) – Instituto de Ciências Ambientais, Química e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, 2025.
- Haykin, S. Neural networks and learning machines. 3. ed. Upper Saddle River: Pearson Education, 2009.
- Monod, J. La technique de culture continue: théorie et applications. *Annales de l'Institut Pasteur*, v. 79, n. 4, p. 390–410, 1950.
- Quatrin et al. Bioaccessibility and catabolism of phenolic compounds from jaboticaba (*Myrciaria trunciflora*) fruit peel during in vitro gastrointestinal digestion and colonic fermentation. *Journal of Functional Foods*, v. 65, 2020. DOI: 10.1016/j.jff.2019.103714.
- Ramos, V. M. J. Desenvolvimento de uma rede neural artificial para a produção de um hidromel com adição de extrato de casca de jaboticaba em altas concentrações de células. Relatório Científico apresentado à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) 2025.