

Comparação entre Modelos Fenomenológicos e Empíricos no Processo Fermentativo para Produção de Cerveja Artesanal: Cinética de Monod *versus* Redes Neurais Artificiais

Virgínia Maria Pereira de Melo Macêdo^{a*}, Aline Bezerra César de Assis^{a*}, Leonardo Machado Cavalcanti^a, Mário Gomes da Silva Júnior^a, Hilário Jorge Bezerra de Lima Filho^a, Fábio Machado Cavalcanti^b

^aUniversidade Católica de Pernambuco (Unicap), Escola de Tecnologia e Comunicação, Recife-PE, Brasil

^bUniversidade Federal de Pernambuco (UFPE), Departamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências, Instituto de Pesquisa em Petróleo e Energia (i-LITPEG), Laboratório de Refino e Tecnologias Limpas (LabRefino/LATECLIM), Recife-PE, Brasil

* viirginia_melo@outlook.com

RESUMO

A fermentação alcoólica é um processo fundamental na produção de cerveja, cujo desempenho depende de variáveis como concentração de substrato, células e produtos ao longo do tempo. Neste trabalho, dois modelos matemáticos foram desenvolvidos para descrever esse comportamento: um modelo fenomenológico, baseado na cinética de Monod, e um outro modelo empírico de redes neurais artificiais. O modelo fenomenológico apresentou excelente ajuste aos dados experimentais e maior sensibilidade às variações das condições operacionais. Por outro lado, a rede neural demonstrou bom desempenho global, porém com limitações na análise de ensaios individuais, possivelmente associadas à baixa quantidade de dados disponíveis para o treinamento do modelo. Os resultados evidenciam a superioridade do modelo fenomenológico na representação do processo fermentativo, devido à sua capacidade de descrever explicitamente os mecanismos cinéticos envolvidos e de responder de forma mais consistente às variações das condições operacionais.

Palavras-chave: Modelagem Matemática; Fermentação Alcoólica; Cinética de Monod; Redes Neurais Artificiais.

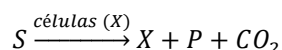
1. Introdução

A cerveja é uma das bebidas mais antigas da humanidade, com indícios de sua produção a aproximadamente 8.000 a.C., especialmente nas regiões do Oriente Médio. Marcusso (2024) destaca o impacto econômico da indústria cervejeira, onde até os dias de hoje apresenta uma significativa influência, principalmente na economia nacional. Inicialmente, ela era obtida a partir da fermentação espontânea de açúcares presentes nos cereais, mas, com o tempo, passou a ser produzida com o auxílio da levedura *Saccharomyces cerevisiae*, cuja introdução aprimorou a qualidade da bebida (Rabello, 2009). O termo "cerveja" tem origem na palavra *cerevisia*, relacionada às culturas Gaulesa (França) e Romana (Itália), como referência à fertilidade e à colheita dos cereais (Barbosa, 2018).

Hoje, a produção de cerveja tem sido realizada por meio da fermentação alcoólica de açúcares presentes no mosto, utilizando água potável e a ação das leveduras. Amorim et al (1996) indicaram também a adição de lúpulo, que é um dos principais componentes da sua formulação, responsável por conferir aroma e sabor característicos à bebida.

A fermentação alcoólica consiste em um processo biológico em que açúcares como glicose, frutose e sacarose são convertidos em biomassa microbiana, resultando na produção de etanol e dióxido de carbono como subprodutos metabólicos (Lima et al., 2001). Esse fenômeno, conhecido como glicólise, ocorre na ausência de oxigênio, sendo classificado como um processo anaeróbico.

Nesse contexto, a levedura atua como um organismo vivo independente, realizando a conversão dos açúcares para obtenção de energia química necessária à sua sobrevivência, sendo o etanol um subproduto desse metabolismo (Amorim et al., 1996). A energia liberada durante a fermentação é essencial tanto para a manutenção celular quanto para a formação de novas células. Esse processo pode ser representado de forma simplificada por meio da seguinte reação:



Nessa reação, que foi apresentada por Floger (2019), S representa o substrato limitante, fonte de alimento para o microrganismo (X), normalmente uma fonte de carbono, como sacarose, glicose ou frutose. A partir deles,

a levedura realiza a fermentação anaeróbica, promovendo a formação de novas células (X), do produto, que é o etanol (P) e CO₂.

A cinética de crescimento celular em processos de fermentação é influenciada por diversos fatores, como a disponibilidade de substrato e a presença de inibidores. Andrietta (1994) observou que a busca por maior eficiência na produção da cerveja envolve o controle rigoroso de variáveis como pH, temperatura, teor alcoólico e concentração de resíduos fermentáveis, além da necessidade de garantir a qualidade da espuma e demais características sensoriais. Para modelar esse crescimento, diferentes abordagens podem ser utilizadas, sendo os modelos fenomenológicos e empíricos os mais comuns devido à sua simplicidade e aplicabilidade geral.

Nesse contexto, a implementação de modelos dinâmicos de Monod com parâmetros cinéticos bem ajustados torna-se essencial para a otimização do processo fermentativo. Esse tipo de abordagem oferece uma descrição matemática baseada em princípios físico-químicos e biológicos. Por outro lado, as redes neurais artificiais (RNA) têm se destacado como uma alternativa empírica promissora na modelagem de bioprocessos, devido à sua capacidade de aprender padrões complexos e realizar previsões com alto grau de precisão (Nucci et al., 2007).

Diante disso, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver e comparar dois modelos matemáticos aplicados ao processo de fermentação alcoólica, investigando os efeitos das concentrações de células, substrato e produtos ao longo do tempo. Para isso, propôs-se a construção de um modelo fenomenológico, fundamentado nos mecanismos cinéticos de Monod e nas variáveis relevantes do processo fermentativo. Paralelamente, foi implementado um modelo baseado em redes neurais artificiais, com o intuito de prever e analisar o comportamento das variáveis envolvidas. Por fim, foi realizada uma comparação entre os modelos desenvolvidos, visando identificar aquele que apresentou maior eficiência e aplicabilidade na representação do processo de fermentação alcoólica.

2. Metodologia

Para a realizar o presente trabalho, foi utilizada a linguagem de programação Python, ferramenta computacional que é bastante utilizada na área de aprendizado de máquina, por meio da facilidade de aprendizagem, disponibilidade de bibliotecas, e uso geral. Os dados experimentais utilizados neste trabalho foram extraídos de Carneiro e Bovolini (2020), totalizando 16 ensaios, com um total de 132 linhas de dados em diferentes condições de temperaturas (T), concentrações iniciais de substrato (S₀) e de células (X₀). Na Tabela 1, são mostradas as condições de três ensaios que foram analisadas neste estudo.

Tabela 1. Ensaios utilizados dos processos fermentativos de Carneiro e Bovolini (2020).

Ensaio	T	S ₀	X ₀	tempo (h)
1	34	100	50	1- 3
2	28	100	37,5	1- 3
11	31	20	25	1- 2

2.1. Modelo Fenomenológico

Este modelo fundamenta-se em Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) que descrevem a dinâmica em relação ao tempo (t) das concentrações de substrato (S), células (X) e produto (P), por meio do desenvolvimento de balanços de massa de um fermentador em batelada, conforme Equações 1-3.

$$\frac{dS}{dt} = -r_g Y_{sx} - r_{sm} \quad (1)$$

$$\frac{dX}{dt} = r_g \quad (2)$$

$$\frac{dP}{dt} = r_g Y_{px} + r_{pm} \quad (3)$$

Em que r_g significa a taxa de crescimento celular (g/L.s), r_{sm} a taxa de substrato consumido para manutenção celular (g/L.s), r_{pm} a taxa de produção de etanol associada à quantidade de células (g/L.s), Y_{sx} o rendimento substrato-células e Y_{px} o rendimento produto-células.

Segundo Fogler (2019), a cinética de crescimento celular em processos de fermentação é influenciada por diversos fatores, como a disponibilidade de substrato e a presença de inibidores. A equação utilizada para descrever a taxa de crescimento celular, r_g , foi baseada em um modelo de Monod que, além de considerar a inibição pelo

substrato e pelo produto, também levou em conta a inibição causada pela alta concentração de células, o que é uma realidade comum em processos fermentativos, conforme Equação 4.

$$r_g = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \exp(-K_i S) \left(1 - \frac{X}{X_{max}}\right)^m \left(1 - \frac{P}{P_{max}}\right)^n X \quad (4)$$

Onde μ_{max} é a taxa específica de crescimento celular máximo (s^{-1}), K_s é a constante de Monod (g/L), K_i é o fator de inibição pelo substrato (L/g), X_{max} é a concentração máxima de células na qual o metabolismo cessa (g/L), m é o expoente de inibição celular, P_{max} é a concentração máxima de produto na qual o metabolismo cessa (g/L), e n é o expoente da inibição pelo produto.

Ressalta-se, ainda, que as taxas de substrato consumido para manutenção celular, r_{sm} , e a taxa de produção de etanol associada à quantidade de células, r_{pm} , foram representadas pelas Equações 5 e 6, respectivamente. Os termos m_s e m_p são constantes empíricas que representam a manutenção celular (Carneiro e Bovolini, 2020).

$$r_{sm} = m_s \cdot X \quad (5)$$

$$r_{pm} = m_p \cdot X \quad (6)$$

Para a resolução numérica do sistema de EDOs (Equações 1-3), utilizou-se a função *odeint*, da biblioteca *scipy.integrate*, que permitiu simular a dinâmica do crescimento celular ao longo do tempo. No estudo de ajuste do modelo, alguns parâmetros cinéticos foram previamente fixados com base na literatura, enquanto outros foram estimados a partir dos dados experimentais. A Tabela 2 apresenta os valores dos parâmetros fixos adotados, conforme Carneiro e Bovolini (2020).

Tabela 2. Parâmetros fixos utilizados na modelagem (Carneiro e Bovolini, 2020).

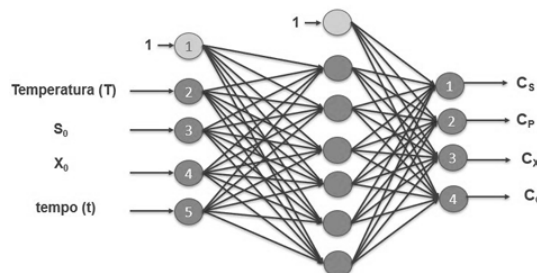
Parâmetros fixos	Valores
K_s	3,1
K_i	0,003
m	1
n	1,5
m_p	0,05
m_x	0,15

Dessa forma, cinco parâmetros, μ_{max} , X_{max} , P_{max} , Y_{xs} e Y_{px} , foram estimados utilizando a função *curve_fit* importada da biblioteca *scipy.optimize*, com objetivo de ajustar a curva do modelo aos pontos experimentais de cada ensaio da Tabela 1, utilizando o método dos mínimos quadrados (Virtanen et al., 2020).

2.2. Redes Neurais Artificiais

Neste trabalho, foram utilizadas redes neurais artificiais do tipo *feedforward* multicamadas. Elas são formadas por camadas de neurônios conectadas entre si, onde os dados entram pela camada de entrada, passam por uma ou mais camadas ocultas e a resposta é dada pela camada de saída. Para as variáveis de entrada, utilizou-se a Temperatura (T), Concentração Inicial de Substrato (S_0), Concentração Inicial de Células (X_0) e o Tempo (t). Enquanto, para as variáveis de saída, foram consideradas: Concentração de Substrato (C_s), Concentração de Produto (C_p), Concentração da Glicerol (C_g) e Concentração Celular (C_x). A Figura 1 representa um esquema de uma rede neural baseada nas variáveis de entrada e saída adotadas, com uma única camada oculta.

Figura 1. Esquema simplificado da Rede Neural utilizada para modelagem do processo fermentativo



Fonte: (ASSIS, 2023)

O conjunto de dados foi dividido em dois subconjuntos: um para treinamento, que correspondeu a 80% dos dados, e outro para validação, que representou os 20% restantes, distribuídos de forma aleatória. Para assegurar uma maior estabilidade e eficiência durante o treinamento, foi realizada a normalização dos dados, utilizando a Equação 7, o que garantiu que as variáveis ficassem no intervalo de 0 a 1.

$$X_{normalizado} = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \quad (7)$$

Para a construção da rede neural, foi utilizado o modelo *Sequential* da biblioteca *Keras*, com doze neurônios na camada oculta. Após o treinamento da rede, foram realizadas previsões com os dados de treino e de teste de cada ensaio. A performance do modelo foi avaliada por meio do coeficiente de determinação (R^2), calculado com a métrica *r2_score* da biblioteca *scikit-learn*.

3. Resultados

3.1. Modelo Fenomenológico

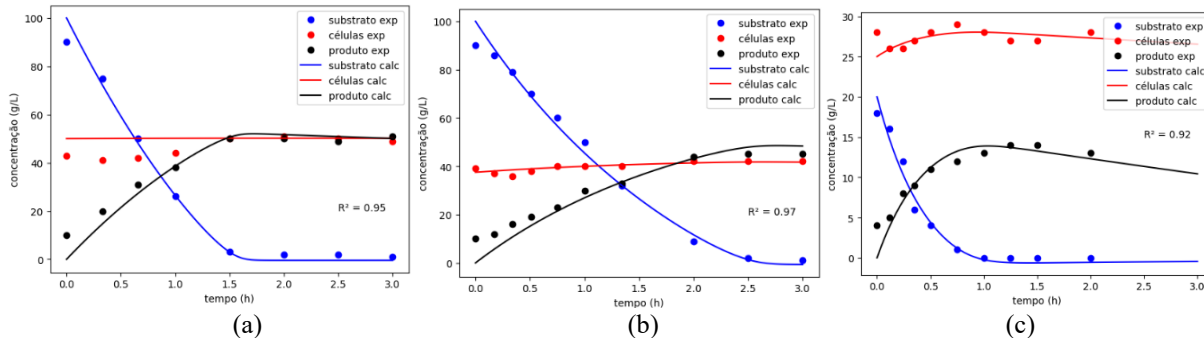
Os resultados obtidos na estimação dos parâmetros foram compilados na Tabela 3.

Tabela 3. Parâmetros estimados do modelo fenomenológico da cinética de Monod para cada ensaio.

Ensaio	μ_{max}	X_m	P_m	Y_{px}	Y_{xs}
1	1,82E+06	6,51E+09	1,13E+10	2,96E+10	1,85E+05
2	6,16E+07	4,66E+09	1,07E+10	1,01E+09	5,08E+06
11	4,36E+07	4,77E+11	2,24E+09	4,15E+08	1,87E+07

Com os parâmetros obtidos, foram realizadas simulações para prever a evolução das concentrações ao longo do tempo, cujos resultados foram comparados aos dados experimentais. Essa comparação permitiu avaliar a qualidade do ajuste do modelo, sendo os resultados apresentados na Figura 2, referentes aos Ensaios 1, 2 e 11, respectivamente.

Figura 2. Perfil temporal das concentrações de substrato, células e produto nos ensaios 1(a), 2(b) e 11(c), utilizando o modelo fenomenológico da cinética de Monod com parâmetros estimados para cada ensaio.



Em todos os ensaios, as curvas acompanharam de maneira satisfatória a tendência dos dados experimentais. Devido a isso, o coeficiente de determinação se manteve acima de 0,90 nos três experimentos ($R^2 > 0,90$) o que indica um satisfatório ajuste do modelo aos dados experimentais e reforça a capacidade do modelo em representar o comportamento do crescimento microbiano e evolução das concentrações de substrato e produto nas condições testadas.

Observando esses resultados é possível visualizar também que a temperatura exerce uma influência significativa sobre o valor de μ_{max} . O maior valor de μ_{max} foi registrado no Ensaio 2, realizado a 28°C, com $4,36 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$. À medida que a temperatura é elevada para 31°C, no ensaio 11, o valor de μ_{max} cai para $4,36 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, e quando a temperatura atinge 34°C, no ensaio 1, a atividade microbiana é afetada, resultando em um valor de μ_{max} extremamente baixo de $1,82 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$.

Esses resultados indicam que temperaturas elevadas comprometem o crescimento dos microrganismos. Madigan et al. (2018) relatam que cada organismo possui uma faixa ótima de temperatura para crescimento, e que a exposição a temperaturas superiores a esse intervalo pode causar desnaturação de proteínas, desestabilização de membranas e morte celular. Assim, Jay (2005) demonstrou experimentalmente que essa faixa de temperatura ideal para maximizar o crescimento microbiano varia entre 20°C e 37°C para organismos mesófilos. No entanto, mesmo

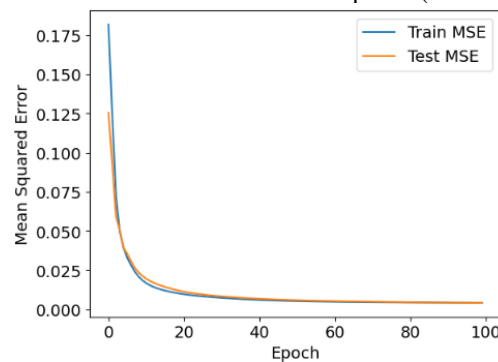
dentro dessa faixa, o crescimento máximo ocorre em uma temperatura ótima específica, sendo reduzido à medida que há afastamento desse valor.

Além disso, é importante destacar que outros fatores experimentais também podem ter influenciado os valores de μ_{max} observados. Variáveis de concentração inicial de substrato (S_0), concentração celular inicial (X_0) e o intervalo de tempo analisado se diferem entre os ensaios, podendo impactar diretamente a cinética de crescimento microbiano.

3.2. Redes Neurais Artificiais

A partir da base de dados de todos os ensaios, foi obtido o gráfico do Erro Quadrático Médio (MSE – *Mean Squared Error*) ao longo das épocas de treinamento, podendo ser visualizado na Figura 3. O MSE é utilizado para visualizar o desempenho do modelo ao longo do treinamento e da validação.

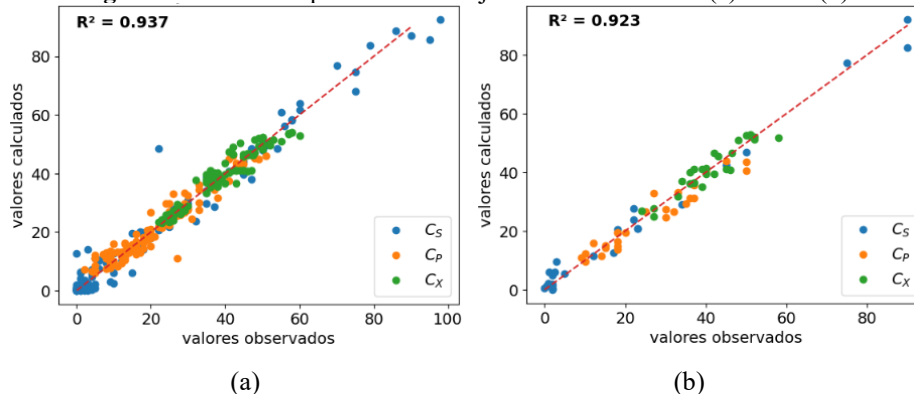
Figura 3. Gráfico do MSE *versus* número de épocas (*Mean Squared Error*).



Observa-se que, com o aumento do número de épocas, tanto o MSE do treinamento quanto o do teste convergem para valores baixos, indicando que o modelo está aprendendo rapidamente a partir dos dados e possui adequada capacidade preditiva para novos dados dentro do domínio de estudo.

Na Figura 4, são apresentados os gráficos de paridade, fazendo-se uma comparação entre os valores observados e os valores calculados pelo modelo para as variáveis de saída, considerando o conjunto de treinamento e de teste com todos os 16 ensaios (132 dados experimentais) descritos por Carneiro e Bovolini (2020). Observa-se um adequado ajuste do modelo, onde o coeficiente de determinação para o treinamento foi de $R^2 = 0,937$, e para o teste de $R^2 = 0,923$.

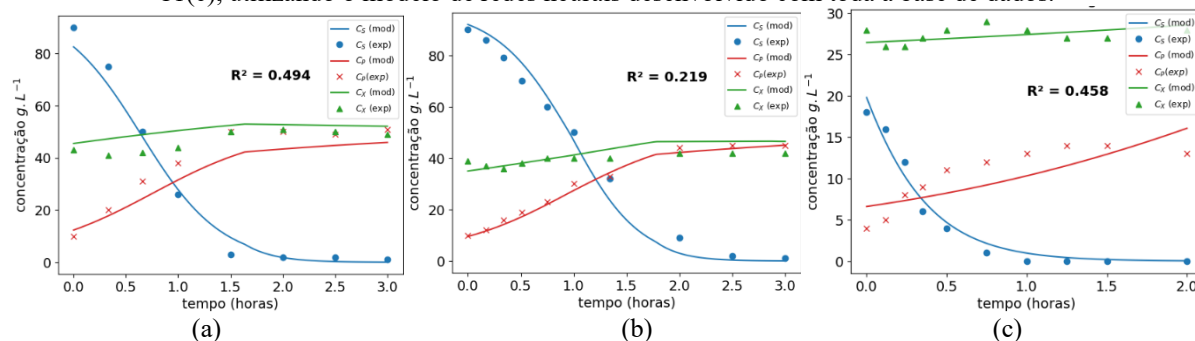
Figura 4. Gráfico de paridade do conjunto de treinamento (a) e teste (b).



Entretanto, ao analisarmos individualmente os ensaios escolhidos (Tabela 1), observa-se que a correlação entre os valores previstos pela rede e os experimentais foi limitada. Os coeficientes de determinação foram de 0,494, 0,219 e 0,458 para os ensaios 1, 2 e 11, respectivamente, o que indica uma redução na capacidade preditiva da rede neural. Visualmente, é possível notar uma discrepância entre as curvas modeladas e os pontos experimentais, principalmente para as concentrações de produto e substrato, o que pode sugerir uma capacidade menor do modelo em capturar o comportamento do sistema sob determinadas condições operacionais. Entretanto,

percebe-se que o modelo é capaz de capturar, ao menos de forma qualitativa, a tendência de evolução temporal das variáveis de saída.

Figura 5. Perfil temporal de predição das concentrações de substrato, células e produto nos ensaios 1(a), 2(b) e 11(c), utilizando o modelo de redes neurais desenvolvido com toda a base de dados.



4. Conclusão

Concluiu-se assim que a rede neural, modelo empírico, treinada com todos os 16 ensaios experimentais, apresentou bom desempenho geral, com coeficiente de determinação acima de 0,90, indicando bom desempenho preditivo. No entanto, quando aplicada a ensaios específicos, sua performance caiu significativamente, com valores de R^2 abaixo de 0,50, mostrando assim, limitações em captar com precisão variações do processo em determinadas condições operacionais.

Enquanto o modelo fenomenológico demonstrou desempenho satisfatório levando em conta a estimação de parâmetros para cada ensaio individual analisado, com $R^2 > 0,90$ em todos os casos, mostrando assim maior sensibilidade em captar às mudanças nas condições operacionais. Logo, os resultados indicam que, embora a rede neural apresente bom desempenho em análises globais com grandes volumes de dados, o modelo fenomenológico é mais apropriado para estudos detalhados caso a caso, por oferecer maior precisão na representação do comportamento cinético-biológico do sistema.

Referências

- Amorim, H. V., Basso, L. C., & Alves, D. M. G. (1996). Processos de produção de álcool. Centro de Biotecnologia Agrícola.
- Andrietta, S. R. (1994). Modelagem, simulação e controle de fermentação alcoólica contínua em escala industrial (Tese de doutorado, Universidade Estadual de Campinas).
- Assis, A. B. C. (2023). Modelagem cinética de processo fermentativo para produção de cerveja (Trabalho de conclusão de curso, Universidade Católica de Pernambuco).
- Barbosa, L. M. (2018). A produção de cerveja ao longo da história (Trabalho de conclusão de curso, Instituto Federal de São Paulo).
- Carneiro, L. G., & Bovolini, A. G. (2020). Modelagem matemática do processo de fermentação alcoólica em batelada com alta densidade celular: Efeito da concentração de substrato, células e temperatura nos parâmetros cinéticos (Trabalho de conclusão de curso, Universidade de São Paulo).
- Fogler, H. S. (2019). Elementos de engenharia das reações químicas (5ª ed.). LTC.
- Lima, U. A., Aquarone, E., Borzani, W., & Schmidell, W. (2001). Biotecnologia industrial: Processos fermentativos e enzimáticos (Vol. 3). Edgard Blucher.
- Marcusso, E. F. (2024). Anuário da cerveja 2024: Ano de referência 2023. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento.
- Rebello, F. D. F. P. (2009). Produção de cerveja. Revista Agrogeoambiental, 1(3).
- Virtanen, P., et al. (2020). SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python. Nature Methods, 17, 261–272.