



MODELAGEM MATEMÁTICA DAS ISOTERMAS DE EQUILÍBRIO DO FARELO DE SOJA: COMPARAÇÃO ENTRE REDE NEURAL ARTIFICIAL E REGRESSÃO NÃO-LINEAR¹

Amanda Tirloni Dellay², Maurício de Campos³, Marcia de Fatima Brondani Binelo⁴,
Manuel Osorio Binelo⁵

¹ Trabalho realizado na disciplina de Modelagem Matemática do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional - Unijuí

² Estudante do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional - Unijuí

³ Prof. Dr. do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional - Unijuí

⁴ Profa. Dra. do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional - Unijuí

⁵ Prof. Dr. do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional - Unijuí

RESUMO

O farelo de soja tem grande relevância para o agronegócio brasileiro. A secagem do farelo de soja durante o período de armazenamento é importante para manter sua qualidade. Nesse processo, é fundamental conhecer o teor de umidade do produto e a umidade relativa do ar para otimizar parâmetros como temperatura, tempo e fluxo de ar. Assim, as isotermas descrevem a relação de equilíbrio entre a umidade do produto e a umidade relativa do ar a partir de curvas determinadas por modelos matemáticos e computacionais. Nesse contexto, o objetivo desse trabalho foi desenvolver uma Rede Neural Artificial para avaliar sua eficácia na modelagem das isotermas de equilíbrio do farelo de soja, e posteriormente comparar com os resultados obtidos por regressão não-linear. Os dados utilizados foram obtidos do experimento com farelo de soja desenvolvido por Luz *et al.* (2006). A rede neural foi estruturada com três camadas (entrada, oculta e saída). Como variáveis de entrada foram utilizadas a temperatura e a umidade relativa do ar e como variável resposta a umidade de equilíbrio. Para construir a rede neural, utilizou-se a linguagem de programação *Python* no ambiente colaborativo *Google Colaboratory*. O estudo concluiu que para os dados experimentais utilizados, o ajuste realizado pela Rede Neural Artificial obteve superioridade.

Palavras-chave: Isotermas. Farelo de soja. Redes Neurais Artificiais. Regressão não-linear.

ABSTRACT

Soybean meal is of great relevance to Brazilian agribusiness. Drying soybean meal during the storage period is important to maintain its quality. In this process, it is essential to know the moisture content of the product and the relative humidity of the air to optimize parameters such as temperature, time and air flow. Thus, isotherms describe the equilibrium relationship between the relative humidity of the air and the humidity of the product based on curves determined by mathematical and computational models. In this context, the objective of this work was to develop an Artificial Neural Network to evaluate its effectiveness in modeling soybean meal equilibrium isotherms, and subsequently compare it with the results obtained by non-linear regression. The data used were obtained from the experiment with soybean meal developed by Luz *et al.* (2006). The neural network was structured with three layers (input, hidden and output). Temperature and relative humidity were used as input variables and equilibrium humidity as a response variable. To build the neural network, the Python



programming language was used in the collaborative environment Google Colaboratory. The study concluded that for the experimental data used, the adjustment performed by the Artificial Neural Network was superior.

Keywords: Isotherms. Soybean meal. Artificial Neural Networks. Non-linear regression.

INTRODUÇÃO

O estudo do farelo de soja é de grande importância, visto que este é um produto da indústria de processamento da soja muito valorizado por suas propriedades nutricionais e pelo alto valor econômico, ocupando lugar de destaque no mercado interno e externo como ração animal e suplemento alimentar humano (Silva, 2012).

A secagem do farelo de soja é realizada para a conservação da qualidade do produto, com o intuito de evitar a presença de problemas como crescimento de fungos ou deterioração. Ao longo desse processo, o teor de umidade e a umidade relativa do ar se alteram. Quando a umidade relativa do ar é a mesma do teor de umidade do produto, encontra-se o ponto de equilíbrio, ou seja, a taxa de adsorção é a mesma da taxa de desorção, não há ganho e nem perda de umidade (Luz, 2006; Corrêa, 2011). Conhecer a umidade de equilíbrio do produto e a umidade relativa do ar é essencial para controlar e otimizar o processo de secagem, afim de garantir a qualidade do produto e a eficiência energética, e com isso desenvolver um modelo de secagem mais preciso (Luz, 2006; Corrêa, 2011).

As isotermas são fundamentais para compreender o comportamento higroscópico de alimentos, descrevem a relação de equilíbrio entre a umidade relativa do ar e a umidade do produto a partir de curvas determinadas por modelos ou equações matemáticas (Marcinkowki, 2006; Corrêa, 2011).

A modelagem matemática é um instrumento que consiste no processo de transformar problemas da realidade em linguagem matemática com o intuito de representar, simular e prever o comportamento de sistemas complexos para facilitar a análise e resolução de problemas (Bassanezi, 2002; Henrichsen, 2019).

No processo de secagem do farelo de soja, a modelagem permite otimizar parâmetros como temperatura, tempo e fluxo de ar. Isso possibilita maximizar a eficiência energética e preservar a qualidade nutricional do produto, visando simular diferentes condições operacionais, permitindo fazer perspectivas futuras para auxiliar na tomada de decisões,



Tabela 1. Dados experimentais da umidade de equilíbrio (X_e) em função da umidade relativa do ar (UR)

50 °C		60 °C		70 °C	
UR	X_e	UR	X_e	UR	X_e
0.111	0.034	0.110	0.029	0.109	0.023
0.192	0.046	0.179	0.035	0.166	0.033
0.433	0.068	0.433	0.078	0.433	0.141
0.594	0.106	0.574	0.101	0.554	0.093
0.744	0.185	0.741	0.172	0.738	0.184
0.799	0.240	0.782	0.233	0.765	0.221

Fonte: Luz *et al.* (2006).

Para construir a rede neural, utilizou-se a linguagem de programação *Python* no ambiente colaborativo Google *Colaboratory*. No código de programação, foram utilizadas as bibliotecas *Numpy* para operações matriciais, *NeuroLab* para a criação da RNA e o *Matplotlib* para a visualização dos dados.

Inicialmente, a variável temperatura foi normalizada linearmente, para que assim, todos os dados pertencessem ao mesmo intervalo de 0 a 1 (Miguel *et al.*, 2015). Definiu-se que a camada de entrada teria dois neurônios (umidade relativa e temperatura), e um neurônio na camada de saída (umidade de equilíbrio).

A rede foi estruturada com uma camada oculta, onde a escolha do número de neurônios nesta camada foi determinada através de experimentos, onde buscou-se uma rede com poucos neurônios escondidos e com um bom poder de generalização (Santos *et al.*, 2005; Silva *et al.*, 2022). Posteriormente, definiu-se uma rede neural com dois neurônios escondidos, pois apresentou um bom poder de generalização.

O conjunto de dados foi dividido aleatoriamente em dois conjuntos distintos para fins de treinamento e teste. A divisão foi realizada da seguinte maneira: 75% dos dados foram designados para o conjunto de treinamento, enquanto os 25% restantes para o conjunto de teste. Essa abordagem de divisão é utilizada para garantir que a RNA seja treinada em uma amostra representativa e que seja testada em dados ainda não vistos para avaliar se o modelo generaliza bem a novos dados ou se está apenas memorizando os dados de treinamento.

A função de ativação utilizada foi a tangente hiperbólica para a camada oculta, e para a camada de saída foi usado uma função de ativação linear (Peng *et al.*, 2007; Morce *et al.*, 2011). Essas funções são usadas para determinar a forma como os neurônios processam os sinais de



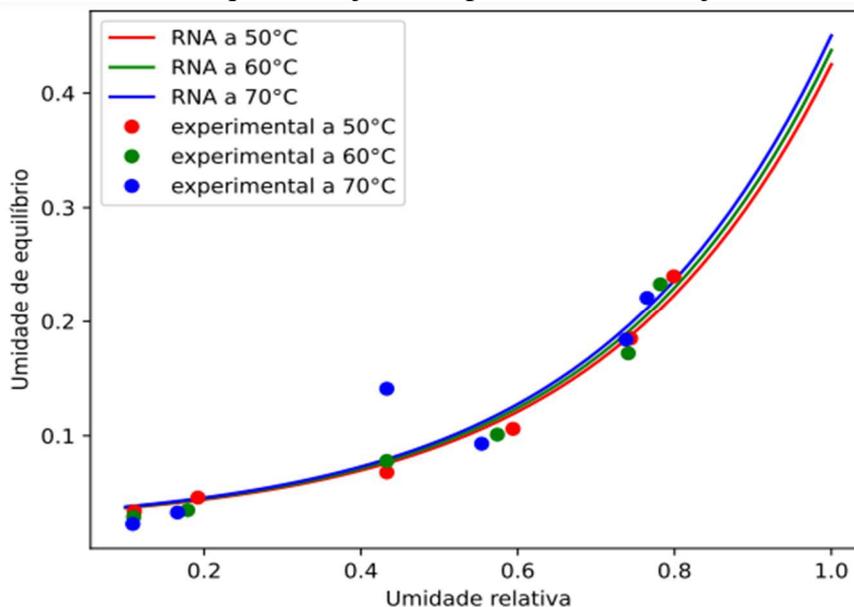
entrada e produzem os sinais de saída em uma rede neural (Brito; Danetto, 2023). A combinação de funções não lineares e funções lineares permitem que a RNA modele relações complexas de dados (Fleck *et al.*, 2016).

A arquitetura escolhida para o treinamento da RNA foi o aprendizado supervisionado, onde as variáveis de entrada e saída são indicadas para a rede (Miguel *et al.*, 2015, Silva *et al.*, 2022). A estrutura neural utilizada foi a de multicamadas *feedforward*, que faz os cálculos desde a entrada até a saída e normalmente consiste em três camadas: uma de entrada, uma oculta e uma de saída (Santos *et al.*, 2005; Morce *et al.*, 2011; Brito; Danetto, 2023). Como critério de parada para o treinamento da rede, foram consideradas 10.000 épocas e um erro de 0.00001. Assim, o treinamento para quando um desses critérios for atingido. A validação do ajuste do modelo de RNA aos dados experimentais foi obtida através do Erro Absoluto Médio, Coeficiente de Determinação e a Soma dos Erros Quadráticos.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Na Figura 1, são apresentadas as curvas de isoterma de equilíbrio ajustadas pela RNA que obteve o melhor desempenho durante a fase de treinamento. Essas curvas representam a isoterma de equilíbrio de umidade do farelo de soja em relação à umidade relativa do ar em três diferentes níveis de temperatura: 50, 60 e 70 °C na faixa de 10 a 80% de umidade relativa.

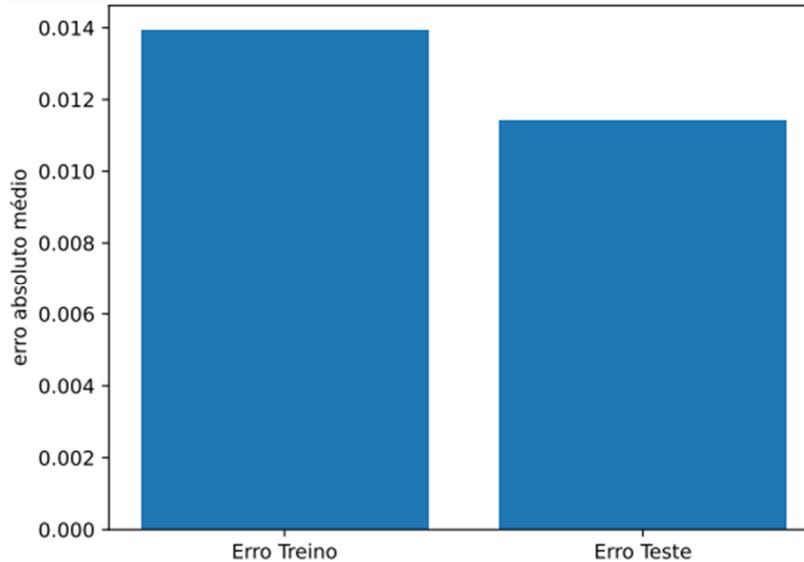
Figura 1. Curvas de equilíbrio ajustadas para o farelo de soja a 50, 60 e 70 °C



Fonte: Os autores (2024).



Figura 2. Erro Absoluto Médio treinamento e Erro Absoluto Médio de teste



Fonte: Os autores (2024).

Outras estimativas analisadas para determinar o quão bem o modelo de RNA se ajusta aos dados foi o Coeficiente de Determinação (R^2). O R^2 é uma medida que varia de 0 a 1 e indica a proporção da variabilidade total dos dados que é explicada pelo modelo, quanto mais próximo de 1 indica que o modelo se ajusta muito bem aos dados. O código criado forneceu o resultado através da função `r2_score` do *Scikit-learn* que mostrou um R^2 de 0.98 indicando que o modelo é adequado para representar os dados em questão.

Além disso, o código também forneceu a Soma dos Erros Quadráticos (SSE - *Sum of Squared Errors*) de 0.001. Essa medida estatística é calculada somando os quadrados das diferenças entre os valores experimentais e os valores previstos pelo modelo. Quanto menor for a SSE, melhor é o desempenho do modelo.

Em comparação com o resultado obtido por Luz *et al.* (2006) que demonstrou que os modelos modificados de Luikov e Halsey apresentaram os melhores ajustes para as temperaturas de 50, 60 e 70 °C, onde o R^2 obtido pelo autor foi de 0.97 e a SSE foi de 0.005 para ambos os modelos, evidenciando que a RNA teve uma melhor precisão para representar os dados.

A fim de analisar melhor o desempenho e a capacidade da rede, também utilizou-se os dados experimentais apresentados por Pixton e Warburton (1975) presente no estudo de Luz *et al.* (2006) para as temperaturas de 15, 25 e 35 °C, conforme a Tabela 2.



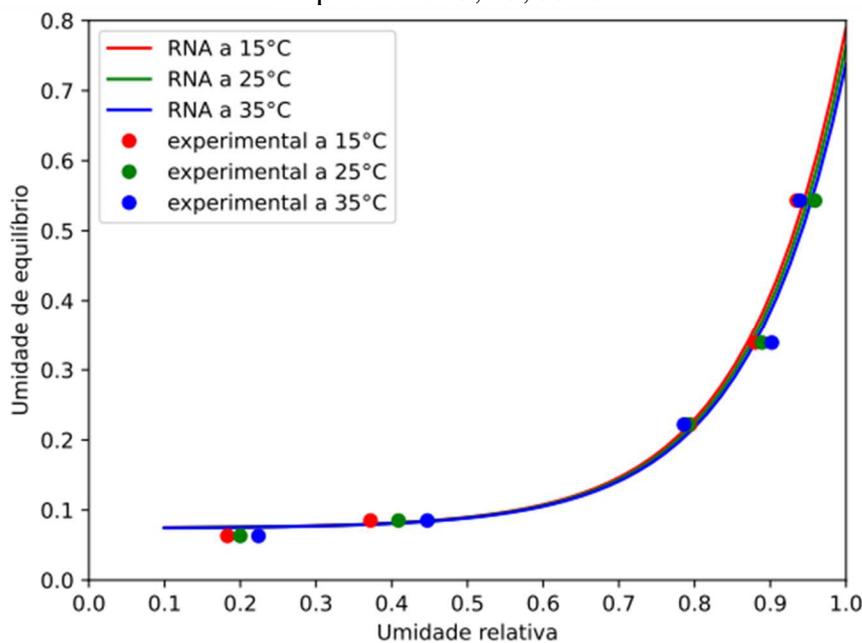
Tabela 2. Dados da umidade de equilíbrio do farelo de soja nas temperaturas 15, 25 e 35 °C

15 °C		25 °C		35 °C	
UR	X _e	UR	X _e	UR	X _e
0.935	0.543	0.959	0.543	0.939	0.543
0.880	0.339	0.889	0.339	0.902	0.339
0.794	0.222	0.792	0.222	0.786	0.222
0.372	0.085	0.409	0.085	0.447	0.085
0.183	0.063	0.200	0.063	0.224	0.063

Fonte: Pixton e Warburton (1975) *apud* Luz *et al.* (2006).

A partir dos dados da Tabela 2, substituiu-se os valores no código da RNA para obter o gráfico do ajuste de curvas e assim analisar o quão bem a rede se ajusta a esses novos dados. O resultado encontrado está apresentado na Figura 3.

Figura 3. Ajuste de curvas realizado pela RNA usando os dados de equilíbrio nas temperaturas 15, 25, 35°C

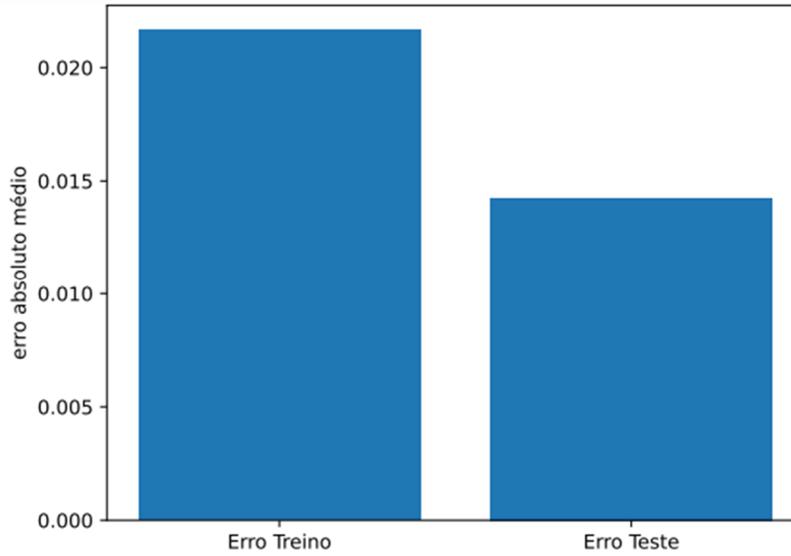


Fonte: Os autores (2024).

Essas curvas representam a isoterma de equilíbrio de umidade do farelo de soja em relação à umidade relativa do ar em três diferentes níveis de temperatura: 15, 25 e 35 °C na faixa de 18 a 95% de umidade relativa do ar. O R² encontrado foi de 0.98 e a SSE foi de 0.002. A Figura 4 mostra o resultado do MAE no treinamento e o MAE no teste de 0.022 e 0.014, respectivamente.



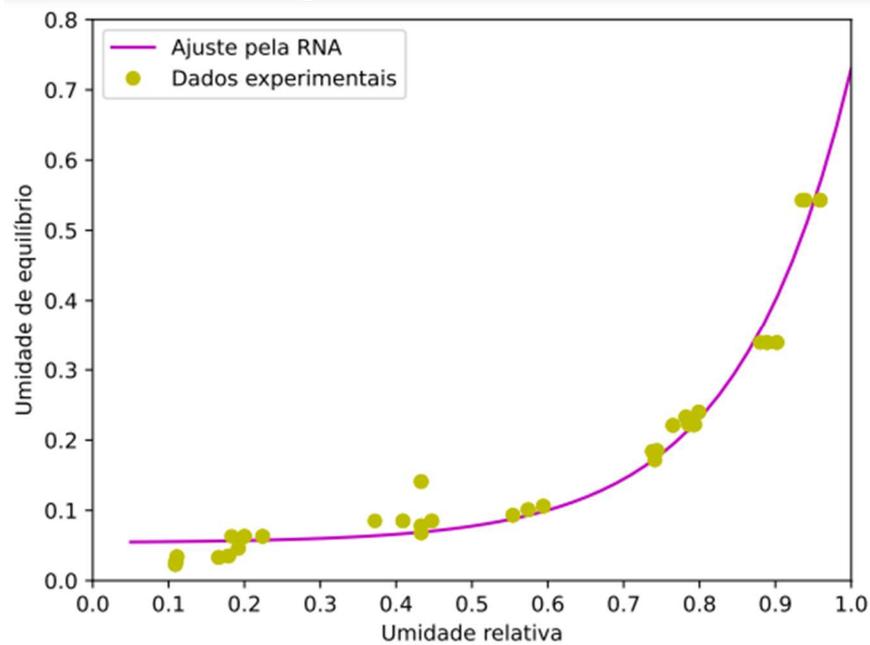
Figura 4. Erro Absoluto Médio de treinamento e Erro Absoluto Médio de teste



Fonte: Os autores (2024).

Utilizando a mesma RNA, foram usados os dados experimentais em todas as temperaturas (15, 25, 35, 50, 60 e 70 °C) a fim de analisar o comportamento da rede para todos esses dados, os resultados estão apresentados na Figura 5.

Figura 5. Curva ajustada a partir dos dados experimentais da umidade de equilíbrio para seis diferentes temperaturas, utilizando a RNA

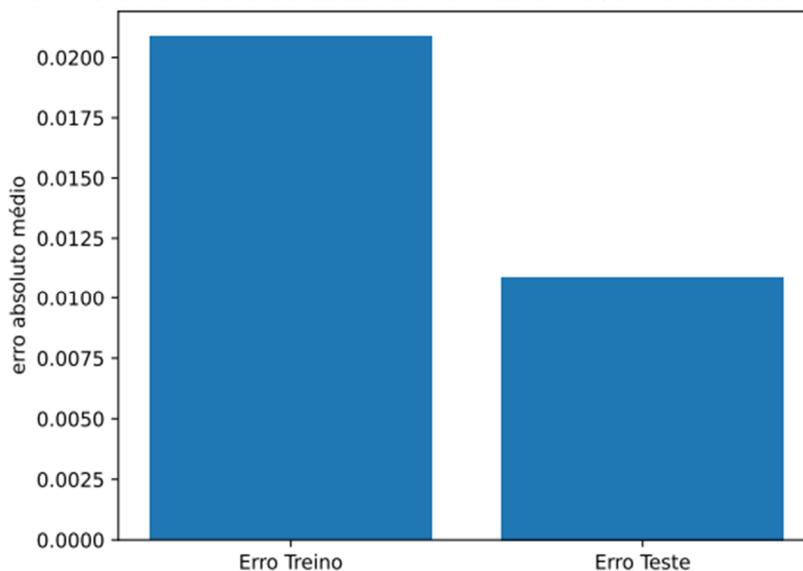


Fonte: Os autores (2024).



A partir da curva ajustada pela RNA dos dados experimentais da umidade de equilíbrio para as seis diferentes temperaturas, obtemos um R^2 igual a 0.99 e a SSE de 0.002. Também calculou-se o MAE do treinamento e do teste para todas as temperaturas, onde o resultado encontrado foi de 0.021 e 0.011, conforme mostrado na Figura 6.

Figura 6. Erro Absoluto Médio de treinamento e Erro Absoluto Médio de teste



Fonte: Os autores (2024).

O resultado obtido pelo autor Luz *et al.* (2006) em todas temperaturas determinou que o ajuste a partir do modelo de Luikov modificado produziu os melhores resultados, com um R^2 de 0.99 e a SSE de 0.017.

Como o valor alcançado no artigo para o R^2 foi apresentado com apenas duas casas decimais, não é possível fazer uma comparação mais precisa entre os ajustes realizado pelo modelo de Luikov e a RNA. Porém, a partir do resultado da SSE podemos observar que o ajuste pela RNA teve uma diferença de 0.015 menor, indicando que teve uma melhor concordância.

Chayjan e Mahmood (2010) usaram uma RNA para modelar o teor de umidade de equilíbrio da soja em dados experimentais de sorção. Os resultados obtidos pelos autores mostrou que o modelo de RNA prevê com mais precisão o teor de umidade de equilíbrio comparados com cinco modelos matemáticos: Chung-PFost, Henderson, Oswin, GAB e Halsey.

