

Universidad de Valparaíso
Facultad de Ciencias Económicas y Administrativas
Ingeniería Civil Industrial



**Utilización de Redes Neuronales Artificiales para predecir
problemas de fermentaciones vínicas**

por

César Antonio Román Russell

Tesis para optar al título de
Ingeniero Civil Industrial
y Grado de
Licenciado en Ciencias de la Ingeniería

Prof. Guía Dra. Alejandra Urtubia Urbina
Prof. Informante Dr. Gonzalo Hernández O.

Enero, 2010

Agradecimientos

A mi familia, por el apoyo brindado durante todo este proceso, a mi madre por luchar que permaneciera en los mejores colegios, por su amor incondicional, a mi hermana por estar conmigo en las buenas y en las malas, por ser mi mejor amiga y pilar fundamental en mi vida, a mi padre por darme las herramientas para desarrollarme en esta vida.

A mis amigos, primos y compañeros los cuales he hecho partícipes de los logros obtenidos durante todo el proceso, y que con sus palabras me hicieron sentir importante y orgulloso de tenerlos, estoy a su disposición para ayudarlos en sus proyectos.

A la profesora Alejandra Urtubia por darme la oportunidad de participar en su proyecto, por el apoyo, por su intelecto y motivación que tuvo durante todo este proceso, y en especial durante esta última etapa, gracias por sus palabras de aliento.

Al profesor Gonzalo Hernández por el interés que demostró, y por apoyo intelectual que me brindó.

A este grupo de profesores por su profesionalismo, motivación y humanidad.

A Elías Colarte, que comprendió la importancia de este proyecto desde un principio y me facilitó bibliografía importante para el desarrollo de la presente tesis, y por gestionar una visita que me ayudó a dimensionar y comprender lo que uno lee de los libros. Gracias por su apoyo.

Al Profesor Patricio Suarez, de tener por fin la oportunidad de agradecer lo que hizo por mi mamá hace años atrás, por comprender la angustia de una madre que entiende que su hijo se desvía del camino, por ser parte de este proceso de formación en la etapa más vulnerable para un joven.

Al grupo de personas que conforman Cambiaso Hnos. en especial donde me desarrollo, por confiar un Sistema de Gestión a un Egresado y por la comprensión que tuvieron en esta última etapa.

Al proyecto FONDECYT N° 1107025 por hacer posible esta investigación.

A la vida por hacer de mí, una persona benditamente destinada al éxito y al fracaso con la misma intensidad.

...y en forma muy especial a mi padre, todo este trabajo dedicado a él. Gracias por desear lo mejor para mí.

Gracias infinitas.

Índice

Glosario.....	5
Lista de abreviaturas y siglas.....	6
Lista de símbolos.....	7
Listas de figuras.....	8
Lista de tablas.....	9
Lista de ecuaciones.....	10
Resumen.....	11
Abstract.....	13
1 Introducción.....	14
1.1 Antecedentes generales.....	14
1.1 Objetivos.....	15
2 Proceso de fermentación del vino.....	16
2.1 Introducción.....	16
2.2 Etapas del proceso.....	18
2.3 Fermentación alcohólica.....	19
2.4 Rol de compuestos en la fermentación.....	20
2.4.1 Azúcares.....	20
2.4.2 Alcoholes.....	20
2.4.3 Ácidos Orgánicos.....	21
2.4.4 Compuestos nitrogenados.....	21
2.4.5 Densidad.....	22
2.5 Seguimiento de la fermentación alcohólica.....	22
2.6 Problemas de fermentación.....	23
2.6.1 Principales Causas.....	23
2.6.1.1 Alto contenido de azúcar residual.....	24
2.6.1.2 Toxicidad del etanol.....	24
2.6.1.3 Bajo pH.....	24
2.6.1.4 Ácidos grasos de cadena corta y media (C6 y C12).....	25
2.6.1.5 Falta de oxígeno.....	25
2.6.1.6 Temperaturas extremas.....	25
2.6.1.7 Limitación de nutrientes.....	26
2.6.1.8 Otras causas.....	27
2.6.2 Prácticas enológicas y acciones correctivas.....	27
3 Redes Neuronales Artificiales.....	29
3.1 Introducción.....	29
3.2 Fundamentos.....	31
3.2.1 Neurona biológica.....	31
3.2.2 Modelo Neuronal.....	32
3.2.3 Arquitectura.....	34
3.2.3 Modo de operación.....	36
3.3 Modelo práctico.....	39

3.3.1 El Perceptrón.....	39
3.3.1.1 Algoritmo de aprendizaje.....	41
3.3.2 El Perceptrón Multicapa.....	42
3.3.2.1 Aprendizaje por retropropagación de errores.....	43
3.4 Redes neuronales en la detección y el diagnóstico de fallas.....	46
3.5 Aplicaciones.....	47
4 Metodología.....	49
4.1 Introducción.....	49
4.2 Base de datos.....	49
4.2.1 Características.....	49
4.2.2 Compuestos analizados.....	50
4.2.3 Fermentaciones normales y problemáticas.....	50
4.3 Software.....	52
4.4 Casos Analizados.....	52
4.5 Aplicación RNA.....	54
4.5.1 Pre tratamiento de datos.....	54
4.5.1.1 Suavizamiento.....	55
4.5.1.2 Ajuste de curvas.....	56
4.5.1.3 Normalización.....	56
4.5.2 Ingreso de variables.....	56
4.5.1.1 Por fermentación.....	56
4.5.1.2 Por puntos.....	56
4.5.3 Modelo Neuronal.....	57
4.5.4 Entrenamiento y prueba.....	57
4.5.5 Evaluación del rendimiento.....	59
4.5.5.1 Tablas de Clasificación.....	59
4.5.5.2 Curvas ROC.....	59
4.6 Diagrama metodología.....	60
5. Resultados y discusiones.....	61
5.1 Introducción.....	61
5.2 Caso por puntos.....	61
5.3 Caso por fermentación.....	66
6. Conclusiones y recomendaciones.....	71
Anexos.....	73
Bibliografía.....	83

Glosario

Vinificación: Elaboración del vino. Conjunto de operaciones destinadas a obtener vino a partir del mosto de las uvas

Maceración: Contacto del mosto o del vino con sus hollejos para extraer materias colorantes y componentes del extracto y de los aromas. Se utiliza generalmente en la elaboración de tintos.

Vendimia: Acción de recolectar las uvas en la viña.

Orujos: Residuo del prensado de uva fresca, fermentada (orujos fermentados) o sin fermentar (orujos fresco).

Organoléptica: propiedades de las sustancias orgánicas e inorgánicas (especialmente las de los minerales) que pueden apreciarse por los sentidos.

Fungicida: Sustancia capaz de destruir los hongos.

Hiperplano: En un espacio bidimensional, un hiperplano es una recta; divide el plano en dos mitades.

Sistemas expertos: o sistema basado en el conocimiento es un sistema informático capaz de emular las prestaciones de un experto humano en un área concreta de conocimiento especializado

Inteligencia artificial: Se denomina inteligencia artificial a la rama de la ciencia informática dedicada al desarrollo de agentes racionales no vivos.

Cognición: Hace referencia a la facultad de los seres de procesar información a partir de la percepción, el conocimiento adquirido (experiencia) y características subjetivas que permiten valorar y considerar ciertos aspectos en detrimento de otros.

Lista de abreviaturas y siglas

FONDECYT = Fondo Nacional de Ciencia y Tecnología

OIV = Organización Internacional del Vino.

SAG = Servicio Agrícola Ganadero

NFA = Nitrógeno Fácilmente Asimilable

RNA = Redes Neuronales Artificiales

MLP = Multilayer Perceptron

MSE = Mean Square Error

INNS = *International Neural Network Society*

LMSE = *Least Mean Squared Error.*

ROC = *Receiver Operating Characteristic*

CEE = *Cross Entropy Error.*

SEE = *Sum of Squares Error*

Lista de símbolos

$<$ Menor a

$>$ Mayor a

\leq Menor o igual a

\geq Mayor o igual a

∞ Infinito

Δ Variación

∂ Gradiente

Σ Sumatoria

\forall Para todo

Lista de figuras

Figura 2.1 – Diagrama de bloques proceso de elaboración del vino tinto.....	18
Figura 3.1 – Neurona Biológica.....	31
Figura 3.2 – Modelo de Neurona.....	32
Figura 3.3 – Representación gráfica de función sigmoide y tangente hiperbólica.....	33
Figura 3.4 – Funciones de activación.....	34
Figura 3.5 – Ejemplo de arquitecturas neuronales.....	35
Figura 3.5 – Ejemplo de arquitecturas neuronales.....	36
Figura 3.7 – Regiones de decisión en el plano.....	41
Figura 3.8 – Arquitectura de Perceptrón Multicapa.....	43
Figura 3.9 – Diagrama de flujo de flujo con pasos de entrenamiento.....	45
Figura 4.1 – Comparación de perfiles acido succínico y acido acético.....	54
Figura 4.2 – Suavizamiento de datos por métodos de regresión local.....	55
Figura 4.3 – Diagrama de flujo de metodología.....	60
Figura 5.1 – Curvas ROC caso por puntos.....	65
Figura 5.2 – Curvas ROC caso por fermentación.....	69
Figura A.1 – Curva ROC para caso A con tiempo 256 horas.....	73
Figura A.2 – Curva ROC para caso A con tiempo 96 horas.....	73
Figura A.3 – Curva ROC para caso A con tiempo 72 horas.....	74
Figura A.4 – Curva ROC para caso B con tiempo 256 horas.....	74
Figura A.5 – Curva ROC para caso B con tiempo 96 horas.....	75
Figura A.6 – Curva ROC para caso B con tiempo 72 horas.....	75
Figura A.7 – Curva ROC para caso C con tiempo 256 horas.....	76
Figura A.8 – Curva ROC para caso C con tiempo 96 horas.....	76
Figura A.9 – Curva ROC para caso C con tiempo 72 horas.....	77
Figura A.10 – Curva ROC para caso D con tiempo 256 horas.....	77
Figura A.11 – Curva ROC para caso D con tiempo 96 horas.....	78
Figura A.12 – Curva ROC para caso D con tiempo 72 horas.....	78
Figura A.13 – Curva ROC para caso E con tiempo 96 horas.....	79
Figura A.14 – Curva ROC para caso E con tiempo 72 horas.....	79
Figura B.1 – Curva ROC para caso E con tiempo 96 horas.....	80
Figura B.2 – Curva ROC para caso E con tiempo 72 horas.....	80
Figura B.3 – Curva ROC para caso F con tiempo 72 horas.....	81
Figura B.4 – Curva ROC para caso G con tiempo 72 horas.....	81
Figura B.5 – Curva ROC para caso H con tiempo 72 horas.....	82

Lista de tablas

Tabla 4.1 – Compuestos analizados en fermentaciones industriales de <i>Cabernet Sauvignon</i> .	50
Tabla 4.2 – Condiciones iniciales, finales y clasificación de fermentaciones.....	51
Tabla 4.3 – Casos de estudio analizados.....	53
Tabla 4.4 – Ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados seleccionados.....	53
Tabla 4.5 – Numero de fermentaciones de entrenamiento y prueba.....	58
Tabla 4.6 - Fermentaciones para entrenamiento y prueba.....	58
Tabla 5.1 – Resumen de muestras utilizadas.....	61
Tabla 5.2 – Resumen de arquitectura utilizada para diferentes casos por puntos.....	62
Tabla 5.3 – Resumen de resultados de entrenamiento.....	63
Tabla 5.4 – Resumen de resultados de prueba.....	64
Tabla 5.5 – Resumen de muestras utilizadas casos por fermentación.....	66
Tabla 5.6 – Resumen de arquitectura utilizada para diferentes casos por fermentación.....	66
Tabla 5.7 – Resumen de porcentaje de clasificación por fermentación.....	67
Tabla 5.8 – Resumen de resultados de prueba.....	68

Lista de ecuaciones

Ecuación 3.1 - Salida de una neurona i -ésima.....	33
Ecuación 3.2 - Función de activación sigmoide o logística.....	33
Ecuación 3.3 - Función de activación tangente hiperbólica.....	33
Ecuación 3.4 - Función de activación lineal o identidad.....	34
Ecuación 3.5 - Función de activación escalón o signo.....	34
Ecuación 3.6 - Función de activación lineal a tramos.....	34
Ecuación 3.7 - Estado del peso sináptico en el momento $t+1$	37
Ecuación 3.8 - Derivada de la función de pesos.....	37
Ecuación 3.9 - Variación en el peso de la conexión entre las neuronas i y j	38
Ecuación 3.10 - Función global de error durante el entrenamiento.....	38
Ecuación 3.11 - Variación relativa del error.....	39
Ecuación 3.12 - Variación relativa del error acumulativa.....	39
Ecuación 3.13 - Función de salida del perceptrón.....	40
Ecuación 3.14 - Función de salida del perceptrón (aplicada a función escalón).....	40
Ecuación 3.15 - Función de salida de neurona tipo perceptrón.....	40
Ecuación 3.16 - Ecuación de la recta L del plano de decisión.....	41
Ecuación 3.17 - Ecuación de la recta L del plano de decisión (despejada).....	41
Ecuación 3.18 - Ecuación de actualización de pesos (según regla de Hebb).....	42
Ecuación 3.19 - Expresión de regla de aprendizaje del perceptrón.....	42
Ecuación 3.20 - Función de salida de un perceptrón multicapa.....	42
Ecuación 3.21 - Función del Error Cuadrático Medio.....	44
Ecuación 3.22 - Gradiente respecto a la capa de salida.....	44
Ecuación 3.23 - Gradiente respecto a la capa oculta.....	44
Ecuación 3.24 - Derivada de expresión 3.22.....	44
Ecuación 3.25 - Derivada de expresión 3.23.....	44
Ecuación 4.1 - Expresión de modelos polinomiales.....	54
Ecuación 4.2 - Función de normalización.....	55

Resumen

En este trabajo se aplicó Redes Neuronales Artificiales (RNA) en fermentaciones vínicas industriales. El objetivo principal fue explorar la técnica, evaluar su habilidad y encontrar una óptima metodología para la detección temprana de problemas en fermentaciones vínicas.

Los problemas de fermentación tienen un impacto directo en la productividad y calidad del vino. La detección temprana de fermentaciones problemáticas, sería de gran utilidad al enólogo, lo que permitiría tomar medidas correctivas adecuadas para garantizar que la vinificación concluya con éxito, asegurando una óptima calidad.

Los modelos basados en redes neuronales artificiales son utilizados para el reconocimiento de patrones no lineales característicos de los procesos biológicos y como una útil herramienta para la detección de fallas y el control de procesos. La habilidad de las redes neuronales artificiales de aprender a través del entrenamiento en lugar de descripciones formales, las convierte en una herramienta alternativa para modelar procesos de variables con interrelaciones complejas.

Los datos proporcionados para el estudio fueron recogidos a partir de 24 estanques de fermentación de *Cabernet Sauvignon*. Las fermentaciones se llevaron a cabo en una bodega del Valle del Maipo el año 2002. Entre 30 y 35 muestras fueron tomadas por fermentación en función de la duración de la vinificación. En total se analizaron 33 compuestos correspondientes a azúcares, alcoholes, ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados, lo que generó aproximadamente 22.000 datos.

De los 24 estanques de fermentación, a partir de criterios de azúcar residual y del tiempo de duración de las fermentaciones, se establecieron 9 fermentaciones normales y 13 problemáticas, las que corresponden a fermentaciones lentas y paralizadas.

Se estudiaron 8 casos (A, B, C, D, E, F, G, H) con diferentes variables predictoras, diferentes tiempos (256, 96 y 72 horas) y diferentes formas de ingreso de las variables al modelo neuronal (por puntos y por lote o fermentación).

Previo a la utilización de la técnica de RNA para un conjunto de casos (E, F, G, H) se realizó un pretratamiento de los datos mediante un suavizado de curvas con el método *Robust Loess* y un ajuste de curvas por medio de modelos polinomiales, de esta forma mediante interpolación fue posible obtener el mismo número de muestras a intervalos iguales de tiempo, de forma de permitir el ingreso al modelo neuronal. Para todos los casos, se realizó una normalización de los datos previo al ingreso del modelo neuronal.

Se utilizó un modelo de Perceptrón Multicapa. Los modelos utilizados estuvieron compuestos por una capa de entrada, cuyas neuronas corresponden a las variables predictoras utilizadas para cada caso analizado. Se utilizaron una o dos capas ocultas de procesamiento de

información, con funciones sigmoides como medio de comunicación y una capa de salida compuesta por dos neuronas representando las variables dependientes del modelo. Para todos los casos, el algoritmo de entrenamiento utilizado fue el Retropropagación del error o *Backpropagation* con la variante de gradiente descendiente. El tipo de entrenamiento utilizado corresponde por lote.

La evaluación del rendimiento de la Red Neuronal entrenada se realizó mediante el uso de un grupo de datos o grupo de *test* o prueba, el cual no participó en el proceso de aprendizaje de la red. Para el grupo de entrenamiento se utilizó una muestra correspondiente al 70% de los datos y un 30% para la muestra de prueba o test. La evaluación del rendimiento de la red se realizó a través del porcentaje de fermentaciones clasificadas correctamente, el error de predicción y del análisis de curvas ROC (*Receiver Operating Characteristic*).

Se concluyó de acuerdo a los resultados obtenidos, que el ingreso por fermentación (o lote) es el más adecuado para el ingreso de las variables predictoras al modelo.

Para los casos por puntos (A, B, C, D, E, F, G, H), se obtuvo un porcentaje de predicción del modelo entre un 60% y 80%. Los mejores resultados se presentaron para el caso que corresponde a la adición de ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados, con un tiempo de 96 horas, y el caso en que solo se adicionaron ácidos orgánicos, con tiempos de 256 y 96 horas, con porcentajes de predicción por sobre el 80%.

Para los casos por fermentación o lote (E, F, G, H) se obtuvo un porcentaje de predicción del modelo por sobre un 80%. Siendo el caso E para un tiempo de 72 horas un modelo perfecto con un 100% de predicción.

Finalmente, con los resultados obtenidos es posible concluir que la utilización de Redes Neuronales Artificiales como herramienta de detección de problemas de fermentación de forma temprana (antes de las 72 horas), con la medición de azúcar, densidad y grado alcohólico, representa un modelo alternativo no paramétrico para la predicción de problemas en fermentaciones vínicas.

Palabras claves *redes neuronales artificiales, detección de fallas, problemas de fermentación del vino, fermentación vínica,*

Abstract

The main goal of this thesis is to construct an Artificial Neural Network together with a suitable methodology in order to early detect problematic wine fermentations.

The problems in wine fermentations have a direct impact on wine quality. Early detection of problematic fermentations would be very useful for the winemakers, because they could take the corrective actions that guarantee the success of winemaking.

Artificial Neural Networks (ANNs) have been widely used for recognition of non linear patterns, which is characteristic of bioprocess like wine production. In addition, it is a very useful tool for fault detection and process control. Numerous applications have demonstrated that ANNs are capable to detect complex relationships between the inputs and outputs and they reproduce the behavior of a system after a previous training stage with known data.

In order to early predict problematic wine fermentation a database of 22,000 data (sugars, alcohol, organic acids, nitrogen compounds and density) from 22 fermentations of *Cabernet Sauvignon* was used. From 22 fermentations, 9 were normal and 13 were problematic fermentations.

The methodology applied was the following. First, a data preprocessing was applied by means of the Robust Loess method for curve smoothing together with a polynomial fitting. Second, an ANN Multilayer Perceptron model was applied over the preprocessed database. This model considered one or two hidden layers with sigmoid transfer functions and an output layer composed of two neurons representing the dependent variables: normal and problematic fermentations.

Eight cases of were studied that consider different variables to model and different fermentation times for: 256, 96, 72 hours. The 22 fermentations were well classified in 72 hours using the ANN Multilayer Perceptron model trained by the Back-Propagation algorithm using as predicted variables sugar, alcohol and density. This represents an alternative model for non parametric prediction of problematic fermentations.

1. Introducción

1.1 Antecedentes generales

La detección temprana y el diagnóstico de que se produzca un suceso anormal en los procesos industriales es de gran importancia para garantizar la seguridad de los procesos y mantener una óptima calidad del producto. Hoy en día los avances en los instrumentos de medición permiten medir gran cantidad de variables en pocos segundos. Estas mediciones contienen información útil sobre el estado del proceso.

El caso de estudio en la presente tesis se desarrolla en la industria vitivinícola de nuestro país. Chile es reconocido como uno de los productores vitivinícolas más importantes del mundo, En el año 2008 las exportaciones alcanzaron los 588 millones de litros, con un valor de US\$ 1.370 millones. Las cifras muestran la importancia que tiene la industria vitivinícola en nuestro país y en el mundo, siendo la calidad el aspecto más significativo y diferenciador, lo cual ha permitido el posicionamiento entre los cinco países con mayores exportaciones del mundo.

En beneficio de la calidad los enólogos de nuestro país requieren de herramientas para mejorar el proceso, ya que surgen problemas en las diversas etapas del proceso de elaboración de los vinos, y en particular en la fermentación, aproximadamente el 10% de las fermentaciones presenta problemas, y solo considerando las pérdidas en uva ascienden a 22.400 – 48.000 dólares por estaque (0,7-1,5 US\$/Kg uva, 32 toneladas/estaque). La detección temprana de fallas en el proceso permitiría tomar medidas correctivas adecuadas para eliminar el comportamiento anormal del proceso, asegurando una óptima calidad del producto final.

Los modelos basados en redes neuronales artificiales son utilizados para el reconocimiento de patrones no lineales característicos de los procesos biológicos y como una útil herramienta para la detección de fallas y el control de procesos. Son capaces de detectar complejas relaciones entre sus entradas. Esto es de gran utilidad ya que una de las características de los procesos bioquímicos es la complejidad de las interrelaciones de las variables del proceso. Además la habilidad de las redes neuronales artificiales de aprender a través del entrenamiento en lugar de descripciones formales, las convierte en una herramienta alternativa para modelar procesos de variables con interrelaciones complejas.

Para el caso se cuenta con una base de datos de 22.000 datos obtenida del análisis a 33 compuestos con espectroscopia MIR en una bodega del Valle Maipo. El objetivo es aplicar Redes Neuronales Artificiales (ANN), para proponer una metodología para la detección temprana de fallas en el proceso de fermentación vínica. Esto representaría una poderosa herramienta para los enólogos debido a que les ayudaría a la detección de los problemas para realizar medidas correctivas adecuadas de forma temprana, para eliminar el comportamiento anormal del proceso y evitar los costos que incurren en la actualidad.

1.2 Objetivos

Objetivo general

Evaluar la utilización de Redes Neuronales Artificiales (RNA) para predecir de forma temprana problemas en el proceso de fermentación vínica.

Objetivos específicos

- Estudiar y Analizar la base de datos existente de fermentaciones vínicas.
- Determinar el pre tratamiento de los datos para la correcta utilización de la técnica de Redes Neuronales Artificiales
- Crear un modelo de Redes Neuronales Artificial para aplicar a los diferentes casos analizados.
- Interpretar los resultados entregados por la metodología utilizada.
- Proponer una metodología para la detección de problemas, basada en los resultados obtenidos.
- Validar las metodologías aplicadas con nuevos datos de fermentaciones, tanto en condiciones normales y anormales.

Capítulo 2: Proceso de fermentación del vino.

2.1 Introducción

La importancia que tiene la industria del vino en el mundo es considerable, basta revisar las estadísticas vitivinícolas más recientes. Según la Organización Internacional de la Viña y el Vino (OIV), en el año 2008 la superficie vitícola mundial alcanzó los 7742 mha, siendo Europa con la mayor superficie 58,4%, seguido de Asia con un 21,1% y en tercer lugar América con un 12,8%. Sin embargo en cuanto a la producción mundial de vino que alcanzó los 269,0 Miohl (millones de hl), Europa ocupa el primer lugar en producción con un 66,7% seguido de América con un 18,5% y Asia con un 5% [OIV09].

En Chile la actividad vitivinícola comienza con la llegada de los conquistadores españoles, quienes introdujeron la uva vinífera para producir vino de misa, aunque ya existían ejemplares de vid, específicamente la variedad Moscatel, que crecía en forma silvestre a los pies de la cordillera en las cercanías de Curicó [Ayala04]. Los primeros viñedos registrados en Chile corresponden al siglo XVI, y las exportaciones ya eran importantes en el siglo XVIII hacia las demás colonias como Perú.

En el siglo XIX con las importaciones de variedades traídas de Europa tales como *Merlot*, *Cabernet Sauvignon*, *Pinot Noir*, *Riesling*, *Sauvignonasse* y *Semillón* [Ayala04], llegan enólogos franceses y administradores para encargarse de las viñas y de los procesos de producción. En esta época la calidad del vino chileno ya era destacada en exposiciones como Burdeos (1882), Liverpool (1885) y Paris (1889). [Müller03]

En el siglo XX, la industria vitivinícola sufre grandes crisis. Entre 1940 y 1980 impuestos, la ley de alcoholes que prohibía la plantación de viñedos, la Segunda Guerra Mundial y una caída interna de los precios de la uva en la década de los setenta, afectaron fuertemente la industria. La recuperación comienza con la derogación de la ley en 1974 que restringía los viñedos, luego en los años ochenta con la incorporación de tecnologías en la producción del vino, y con la apertura económica, y políticas de exportaciones. En los años noventa los vinos chilenos se consolidan en mercados internacionales con exportaciones a Europa, Estados Unidos, y Asia, explicado tanto por la calidad del vino como la percepción de los consumidores sobre el vino Chileno. Actualmente los vinos Chilenos se exportan a más de 109 países. [Müller03]

Chile en la actualidad cuenta con una zonificación vitícola geográfica de acuerdo a lo establecido en el decreto de agricultura N° 464 del año 2004. Esta zonificación divide al país en cinco grandes regiones vitícolas. Atacama, Coquimbo, Aconcagua, Valle Central y Región del Sur, y 15 subregiones, dentro de cuales podemos encontrar al Valle del Maipo. De los 986.934.588 litros de vino producidos en el país en 2009, superior en un 13,6% respecto del año 2008, el 87% del total declarado corresponde a vinos con denominación de origen, esto es, vinos provenientes de algunas de las regiones vitícolas señaladas en el decreto N° 464, concentrando las mayores producciones en las región del Maule. De los vinos con denominación de origen que alcanzo los 859.360.910 litros, el 70,3% corresponde a vinos

provenientes de cepajes tintos y el 29,7% a vinos de cepajes blancos. Al analizar la producción en relación a los tipos de cepajes, el *Cabernet Sauvignon* es el con mayor producción alcanzando un 39% de la producción total de vinos con denominación de origen, seguido del *Merlot* con el 13,3%, *Chardonnay* con un 11,2%, *Carmenère* con un 8,7% y la variedad *Syrah* con un 4,9%. [SAG09].

En lo que refiere a las exportaciones, el país es reconocido como uno de los productores vitivinícolas más importantes del mundo, En el año 2008 las exportaciones alcanzaron los 588 millones de litros, con un valor de US\$ 1.370 millones. Los principales mercados de destino son Inglaterra, Estados Unidos, Canadá, Holanda, Brasil, Japón entre otros [WinesofChile09]. La participación de la exportación Chilena en el mercado mundial ha aumentado significativamente en los últimos 20 años, desde una participación de sólo un 0,38% en 1988, hasta alcanzar en el 2008 un 6,6% del mercado mundial de exportaciones de vino. El quinto lugar después de Italia, España, Francia y Australia [WinesofChile09].

Las cifras muestran la importancia que tiene la industria vitivinícola en nuestro país y en el mundo, siendo la calidad el aspecto más significativo y diferenciador, influyendo en la percepción y la disposición a pagar por los consumidores [Ayala04]. Esta calidad del vino Chileno que ha permitido el posicionamiento entre los cinco países con mayores exportaciones del mundo, es resultado de importantes inversiones relacionadas con el mejoramiento de la infraestructura productiva [Olavarría00], aplicación de modernas tecnologías de vinificación, capacitación de personal e investigación [Kouzimine00]. Estos factores se ven favorecidos por las condiciones innatas de climas y suelos fructíferos del país. El clima mediterráneo del país con veranos cálidos y secos, e inviernos fríos y lluviosos favorecen la producción vitivinícola. Las condiciones sanitarias y la ubicación geográfica del país protegen a los viñedos de pestes y plagas. Los días soleados y temperaturas que decrecen fuertemente por las noches, en temporada de crecimiento desarrollan en las uvas viníferas en el caso de los vinos tintos, un color profundo, taninos maduros y altos niveles de antioxidantes. [WinesofChile09].

Sin embargo, aunque Chile a logrado posicionarse como uno de los países con mayores exportaciones del mundo, exista una gran diferencia con sus competidores. El competidor directo de Chile Australia, produce actualmente aproximadamente la tercera parte del vino que España, este último con la mayor superficie mundial de viñedos 1.165.000 hectáreas [OIV09], 8 veces mayor que la superficie de Australia. Una de las razones de la competitividad de Australia es la importante actividad en investigación y desarrollo que tiene la industria vitivinícola de ese país [Vilanoba&Tardágila]. En Chile el gasto en investigación y desarrollo está muy por debajo de sus competidores directos. Enólogos del país reconocen que se debe realizar investigación aplicada [Moguillansky06].

Es en este contexto la importancia que adquiere la presente tesis. El desarrollar una investigación en el proceso de fermentación del vino, que trae problemas tanto económicos como de calidad para la industria vitivinícola de nuestro país, aproximadamente el 10% de las fermentaciones presenta problemas, y solo considerando las perdidas en uva ascienden a 22.400 – 48.000 dólares por estaque (0,7-1,5 US\$/Kg uva, 32 toneladas/estaque), serviría de base para futuras investigaciones aplicadas en este tema. La detección temprana de fallas en el proceso permitiría tomar medidas correctivas adecuadas para eliminar el comportamiento anormal del proceso, asegurando una óptima calidad del producto final [Urtubia06].

2.2 Etapas del proceso

Una de las primeras diferencia que se debe considerar en las etapas del proceso de vino, es la diferencia de vinificaciones de tintos y blancos.

Los vinos tintos se obtienen por fermentación alcohólica de los mostos, en presencia de las partes sólidas de la baya (películas y semillas), los vinos blancos provienen solamente de la fermentación del jugo de la uva. Es por esto que en la elaboración de vinos blancos, la extracción de los mostos y su clarificación preceden a la fermentación alcohólica. Por lo tanto, no es el color de las uvas, sino la ausencia de maceración en la fase alcohólica de la vendimia, lo que distingue a la vinificación de tintos y blancos. [Ribéreau03].

Las etapas clásicas de la vinificación en tinto son las siguientes:

- Tratamientos mecánicos de la vendimia: estrujado, descobajado, encubado;
- Encubado: fermentación alcohólica principal y maceración;
- Encube: separación del vino y del orujo por escurrimiento y prensado;
- Fermentaciones de terminación: agotamiento de los últimos gramos de azúcar mediante la fermentación alcohólica y la maloláctica.

Estas etapas corresponden a la vinificación tradicional por lo que presenta una gran flexibilidad en su aplicación [Ribéreau03]. La figura 2.1 muestra un diagrama de proceso estándar para la elaboración de vino tinto.

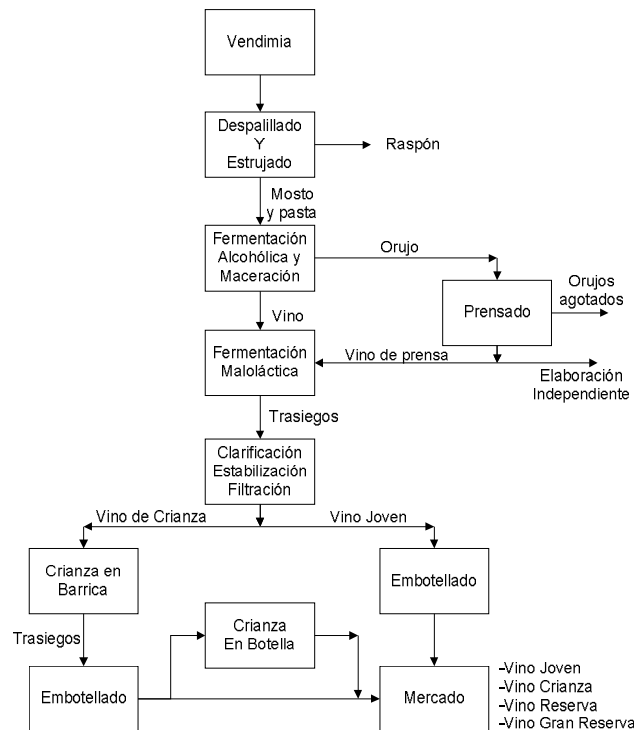


Figura 2.1 – Diagrama de bloques proceso de elaboración del vino tinto.

Fuente: Elaboración propia

2.3 Fermentación alcohólica

Podemos definir la fermentación alcohólica como el proceso bioquímico por el cual las levaduras transforman los azúcares del mosto en etanol y CO₂, a lo largo de una serie de reacciones catalizadas por las enzimas contenidas en el citoplasma de las levaduras [Boulton96].

La transformación del mosto de uva en vino es un proceso microbiológico complejo que implica la participación de diferentes microorganismos como levaduras, bacterias y hongos filamentosos. En concreto son las levaduras las que por medio de un proceso bioquímico transforman los azúcares del mosto de la uva en etanol, dióxido carbónico y otros compuestos químicos para formar el vino.

La degradación de los principales azúcares del vino, las hexosas glucosa y fructosa en etanol es llevado a cabo por las diversas cepas de levaduras. Entre las especies de mayor relevancia enológica se encuentra las del género *Saccharomyces*, generalmente *S. cerevisiae* por ser responsable de la fermentación de la mayor parte de los azúcares del mosto y *S. bayanus* frecuente en las etapas finales de la fermentación [Boulton96]; [Ribéreau03].

La carga enzimática de las distintas especies de levaduras presenta diversidad cualitativa y cuantitativa, incluso en las distintas cepas, variedades o razas de una misma especie. Por lo tanto, el curso y resultado final de cada fermentación puede ser diferente en función de las características fisiológicas de la levadura y las condiciones ambientales en que se realice [Suárez&Iñigo04]

Las levaduras pueden degradar los azúcares siguiendo dos vías metabólicas: la fermentación que se realiza en ausencia de oxígeno (anaerobiosis) y la respiración que se realiza en presencia de oxígeno (aerobiosis). Independiente de la vía utilizada, la principal forma de degradar el azúcar es la glicólisis, a través de la cual la glucosa se transforma en ácido pirúvico [Ribéreau03]; [Hidalgo03].

Durante la fermentación alcohólica además de etanol y CO₂ se producen un gran número de compuestos, que enriquecen y caracterizan al vino elaborado entre los cuales se encuentra el glicerol en cantidades de 6 a 10 g/l siendo el segundo componente mayoritario después del etanol [Hidalgo03], el ácido acético en cantidades que van desde 0,2 a 0,5 g/l, [Delanoë03] negativo en la apreciación organoléptica [Suárez&Iñigo04], el ácido succínico su tenor en el vino es de 1g/L [Ribéreau03], el ácido láctico proveniente del ácido pirúvico en cuantías de 200 a 300 mg/L, la acetoina, diacetilo y 2-3 butanodiol igualmente formados por la levadura a partir del ácido pirúvico, el diacetilo es producido por la levadura desde el comienzo de la fermentación alcohólica y es rápidamente reducido en acetoina y 2-3 butanodiol [Ribéreau03] y otros compuestos ácidos cítrico, propiónico, fumárico y fórmico en cantidades menores, alcoholes con origen en las sustancias nitrogenadas y por combinación entre ácidos y alcoholes se generan ésteres como el acetato de etilo [Mesas&Alegría99].

2.4 Rol de compuestos en la fermentación.

Como se mencionó anteriormente durante la fermentación alcohólica se produce un gran número de compuestos. Dentro de los compuestos analizados en la presente tesis, a continuación se detalla su rol en la fermentación.

2.4.1 Azúcares

El mosto de uva y el vino contienen naturalmente pentosas y hexosas que constituyen lo que en análisis del vino se denomina azúcares reductores. Los azúcares simples o azúcares reductores se dividen en dos grupos: Las hexosas (glucosa y fructosa), son los constituyentes esenciales de los mostos, son fermentables (azúcares fermentables), es decir pueden ser transformados en alcohol por las levaduras. Y las pentosas, estas no son fermentables. Se encuentran en la uva en baja concentración. En el mosto están presentes en pequeñas cantidades (<2g/L) [Delanoë03].

El conjunto de los azúcares que persisten al final de la fermentación son denominados azúcares residuales. Los vinos secos, provenientes de una fermentación completa de los azúcares, contienen pequeñas cantidades de hexosas (del orden de 1 g/L), principalmente de fructosa, porque la glucosa es fermentada preferentemente por la gran mayoría de las levaduras. Por esta razón, la relación G/F, próxima a 1 en el mosto de la uva desciende regularmente durante la fermentación [Ribéreau03]. La determinación de los azúcares reductores permite apreciar el final de la fermentación alcohólica. Se considera que se ha alcanzado si el contenido de azúcares reductores es inferior a 2 g/L [Delanoë03].

2.4.2 Alcoholes

El grado alcohólico expresa la proporción de alcohol etílico en el vino [Delanoë03]. El etanol o alcohol etílico es después del agua, el constituyente cuantitativamente más importante del vino. Proviene esencialmente de la fermentación alcohólica del azúcar del mosto. Teniendo en cuenta la densidad del etanol igual a 0,79 g/mL, un vino cuya graduación alcohólica es de 10% vol., contiene en peso 0,79 g/L de etanol.

El etanol producido por la fermentación disminuye la asimilación nitrogenada y paraliza la levadura; actúa modificando los sistemas de transporte activo a través de la membrana plasmática [Ribéreau03]. La presencia de etanol en el momento de la inoculación alarga la fase de latencia y reduce la multiplicación celular; una temperatura elevada aumenta esta acción inhibitoria [Ribéreau03].

El glicerol es probablemente el constituyente químico del vino más importante después del agua y del etanol; es el primero de los productos secundarios de la fermentación alcohólica. Su tenor mínimo en los vinos es igual a 5 g/L, pero puede alcanzar, en función de las condiciones de fermentación valores de 15 a 20 g/L. El Glicerol es formado por la levadura

al principio de la fermentación, se admite con los 50 primeros gramos de azúcares fermentados [Ribéreau03]. El vino contiene alrededor de 8 g de glicerol por cada 100 g de etanol. La mayor parte del glicerol se forma durante la fermentación de los cien primeros gramos de azúcar; luego la producción de glicerol es más lenta pero nunca nula.

2.4.3 Ácidos orgánicos

Los ácidos orgánicos del vino proceden por un lado de las uvas y, por otro, de los fenómenos fermentativos [Flanzy00]. Los ácidos orgánicos tienen una amplia participación en la constitución, estabilidad y cualidades organolépticas de los vinos [Ribéreau03]; [Jackson94]. Su propiedad conservante también confiere a los vinos una mejor estabilidad microbiológica, así como físico-química. [Ribéreau03]. Los ácidos orgánicos del vino intervienen en la acidez que condiciona la estabilidad, el color y la aceptabilidad gustativa. El sabor ácido que se percibe viene condicionado por la acidez real o pH. En el vino, los únicos ácidos que pueden tener una acción sobre el pH son los ácidos tartárico, málico (con concentraciones en la uva desde 1 hasta 4g/L) y láctico (con concentraciones entre los 0,2 y 3 g/L), siendo el ácido tartárico el que juega un papel más importante. Los tres ácidos procedentes de la uva, el ácido tartárico (con concentraciones que varían entre 1,5 y 3 g/L), el málico y el cítrico (tenores en mostos y vinos antes de la fermentación maloláctica entre 0,5 y 1 g/L), son los responsables del sabor ácido, el que predomine dará una tonalidad específica al vino. Los otros tres ácidos procedentes de la fermentación alcohólica y maloláctica aportan un carácter suplementario [Flanzy00].

2.4.4 Compuestos nitrogenados

La primera característica de los compuestos nitrogenados de los mostos de uva y de los vinos es su gran variabilidad desde el punto de vista cuantitativo. El contenido en nitrogenado total de un mosto de uva o de un vino se corresponde con la suma de diferentes fracciones nitrogenadas, aminoácidos libres, péptidos, proteínas, etc. [Flanzy00].

El rango de nitrógeno total contenido en el mosto oscila entre 60 y 2400 mg/L. Sin embargo, solo una parte de este es aprovechable en forma inmediata por las levaduras en condiciones de vinificación. Esta fracción está representada por el amonio más aminoácidos libres, excluida la prolina. Esta fracción de nitrógeno fácilmente aprovechable se denomina FAN (*free amino nitrogen*). 150 mg/L de FAN es el nivel mínimo necesario para una fermentación exitosa. Un déficit de nitrógeno asimilable puede provocar fermentaciones lentas [Bordeu&Gonzalez00].

El amoníaco, es la forma más directamente asimilable por las levaduras y su tenor interviene en la rapidez del inicio de fermentaciones de un mosto así como sobre su potencial de fermentabilidad. Por otra parte, es frecuente observar la desaparición total de esta forma de nitrógeno en un mosto que se encuentra al final de la fermentación alcohólica.

Las formas orgánicas del nitrógeno son múltiples, dentro de las principales se encuentran los aminoácidos. Estos son ácidos carboxílicos que contienen grupos amina, por

ejemplo, arginina, lisina, glicina. Están contenidos en gran cantidades en uvas y mostos (1000-6000 mg/L); tienen gran importancia como nutrientes de las levaduras. Cuando se produce una falta de aminoácidos y otros compuestos nitrogenados utilizados por las levaduras, pueden producirse en el vino defectos como, por ejemplo, el gusto azufrado [Reinhard05].

Los aminoácidos de un jugo de uva representan ponderalmente la forma más importante del nitrógeno total. En efecto, el tenor en aminoácidos libres totales varía de un año a otro de 1 a 4 g/L. Esta forma de nitrógeno representa, cuando la vendimia está madura, generalmente 30 a 40% del nitrógeno total [Ribéreau03]. Los dos aminoácidos más abundantes son la prolina y la arginina sea cual sea la cepa y el origen geográfico [Flanzy00].

2.4.5 Densidad

La densidad relativa de un vino 20/20 es la relación entre la masa de un volumen determinado de vino a 20°C y la masa del mismo volumen de agua a la misma temperatura [Delanoë03]. El descenso de la densidad en el mosto es uno de los parámetros más elementales utilizados para el control y seguimiento de la de la fermentación alcohólica [Ribéreau03]. La densidad del mosto está comprendida entre 1070 y 1120 g/L. La del vino oscila entre los 990 y 998 g/L. Esta disminución continua durante la fermentación alcohólica se explica por la transformación de los azúcares del mosto en etanol

2.5 Seguimiento de la fermentación alcohólica

El manejo de la fermentación es una de las principales funciones del enólogo. Una interrupción de la fermentación es un problema no solo por lo complicado de reiniciar una fermentación, sino también por las desviaciones bacterianas que pueden ocurrir y que pueden concluir en una formación importante de ácido acético. Por lo tanto es de vital importancia el control de la fermentación para prever su evolución e intervenir a tiempo si es necesario.

Una disminución de la fermentación puede evidenciarse por el seguimiento de la densidad. La densidad disminuye continuamente durante la fermentación hasta alcanzar valores comprendido entre 0,990 g/mL y 0,0995 g/mL. Hacia el final de la fermentación generalmente a partir de una densidad de 1,030 g/mL la fermentación se vuelve más lenta con riesgos de detenerse. [Delanoë03]. Por debajo de 1,005 g/mL, si la densidad desciende uno o dos milésimas solamente por día, se puede prever una interrupción de la fermentación antes del consumo completo de azúcar [Ribéreau03].

2.6 Problemas de fermentación

En Chile los problemas de fermentaciones lentas y paralizadas, tanto en mostos blancos como tintos, se han transformado en una situación preocupante, aproximadamente el 10% de las fermentaciones presenta problemas. El nivel inicial de azúcar, nitrógeno y sanidad, juegan un papel fundamental en el desarrollo de la fermentación alcohólica. El grado de madurez con que se cosecha es un factor primario para el desarrollo de fermentaciones alcohólicas lentas y paralizadas. Técnicas de vinificación y de las tecnologías actualmente disponibles, constituyen factores relevantes para prever este tipo de problemas [Pszczólkowski01].

La principal característica es un descenso en la tasa de fermentación al final del proceso. Fermentaciones paralizadas o incompletas son definidas como aquellas con un contenido de azúcar residual mayor en el vino al final de la fermentación. Los enólogos consideran una fermentación completa o seca con un contenido de azúcar residual de 0,2% a 0,4%, lo que equivale de 2 a 4 g/L de azúcares C5 y C6 [Boulton96]. Una fermentación lenta es definida como aquella que tardan un mayor tiempo necesario para el consumo de azúcar. En promedio, una fermentación normal dura de 7 a 10 días. Una fermentación lenta puede durar incluso meses en completarse [Bisson99]. Los vinos resultantes de fermentaciones lentas o paralizadas generalmente sufren una pérdida de la calidad organoléptica y una pobre estabilidad microbiológica. [Urtubia06].

La bibliografía distingue dos tipos de problemas de fermentación. (a) Lentas y (b) fermentaciones lentas (con inicio y final tardío) y paralizadas (con azúcar residual). Las fermentaciones lentas (*slow*), son caracterizadas por una tasa de fermentación tardía durante todo el proceso, debido a las bajas concentraciones de nitrógeno asimilable. Por el contrario fermentaciones lentas (*sluggish*) y paradas (*stuck*) son caracterizadas por la baja viabilidad de las levaduras al final de la fermentación [Blateyron&Sablayrolles01].

2.6.1 Principales Causas

Existen diversos factores que han sido identificados y que inciden en la tasa de fermentación los cuales pueden conducir a fermentaciones lentas y/o incompletas. Las causas principales son la limitación de nutrientes, el bajo pH, la falta de oxígeno, temperaturas extremas, presencia de toxinas, la acción inhibitorias de ácidos grasos de cadena media y corta, los altos contenidos de azúcar inicial y la capacidad de la levadura para resistir las altas concentraciones de etanol. A continuación se describe el efecto de las principales causas [Urtubia06a]

2.6.1.1 Alto contenido de azúcar inicial

En Chile es habitual cosechar las uvas con tenores de azúcares de 230 g/L o incluso superiores, afectando una serie de aspectos que tienen efecto en el desarrollo normal de la fermentación. La búsqueda de vinos complejos de buena calidad, ha conducido al medio enológico nacional a determinar un alto grado de madurez de cosecha, siendo uno de los aspectos de mayor incidencia en los problemas de fermentación, requiriendo para esto cepas de levadura capaces de tolerar altos niveles de azúcar. [Pszczólkowski01].

Esta alta concentración inicial de azúcar en el mosto tiene un efecto en la formación de productos secundarios, como es la formación de ácido acético. Cuanto más elevada es esta, mayor cantidad de ácido acético produce la levadura durante la fermentación, independiente de la cantidad de azúcar fermentado, afectando negativamente la calidad del vino [Ribéreau03].

2.6.1.2 Toxicidad del etanol

Otro de los factores que impacta la tasa de fermentación es el etanol. El etanol producido en la fermentación disminuye la asimilación nitrogenada y paraliza la levadura, actuando modificando los sistemas de transporte activo a través de la membrana celular.

La presencia de etanol en el momento de la inoculación alarga la fase de latencia y reduce la multiplicación celular. Temperaturas elevadas aumentan esta acción inhibitoria. Una tasa de azúcar elevada, se suma al efecto inhibitorio del etanol [Ribéreau03].

Levaduras que aseguran el comienzo de la fermentación en los mostos son inhibidas a partir de concentraciones de 5% a 6% de alcohol, por el contrario, *Saccharomyces cerevisiae* sufre estos problemas a partir de 12% a 14% de alcohol. *Saccharomyces bayanus*, llamadas levaduras de acabo, resisten concentraciones elevadas de alcohol, por sobre 16% en volumen [Delanoë03].

2.6.1.3 Bajo pH

La tasa de fermentación es mayor cuando el pH de los mostos es superior, debido a un mayor desarrollo de las levaduras en estas condiciones. Sin embargo, mostos o vinos de baja acidez y alto pH, presentan una mayor inestabilidad biológica, situación que favorece el desarrollo de bacterias lácticas, y por último el aumento del ácido acético. La tasa de fermentación se ve afectada también por el tipo de ácido dominante en el mosto, siendo más fácil cuando domina el ácido tartárico y más lenta con ácido cítrico [Pszczólkowski01].

Saccharomyces cerevisiae es tolerante a pH de fermentación bajo, y es viable su crecimiento y reproducción en un rango de pH entre 2.8 y 4.2. Valores de pH por debajo de 2.8 inhiben tanto el crecimiento como la fermentación. Tolerancias al etanol, orgánicos y ácidos grasos de muchas cepas son reducidas con valores de pH muy bajos [Bisson99].

2.6.1.4 Ácidos grasos de cadena corta y media (C6 – C12)

Ácidos grasos de cadenas largas (C16 - C18) son activadores de la fermentación. Por el contrario, ácidos grasos de cadena más corta, en particular los ácidos octanoico y decanoico (C8 y C10), formados por las levaduras durante la fermentación alcohólica ejercen un efecto tóxico sobre las mismas levaduras. El ácido octanoico, aumenta la permeabilidad de la membrana plasmática [Flanzy00]. La inhibición de las levaduras por estos ácidos grasos saturados actúa sinérgicamente con la toxicidad del etanol [Ribéreau03].

2.6.1.5 Falta de oxígeno

El oxígeno aumenta la población máxima de levaduras y prolonga su capacidad fermentativa. La introducción de oxígeno es uno de los procedimientos más eficaces disponible para manejar la fermentación del mosto. En Chile, existe una tendencia a evitar su aplicación en vinificaciones de blanco y tinto, lo cual ha contribuido a las paralizaciones de fermentaciones.

El oxígeno actúa favoreciendo la síntesis de esteroides y ácidos grasos insaturados, mejorando así la permeabilidad de la membrana celular, y en consecuencia la penetración de glucidos (o hidratos de carbono). El inicio en fermentación y su velocidad inicial son más rápidas en presencia de oxígeno. En la fase estacionaria de la levadura, los niveles de esteroides y ácidos grasos son muy bajos. Los compuestos lípidos se encuentran contenidos en las borras del mosto y pueden ser incorporados a las levaduras sólo en presencia de oxígeno [Ribéreau03]; [Pszczółkowski01].

Aportes de 5 a 10 mg/L de oxígeno, junto con aportes de sulfato diamónico, cuando la densidad ha disminuido del orden de 30 mg/L, ha evitado la totalidad de las detenciones de fermentación. Esto corresponde al fin de la fase de crecimiento de las levaduras, donde la eficiencia de oxígeno aportado es mayor [Ribéreau03].

2.6.1.6 Temperaturas extremas

La temperatura afecta la fluidez de la membrana plasmática, provocando problemas en el transporte de nutrientes [Boulton96].

La temperatura influye en la capacidad de las levaduras de asimilar los aminoácidos durante el desarrollo de la fermentación.

La temperatura influye también en la evolución de ácidos grasos de cadena corta (C₆ a C₁₂), inhibidores de la fermentación. Los riesgos de fermentaciones lentas y/o paralizadas por el efecto inhibitorio de estos, será mayor en la medida que la temperatura sea más baja, en

particular en las últimas etapas de una fermentación a 14°C [Pszczólkowski01] y [SantaMaría95].

Temperaturas elevadas, sobre los 30°C, aceleran la velocidad de la fermentación, pero aumentan el riesgo de paradas de fermentación, mas si el contenido de azúcar en el mosto es elevado [Ribéreau03]

La capacidad de las levaduras para asimilar la materia nitrogenada durante la fermentación es mayor a altas temperaturas. A bajas temperaturas, aunque las levaduras tengan suficiente cantidad de estos compuestos necesarios para su desarrollo, no son capaces de asimilarlo.

Por último, la temperatura afecta también a la calidad del vino obtenido, vinos elaborados a baja temperatura son más aromáticos y mejor valorados en el análisis organoléptico, pero por el contrario su fermentación puede ser incompleta. Por esto enólogos buscan un equilibrio para conseguir vinos de calidad evitando en lo posible, los problemas de fermentación. [SantaMaría95]

2.6.1.7 Limitación de nutrientes

Una fermentación lenta es causada a menudo por la limitación de nutrientes. Deficiencias de nitrógeno o fosfato son los principales responsables, siendo el nitrógeno en particular el nutriente más frecuente cuando se habla de fermentaciones paralizadas [Boulton96].

El rango de nitrógeno total contenido en el mosto oscila entre 60 y 2400 mg/L. Sin embargo, sólo una parte de este es aprovechable por las levaduras en condiciones de vinificación. Esta fracción está representada por el amonio más aminoácidos libres, excluida la prolina que no puede ser utilizada en condiciones anaeróbicas. El termino FAN (*free amino nitrogen*) se utiliza para designar esta fracción de nitrógeno aprovechable [Pszczólkowski01].

El nivel mínimo para una fermentación exitosa es de 150 mg/L de FAN. Un déficit de nitrógeno asimilable puede ocasionar fermentaciones lentas y problemas de calidad. Una práctica posible es añadir nitrógeno al mosto, sin embargo tampoco es recomendable, debido a la probabilidad de formación de uretano, no deseado.

Por estas razones, es necesario conocer los niveles de nitrógeno asimilable del mosto al momento de la siembra con levaduras seleccionadas. Determinar el nitrógeno asimilable requiere de equipamiento sofisticado, por lo que no existe en la mayoría de las bodegas en Chile. Esta información es de importancia para pronosticar una posible deficiencia y prevenirlos futuros problemas de fermentación. [Bordeu&Gonzalez00].

2.6.1.8 Otras causas

Otros factores que inciden en la tasa de fermentación son las sustancias tóxicas liberadas por las propias levaduras [Cruz99], la acción de agentes inhibidores exógenos, como los residuos de fungicidas aplicados para el control de enfermedades de la uva [Pszczólkowski01], altos niveles de turbidez o falta de clarificación en el mosto, la incompatibilidad microbiana, la competencia de levaduras, fenómeno de las levaduras *killer* (levaduras asesinas) y las diferencias en las prácticas enológicas [Urtubia06a].

2.6.2 Prácticas enológicas y acciones correctivas

Como se mencionó anteriormente son diversos los factores que pueden conducir en fermentaciones lentas y paralizadas. La información de prácticas de vinificación para la conducción de una fermentación alcohólica, constituyen factores relevantes para prevenir este tipo de problemas.

Existen diversas prácticas preventivas en la vinificación, como son el uso de cepas con buen potencial de fermentación, la aireación del mosto durante el crecimiento de la levadura, la adición de nutrientes, un cuidadoso control de la temperatura, las cuales reducirán el riesgo de fermentaciones lentas e incompletas. Una causa que es evitable y crítica en el desarrollo de la fermentación es la mala nutrición de las levaduras [Bisson00]. Deficiencias de nitrógeno o fosfato son los principales responsables, siendo el nitrógeno en particular el nutriente más frecuente cuando se habla de fermentaciones paralizadas [Boulton96]. Para esto es conveniente la realización de análisis de nitrógeno fácilmente asimilable (FAN). El FAN está en función del grado alcohólico (a mayor grado mayor necesidad de nitrógeno) y de la levadura usada. La adición de fosfato diamónico es utilizado para prevenir las paralizaciones [Cruz99].

Otra causa mencionada anteriormente es la falta de oxígeno, lo que provoca fermentaciones paralizadas. La aplicación de oxígeno puede realizarse mediante simples remontajes al segundo día de fermentación, sin embargo, la aplicación mediante micro burbujas será más eficiente [Pszczólkowski01].

La carencia de tiamina (vitamina B1) es otra causa que puede provocar fermentaciones lentas y paralizadas. La carencia de tiamina no se debe en todos los casos al escaso contenido en los mostos, sino que a algunas prácticas enológicas que producen altos niveles de contaminación. Para esto la incorporación de tiamina se hace indispensable [Pszczólkowski01].

Otro de los factores que afecta el desarrollo de la fermentación que han sido mencionados son las temperaturas extremas, las cuales se ven favorecidas con los altos niveles iniciales de azúcar. Las temperaturas elevadas en torno a los 30 a 35°C dependen de la dosis inicial de levaduras inoculadas al mosto, y de la velocidad de fermentación. En estos casos el monitoreo cuidadoso de la temperatura es importante, manteniendo la temperatura bajo los 30°C [Cruz09].

Una de las prácticas más eficaces para activar las fermentaciones es la incorporación de cortezas de levaduras [Lafon84]. Esta puede realizarse al inicio o durante el desarrollo de la fermentación, eliminando los ácidos grasos de cadena corta (C_8 y C_{10}), inhibidores de la fermentación alcohólica.

Factores humanos como la bajas dosis iniciales de anhídrido sulfuroso, temperaturas mal controladas y aportes de oxígeno insuficientes son con frecuencias prácticas que llevan a la paralización de fermentaciones [Ribereau99]. Por lo tanto el conocimiento de las causas y el manejo de información de las prácticas de vinificación podrán conducir con éxito las fermentaciones y evitar problemas de fermentaciones lentas e incompletas.

Capítulo 3: Redes Neuronales Artificiales

3.1 Introducción

El presente capítulo es una breve introducción al campo de las Redes Neuronales Artificiales (RNA) y más concretamente, a las redes supervisadas.

No pretende ser una revisión exhaustiva de estructuras conexionistas, sino una introducción a este tipo de modelo de procesamiento de la información para comprender su modo de funcionamiento, ventajas, limitaciones y aplicaciones, para luego profundizar en el modelo utilizado como herramienta de predicción de problemas de fermentación, el Perceptrón Multicapa (“*Multilayer Perceptron*”) y alguno de sus algoritmos de aprendizaje utilizados.

La computación neuronal, engloba dos áreas del conocimiento diferentes. La computación neuronal como ciencia de lo natural, que tiene relación con el modelado computacional de aspectos parciales del comportamiento del sistema nervioso, cuyo objetivo fundamental es de naturaleza científica. Y la computación neuronal como ciencia de lo artificial, la cual tiene relación con la ingeniería y con la inteligencia artificial aplicada. Es aquí donde se encuentran las Redes Neuronales Artificiales y donde se realiza su aplicación, en problemas de clasificación en los que se dispone de más datos que conocimientos específicos para solucionar el problema. [Allende&Salas03].

Las Redes Neuronales Artificiales (RNA) son sistemas de procesamiento de la información cuya estructura y funcionamiento están inspiradas en las redes neuronales biológicas [Hilera&Martinez95]. Surgen de la observación del funcionamiento del cerebro y de su comparación con la forma de trabajar de los ordenadores digitales.

Los ordenadores digitales son máquinas de Von Neumann, basadas en un microprocesador muy rápido capaz de ejecutar una serie de instrucciones complejas de forma fiable, sin embargo pese a su gran potencial, presenta problemas para abordar tareas donde la información se presenta masiva, imprecisa y distorsionada, tareas denominadas del mundo real [Brío&Molina02]. El cerebro, por el contrario resulta ser un complejo sistema de procesamiento no lineal, masivamente paralelo y adaptativo. El cerebro al contrario que un ordenador no está formado por un microprocesador. Sólo en el proceso de visión intervienen decenas de millones de neuronas, operando en paralelo. Es aquí donde radica el poder de cómputo del cerebro y la gran diferencia en las tareas abordadas, mientras el ordenador está orientado a tratar datos precisos en forma secuencial, el cerebro está especialmente orientado a realizar tareas cognitivas, algorítmicamente complejas y con señalización ruidosa [DelaFuente99].

Por lo tanto, las propiedades fundamentales del cerebro que pretenden ser emuladas por los sistemas artificiales son el procesamiento paralelo, lo que implica una gran capacidad de procesamiento, el concepto de memoria distribuida, en el sentido que la información se encuentra distribuida por las sinapsis de la red y un concepto clave que caracteriza a las redes neuronales denominado adaptabilidad, es decir, el modificar sus sinapsis adaptándose al

entorno, con un aprendizaje a través de la experiencia y lo que es fundamental poder generalizar conceptos a partir de casos particulares.

Las ventajas que presentan las redes neuronales sobre otras metodologías, además de las mencionadas como el procesamiento paralelo y la distribución de la información, es que estos sistemas diseñados pueden ser implementados en *hardware* con relativa facilidad. Además la capacidad de operar de forma simultánea con datos cualitativos, cuantitativos y multivariados. Las Redes Neuronales son capaces también de detectar complejas relaciones entre sus entradas. Esto es de gran utilidad ya que una de las características de los procesos bioquímicos como el tratado en la presente tesis, es la complejidad de las interrelaciones entre sus variables. Estas ventajas y propiedades emuladas de sistemas biológicos es lo que permite a las redes neuronales ser utilizadas en diversas aplicaciones como ingeniería de procesos, en la identificación de procesos, detección de fallas en sistemas de control, optimización de procesos y modelación de sistemas dinámicos no lineales.

La historia de las Redes Neuronales comienza en los años 40. En esta época se comienza la búsqueda de modelos alternativos a los computadores tradicionales basados en máquinas de Von Neumann, debido a la incapacidad para abordar tareas donde la información se presenta masiva, redundante e imprecisa. Los primeros resultados fueron los obtenidos por McCulloch y Walter Pitts en 1943, quienes crearon el primer modelo simple de neurona en base a funciones lógicas, introduciendo el concepto de umbral de activación, y el de Donald Hebb quien fue el primero en explicar los procesos de aprendizaje, los cuales continúan siendo los fundamentos de la mayoría de los algoritmos de aprendizaje que pueden hallarse en una red neuronal (regla de Hebb) [Hernández06].

En la década del 50 es en donde surgieron grandes avances. En 1957 Frank Rosenblatt comenzó el desarrollo del perceptrón, con aplicación práctica al reconocimiento de patrones. Por otro lado Widrow y Hoff en 1959 desarrollaron el ADALINE con un potente algoritmo de aprendizaje precursor del *backpropagation*, la regla delta, que posteriormente se comercializó para eliminar los ecos de las líneas telefónicas.

En 1969 surgen críticas que frenan el crecimiento que estaba experimentando las investigaciones sobre redes neuronales. M. Minsky y S. Papert publican "*Perceptrons*", demostrando las limitaciones para resolver problemas no linealmente separables como es el caso de la función lógica XOR (u or exclusivo), lo que provoca un período de abandono de esta aplicación [Pérez&Sancho03].

En 1982 Holpfield, Kohonen con los mapas autoorganizativos y en 1986 Rumelhart, Hinton y William provocaron el renacimiento de las redes neuronales, estos últimos con el redescubrimiento del algoritmo de aprendizaje de propagación hacia atrás, *backpropagation*, permitiendo el entrenamiento de redes multicapa.

En 1986 se crea la *International Neural Network Society INNS*, uno de los grandes promotores de las investigaciones en este campo [Hernández06].

.Actualmente existe una gran cantidad de publicaciones y aplicaciones, utilizadas ampliamente en tareas de clasificación, identificación, diagnóstico, optimización y predicción.

3.2 Fundamentos

Las Redes Neuronales pueden orientarse como modelos del sistema nervioso y fenómenos cognitivos, o bien como herramientas para la resolución de problemas prácticos. En este sentido, el punto de partida es la unidad de procesamiento elemental del sistema nervioso, la neurona.

3.2.1 Neurona Biológica

La figura 3.1 corresponde a los componentes principales de una célula nerviosa típica del sistema nervioso central. Entre las estructuras fundamentales se encuentran el cuerpo de la célula o soma, un árbol de ramificaciones denominadas dendritas y una fibra tubular denominada axón. [Freeman&Skapura93].

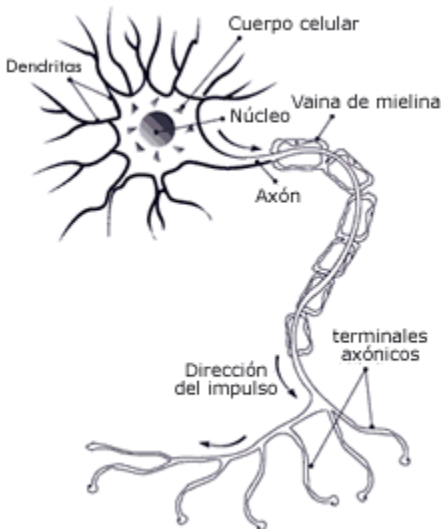


Figura 3.1 – Neurona Biológica.
Fuente: [Gutiérrez09].

Desde un punto de vista funcional, las neuronas constituyen sencillos procesadores de información. Las señales de entrada son captadas por las dendritas, el soma como órgano de cómputo proporciona una señal que es emitida por un canal de salida denominado axón. [Brío&Molina02]

La sinapsis es el punto de unión entre dos neuronas, estas son direccionales, es decir, la información fluye siempre en un único sentido. La sinapsis cumple una función selectiva, bloqueando las señales débiles y permitiendo las más potentes o amplificando las señales débiles y disminuyendo las más potentes. [Guyton&Hall01].

3.2.2 Modelo Neuronal

El componente básico de una red neuronal es la neurona, nodo o elemento de procesamiento, el cual es un dispositivo simple de cálculo que, a partir de un vector de entrada procedente del exterior o de otras neuronas, proporciona una única salida. [Brío&Molina02]
La figura 3.2 muestra la neurona i -ésima con un vector de entrada de n elementos y una única salida.

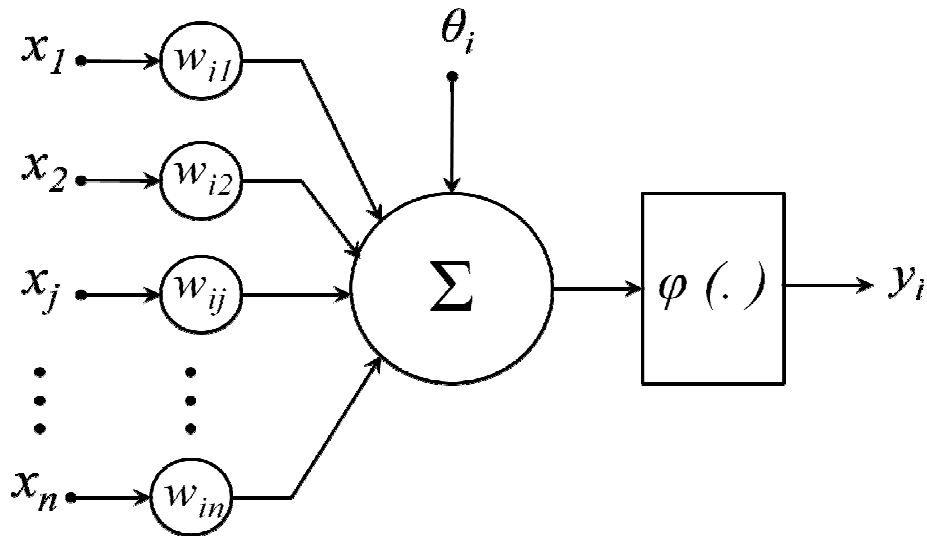


Figura 3.2 – Modelo de Neurona.
Fuente: Elaboración propia

Dentro de los componentes de la neurona se tiene:

- Un conjunto de entradas representadas por el vector x . Este puede ser continuo o discreto.
- Pesos sinápticos w_{ij} , que representa la intensidad de la interacción entre cada neurona presináptica j y la neurona postsináptica i . Si el peso es positivo tenderá a excitar a la neurona postsináptica, si el peso es negativo tenderá a inhibirla.
- Umbral θ_i , el cual controla la activación de la neurona.
- Función de activación o función de transferencia φ , la cual realiza la transformación del valor de activación, que corresponde a la suma ponderada de las entradas por los pesos, la cual tiene como función limitar la amplitud de la salida de la neurona. [Pino01]; [Brío&Molina02]; [Freeman&Skapura93].

La salida de la neurona i -ésima viene dada por la ecuación:

$$y_i = \varphi \left(\sum_{j=0}^n w_{ij} x_j - \theta_i \right) \quad (3.1)$$

La elección de la función de activación depende fuertemente del algoritmo de aprendizaje a utilizar. Dentro de las funciones de activación más utilizadas se tienen las funciones sigmoideas. La figura 3.3 muestra la función sigmoide o logística (a) cuyo rango es $[0,1]$ y la función tangente hiperbólica (b) de rango $[-1,1]$ para x entre -5 y 5 . Ambas funciones monótonas, continuas y diferenciables utilizadas en algoritmos de aprendizaje de gradiente descendiente [Priddy&Keller05].

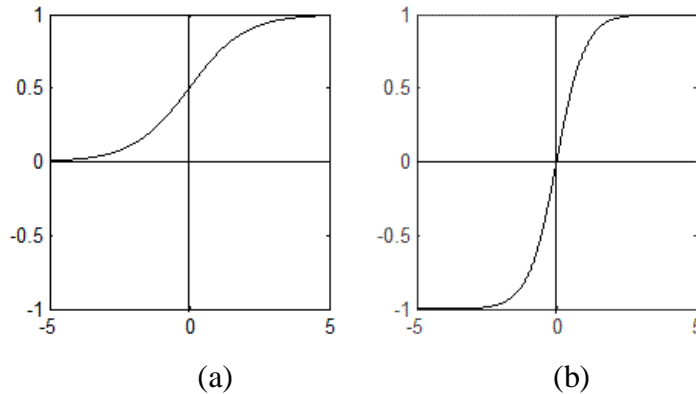


Figura 3.3 – Representación gráfica de función sigmoide y tangente hiperbólica.
Fuente: Elaboración propia

Cuyas ecuaciones son las siguientes:

$$(a) \varphi(x) = \frac{1}{1+e^{(-ax)}}, \text{ con } y \in [0,1] \quad (3.2)$$

$$(b) \varphi(x) = \frac{e^{ax}-e^{-ax}}{e^{ax}+e^{-ax}} = \text{tgh}(x), \text{ con } y \in [-1,1] \quad (3.3)$$

Como muestra la figura 3.4, otras funciones utilizadas son la función lineal o identidad (con $y \in [-\infty, +\infty]$) que devuelve directamente el valor de activación, utilizadas en redes de baja complejidad como el modelo Adaline (a). La función escalón o signo que presenta salidas binarias 0,1 ó -1,1 utilizada en modelos de perceptrón simple, red de Hopfield discreta y la

neurona clásica de McCulloch-Pitts (b). Y, funciones Gaussiana (con $y \in [0,+1]$), lineal a tramos (con $y \in [-1,1]$) y sinusoidal (con $y \in [-1,+1]$) entre otras (c) [Lévy08].

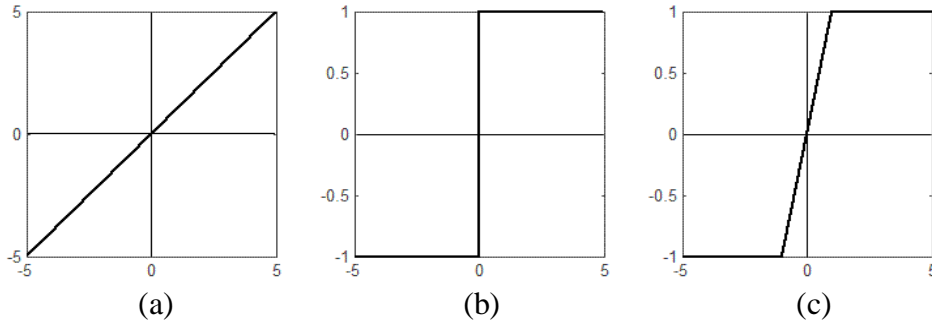


Figura 3.4 – Funciones de activación.
Fuente: Elaboración propia

Cuyas ecuaciones son las siguientes:

$$(a) \varphi(x) = x, \text{ con } y \in [-\infty, +\infty] \quad (3.4)$$

$$(b) \varphi(x) = \begin{cases} +1, & \text{si } x \geq 0 \\ -1, & \text{si } x < 0 \end{cases}, \text{ con } y \in [-1,1] \quad (3.5)$$

$$(c) \varphi(x) = \begin{cases} +1, & \text{si } x > +1 \\ x, & \text{si } -1 \leq x \leq +1 \\ -1, & \text{si } x < -1 \end{cases}, \text{ con } y \in [-1,1] \quad (3.6)$$

3.2.3 Arquitectura

Se denomina arquitectura a la topología, estructura o patrón de conexión de una red neuronal [Brío&Molina02].

La arquitectura de un modelo neuronal determina la clase de problema que la red puede representar, de acuerdo a las características específicas de construcción es posible tratar problemas de clasificación, predicción, control.

En general las neuronas o elementos de procesamientos antes descritos se agrupan en unidades estructurales llamadas capas. El conjunto de una o más capas constituye una red neuronal.

Se distinguen tres tipos de capas:

- Capa de entrada: compuesta por neuronas que reciben datos o señales provenientes del entorno.
- Capa de salida: compuesta por neuronas que proporcionan la respuesta de la red neuronal
- Capa oculta: no tiene contacto con el entorno. Las capas ocultas son de importancia en la capacidad de cómputo de la red, en el sentido en que cada una de ellas realiza una transformación no lineal de un espacio p -dimensional en otro r -dimensional [DelaFuente99].

En relación a su estructura en capas se tiene redes de una capa y multicapas.

Las redes de una capa o monocapa se organizan en una capa como muestra la figura 3.6 (a). Son utilizadas en tareas de auto-asociación, para regenerar informaciones de entrada que se presentan a la red incompleta o distorsionada, o para el reconocimiento de patrones. Dentro este tipo de redes se encuentra el modelo Hopfield. [Lévy08].

Las redes multicapa como muestra la figura 3.5 (b) están compuestas por al menos una capa oculta entre la capa de entrada y salida. Las redes multicapa pueden resolver problemas que limitan a las redes monocapa.

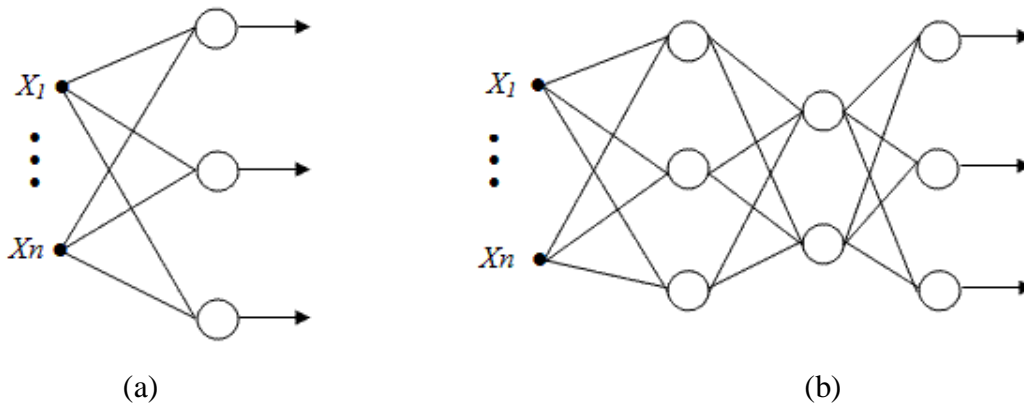


Figura 3.5 – Ejemplo de arquitecturas neuronales.
Fuente: Adaptación [DelaFuente99].

En relación al flujo de datos, las redes neuronales se pueden clasificar en unidireccionales o redes *feedforward* y redes recurrentes o *feedback*.

Las redes recurrentes poseen conexiones de retroalimentación de los estados de salida hacia la entrada del sistema como se muestra la figura 3.6 (a). Las redes recurrentes se utilizan para los casos en que la dinámica del proceso es importante, es decir, cuando los patrones de entrada-salida son secuencias temporales de datos. Dentro este tipo de redes se encuentra el modelo Hopfield.

Las redes *feedforward* las señales neuronales se propagan hacia adelante a través de las capas de la red como lo muestra la figura 3.6 (b). No tiene conexiones hacia atrás. Las arquitecturas de este tipo presentan un mejor comportamiento frente a las estructuras *feedback*, ya que requieren menor capacidad de memoria y llegan más rápidamente a una solución una vez entrenadas [Pino01]. Dentro de este tipo de redes se encuentra el perceptrón multicapa, modelo de la presente tesis

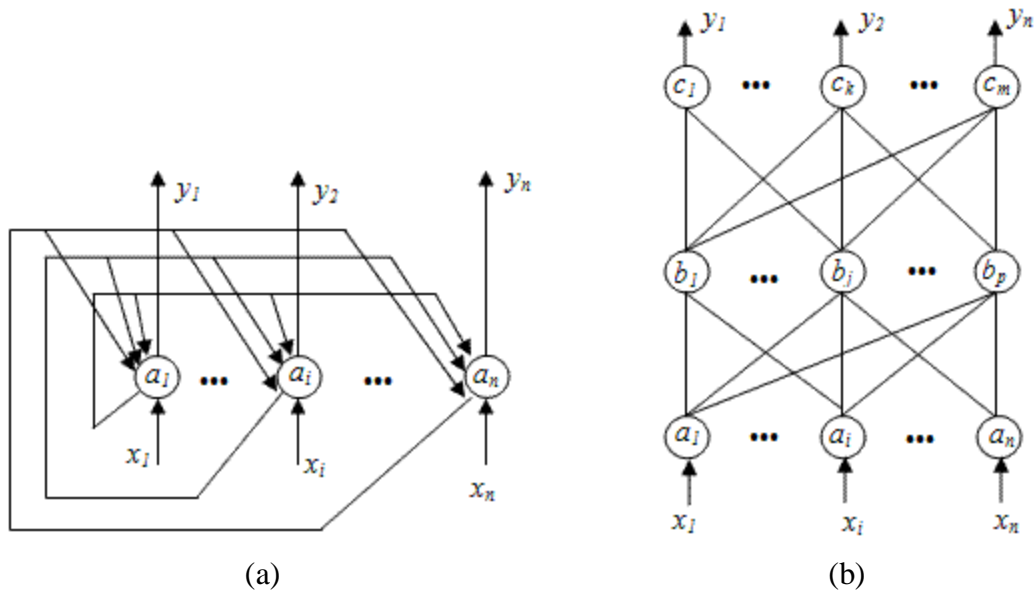


Figura 3.6 – Ejemplos de arquitecturas neuronales
Fuente: Adaptación [DelaFuente99].

3.2.4 Modo de operación

Hay que diferenciar dos modos de funcionamiento antes de explicar cómo se realiza el aprendizaje de una red. El modo de aprendizaje o entrenamiento en el cual se establecen los pesos de la red y el modo de recuerdo, ejecución u operación (redes *off-line*) una vez realizado el ajuste de los pesos en donde se mantienen fijos para operar la red.

Es importante mencionar que existen modelos en que las fases de aprendizaje y recuerdo coinciden, de forma que la red puede aprender y modificar sus conexiones durante el modo de operación, por lo que los pesos varían de forma dinámica cada vez que se presenta al sistema una nueva información, son las llamadas redes *on-line*. [Lévy08].

Una de las principales características de una red neuronal es su capacidad de aprendizaje. El aprendizaje puede definirse como el proceso por el que una red neuronal crea, modifica o elimina sus conexiones, pesos en respuesta a una información de entrada [Lévy08].

Una definición formal es la dada por Minsky en su libro *Perceptrons*, en el define el aprendizaje como:

“El proceso por el cual los parámetros libres de una red neuronal son adaptados a través de un proceso continuo de estimulación proveniente del ambiente al cual la red está conectado. El tipo de aprendizaje está determinado por la forma en la cual se adaptan esos parámetros.” [Minsky69].

Un sistema neuronal parte de un modelo determinado de neurona y de una determinada arquitectura de red, estableciéndose los valores de los pesos iniciales como nulos o aleatorios. Para que la red resulte operativa es necesario su entrenamiento. Este ajuste se puede llevar a cabo mediante dos procesos. Por el modelado de las sinapsis de la red o por la creación o destrucción de neuronas, esta ultima modificando la arquitectura de la red [Brío&Molina02].

El más convencional es el modelado de las sinapsis, que consiste en modificar los pesos sinápticos siguiendo una cierta regla de aprendizaje, que corresponde a la optimización de una función de error o coste.

Si se denomina $w_{ij}(t)$ al peso en el instante t , que conecta la neurona pre-sináptica de etiqueta i con la neurona post-sináptica de etiqueta j , el estado de este peso en el momento $t+1$ viene dado por la expresión:

$$w_{ij}(t + 1) = w_{ij}(t) + \Delta w_{ij}(t) \quad (3.7)$$

Siendo $\Delta w_{ij}(t)$ la variación generada en el peso por la regla de aprendizaje considerando las señales que llegan a la j -ésima neurona en el instante t . El proceso de aprendizaje es usualmente iterativo, actualizándose los pesos sucesivamente hasta que la red alcanza el rendimiento deseado [Lohoz-Beltrá04].

Cumplíndose

$$\frac{dw_{ij}}{dt} = 0 \quad (3.8)$$

Existen dos tipos básicos de aprendizaje que se utilizan para la actualización de pesos: el aprendizaje supervisado y el no supervisado.

- 1) Aprendizaje supervisado: El aprendizaje es realizado por un agente externo a la red que controla el proceso, estableciendo la respuesta que debería generar la red a partir de una determinada entrada. Si existe diferencia se ajusta iterativamente los pesos

hasta que la salida sea la deseada utilizando la información del error cometido en cada paso.

- 2) Aprendizaje no supervisado: Se presenta a la red patrones sin la respuesta que se desea. La red por medio de la regla de aprendizaje estima la función de densidad de probabilidad $p(x)$, a partir de lo cual puede reconocer regularidades en el conjunto de entrada, extraer rasgos, o agrupar patrones según su similitud.

Existen 3 tipos de aprendizaje supervisado: por corrección de error, por refuerzo y de tipo estocástico. Sólo se explicará el aprendizaje por corrección de error, base de los modelos de aprendizaje utilizados en la presente tesis.

El aprendizaje por corrección de error es el tipo de aprendizaje supervisado más utilizado en la práctica. Se basa en el ajuste de los pesos a partir de la diferencia entre los valores deseados y los obtenidos por el sistema, en función del error cometido en la salida. Una de las reglas más sencilla es la siguiente:

$$\Delta w_{ij} = \alpha \cdot x_i(t_j - y_j) \quad (3.9)$$

En Donde:

$\Delta w_{ij}(t)$: variación en el peso de la conexión entre las neuronas i y j .

x_i : la i -ésima entrada a la j -ésima neurona.

t_j : el valor de la salida deseado

y_j : el valor de salida obtenido en la j -ésima neurona.

α : factor o tasa de aprendizaje.

Esta regla de aprendizaje es la utilizada en el perceptrón simple [Rosenblat58]. La cual tiene como limitación la no consideración del error global cometido durante el proceso completo de aprendizaje.

La regla del error mínimo cuadrado (*Least Mean Squared Error*) o “regla Widrow-Hoff”, para el caso de funciones de activación lineal y “regla delta”, para funciones de activación tipo sigmoideo, supera estas limitaciones [Widrow&Hoff60].

Este algoritmo parte de la función global de error cometido por la red durante su entrenamiento:

$$Error_{medio-global} = E[w_{ij}] = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^P \sum_{j=1}^M (y_j^{(k)} - t_j^{(k)})^2 \quad (3.10)$$

Siendo P el número de patrones de aprendizaje de la red y M el número de neuronas de salida. La variación relativa del error puede calcular a través de la expresión:

$$\Delta w_{ij} = -\alpha \frac{\partial E[W_{ij}]}{\partial W_{ij}} = \alpha (t_j - y_j) x_i \quad (3.11)$$

O bien, de forma acumulativa para todos los patrones

$$\Delta w_{ij} = -\alpha \frac{\partial E[W_{ij}]}{\partial W_{ij}} = \alpha \sum_{k=1}^P (t_j^k - y_j^k) x_i^k \quad (3.12)$$

La generalización de la regla delta constituye el denominado algoritmo de aprendizaje *Backpropagation* o retropropagación del error, tratado en detalle más adelante [Lévy08]

3.3 Modelo práctico

De los distintos modelos de Redes Neuronales actualmente existentes, el que ha sido más ampliamente utilizado en tareas de clasificación, identificación, diagnóstico, optimización y predicción es el Perceptrón Multicapa. Debido a sus propiedades, es el modelo que será utilizado para la predicción de problemas de fermentación de la presente tesis. El perceptrón simple junto con su algoritmo de aprendizaje servirá de partida para entender el funcionamiento de un Perceptron Multicapa y su algoritmo de entrenamiento de retropropagación de error (*backpropagation*).

3.3.1 El Perceptrón

El perceptrón simple es un modelo unidireccional, compuesto por dos capas de neuronas, una sensorial o de entradas, y otra de salida [Brío&Molina02].

El perceptrón es utilizado para problemas simples de clasificación de patrones, y como base para entender redes más complejas. [Demuth&Beale08]. El perceptrón trabaja con patrones de entrada binarios y permite discriminar entre dos clases linealmente separables, lo que limita su aplicación [Bishop04].

Un conjunto de elementos que pertenecen a un espacio n -dimensional se dice linealmente separable si existe un hiperplano de dimensión $n-1$ que separe al conjunto en dos clases [DelaFuente99].

La salida del perceptrón con n neuronas de entrada y m de salida, viene dado por la ecuación:

$$y_i = f \left(\sum_{j=1}^n w_{ij} x_j - \theta_i \right), \quad \forall i, 1 \leq i \leq m \quad (3.13)$$

La función de activación de las neuronas de salida es de tipo escalón por lo que la salida queda de la siguiente manera:

$$y_j = \begin{cases} 1, & \text{si } \sum_{j=1}^n w_{ij} x_j \geq \theta \\ 0, & \text{si } \sum_{j=1}^n w_{ij} x_j \leq \theta \end{cases} \quad (3.14)$$

Cada neurona del perceptrón representa una clase. Dado un vector de entrada, una neurona puede responder con 0 si no pertenece a la clase que representa y con 1 si pertenece. Como se mencionó anteriormente es posible demostrar que una neurona tipo perceptrón permite discriminar entre dos clases separadas mediante una línea recta al trabajar en dos dimensiones [Brío&Molina02].

Considérese una neurona de tipo perceptrón con dos entradas x_1 y x_2 , la salida viene dada por:

$$y = \begin{cases} 1, & \text{si } w_{1,1}x_1 + w_{1,2}x_2 \geq \theta \\ 0, & \text{si } w_{1,1}x_1 + w_{1,2}x_2 < \theta \end{cases} \quad (3.15)$$

Dos regiones de clasificación se forman por la recta divisora L como muestra la figura 3.7. Esta línea es perpendicular con la matriz de pesos W y cambia de intercepto según el umbral. La recta divisora L se puede orientar y mover escogiendo los valores de los pesos y el umbral para determinar los espacios de clasificación [Demuth&Beale08].

La ecuación de la recta L está dada por la ecuación:

$$w_{1,1}x_1 + w_{1,2}x_2 - \theta = 0 \quad (3.16)$$

O bien

$$x_2 = -\frac{w_{1,1}}{w_{1,2}}x_1 + \frac{\theta}{w_{1,2}} \quad (3.17)$$

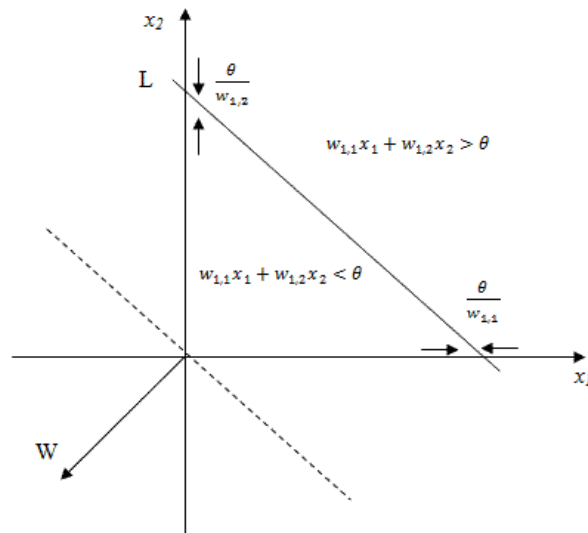


Figura 3.7 – Regiones de decisión en el plano.
Fuente: Adaptación [Brío&Molina02].

El perceptrón se ve limitado para representar funciones no separables linealmente como es el caso de la función lógica or-exclusivo o XOR [Minsky69]. Sin embargo el incluir más capas en la arquitectura lo que se conoce como perceptrón multicapa, permite la representación de funciones no separadas linealmente.

3.3.1.1 Algoritmo de Aprendizaje

El algoritmo de aprendizaje del perceptrón es de tipo supervisado por corrección de error. Los algoritmos de este tipo ajustan los pesos a partir de un conjunto de entrenamiento compuesto por patrones de entrada y salida [Allende&Salas03].

Sea un conjunto de p patrones x^μ , $\mu=1, \dots, p$, con sus salidas deseadas t^μ y pesos iniciales aleatorios. Al presentar un patrón μ -ésimo, si la respuesta que proporciona el perceptrón es correcta, no se actualizarán los pesos, si es incorrecta, se modificarán según la regla de Hebb por lo que se tiene:

$$\Delta w_{ij}^{\mu}(t) \begin{cases} 2\varepsilon \cdot t_i^{\mu} x_j^{\mu}, & \text{si } y_i^{\mu} \neq t_i^{\mu} \\ 0, & \text{si } y_i^{\mu} = t_i^{\mu} \end{cases} \quad (3.18)$$

De esta forma es posible escribir la expresión de regla de aprendizaje del perceptrón como:

$$\Delta w_{ij}^{\mu}(t) = \varepsilon \cdot (t_i^{\mu} - y_i^{\mu}) x_j^{\mu} \quad (3.19)$$

La tasa o ritmo de aprendizaje ε controla el proceso de aprendizaje. Un valor pequeño implica un aprendizaje lento, mientras que uno muy grande puede conducir a oscilaciones de entrenamiento, al tener variaciones muy amplias de los pesos [Brío&Molina02].

3.3.2 Perceptrón Multicapa

El perceptrón multicapa MPL es el modelo de red neuronal artificial más utilizado en la práctica para la resolución de problemas de clasificación como de regresión [Lévy08].

El perceptrón multicapa surge del estudio de las limitaciones funcionales de las redes *feedforward* monocapa como es el caso del perceptrón al añadir más capas a la estructura para buscar la solución de problemas no linealmente separables como es el caso de la representación de la función lógica XOR.

Una de las características más importantes del perceptrón multicapa es su capacidad como aproximador universal, un MLP puede aproximar con el nivel de precisión deseada, cualquier función derivable y acotada [Allende&Salas03].

La estructura de un MPL se presenta en la figura 3.8. Sea x_i las entradas de la red, y_i las salidas de la capa oculta y z_k las salida de la capa final y las globales de la red, w_{ij} los pesos de la capa oculta con θ_j sus umbrales, w'_{kj} los pesos de la capa de salida con θ'_k sus umbrales. La operación de un MLP con una capa oculta y neuronas de salida lineal se expresa matemáticamente de la siguiente manera:

$$z_k = \sum_j w'_{kj} y_j - \theta'_k = \sum_j w'_{kj} f\left(\sum_i w_{ji} x_i - \theta_j\right) - \theta'_k \quad (3.20)$$

Siendo las funciones utilizadas de tipo sigmoide. Figura 3.3.

Esta es la arquitectura más común, aunque existen variantes como incluir funciones no lineales en las neuronas de salida para la solución de problemas de clasificación, incluir más capas ocultas, utilizar otras funciones de activación, limitar el número de conexiones entre una neurona y las de la capa siguiente, introducir dependencias temporales o arquitecturas recurrentes [Werbos90].

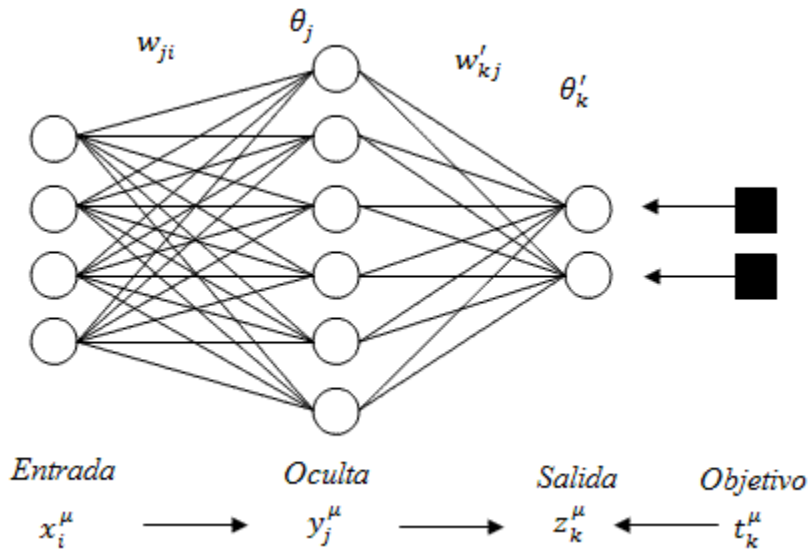


Figura 3.8 – Arquitectura de Perceptrón Multicapa.
Fuente: Adaptación [Brío&Molina02].

3.3.2.1 Aprendizaje por retropropagación de errores o *Backpropagation*.

La adaptación de los pesos de cada una de las capas de un MLP no es tan simple como en un perceptrón de una capa. Existe un problema de relacionar las variaciones de los pesos con una reducción de la función de error y luego implementar un algoritmo que sea capaz de recorrer de forma efectiva el espacio de estados de la superficie del error hasta encontrar un vector de pesos óptimos en cada capa de la red.

La solución a este problema es el algoritmo por retropropagación del error o *Backpropagation* [Rumelhart86]. Su nombre proviene de la forma como se propaga el error hacia atrás, desde la capa de salida a la de entrada, modificando los pesos de las capas intermedias y permitiendo así su aplicación en modelos de redes de dos o más capas.

El nombre se utiliza normalmente para el algoritmo de entrenamiento aunque muchos autores denominan *Backpropagation* a la arquitectura de red neuronal que utiliza este tipo de entrenamiento como es el caso del Perceptrón Multicapa.

Sea un Perceptrón Multicapa de tres capas, como el explicado en el punto anterior. Dado un patrón de entrada x^μ , ($\mu=1, \dots, p$), la operación global de la arquitectura se expresa como la ecuación 3.20.

Las funciones de activación de las neuronas ocultas son de tipo sigmoideo como las funciones 3.2 y 3.3. La función costo es la del error cuadrático medio:

$$E(w_{ji}, \theta_j, w'_{kj}, \theta'_k) = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_k \left[t_k^\mu - f \left(\sum_j w'_{kj} y_j^\mu - \theta'_k \right) \right]^2 \quad (3.21)$$

La minimización del algoritmo se basa en el método de gradiente descendiente, en este caso se mostrará un gradiente respecto de los pesos de la capa de salida y otro respecto de la capa oculta.

$$\delta w'_{kj} = -\varepsilon \frac{\partial E}{\partial w'_{kj}} \quad (3.22)$$

$$\delta w_{ji} = -\varepsilon \frac{\partial E}{\partial w_{ji}} \quad (3.23)$$

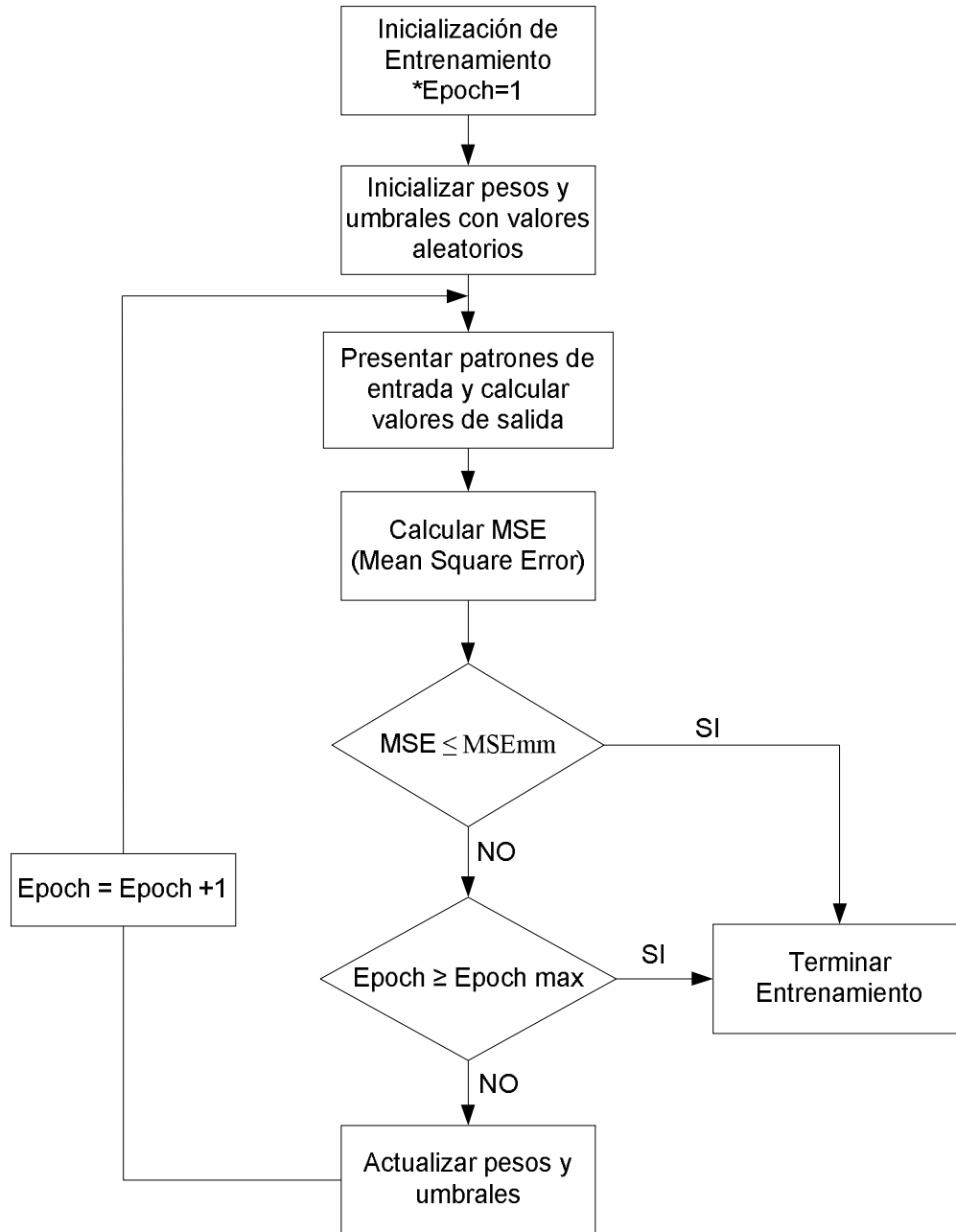
Las expresiones de actualización se obtienen derivando las expresiones.

$$\delta w'_{kj} = \varepsilon \sum_{\mu} \Delta_k'^{\mu} y_j^{\mu}, \text{ con } \Delta_k'^{\mu} = [t_k^{\mu} - f(v_k'^{\mu})] \frac{\partial f(v_k'^{\mu})}{\partial v_k'^{\mu}} \quad (3.24)$$

$$\delta w_{ji} = \varepsilon \sum_{\mu} \Delta_j^{\mu} x_i^{\mu}, \text{ con } \Delta_j^{\mu} = \left(\sum_k \Delta_k'^{\mu} w_{kj} \right) \frac{\partial f(v_j^{\mu})}{\partial v_j^{\mu}} \quad (3.25)$$

El procedimiento se lleva a cabo en un principio con establecer aleatoriamente los pesos y umbrales iniciales. Luego para cada patrón μ del conjunto de aprendizaje primero se lleva a cabo una fase de ejecución para obtener la respuesta de la red ante el patrón μ -ésimo, segundo se calcula las señales de error $\Delta_k'^{\mu}$ y Δ_j^{μ} , tercero se calcula el incremento parcial de los pesos y los umbrales debido a cada patrón μ . Luego es posible calcular el incremento total actual de los pesos $\delta w'_{kj}$ y δw_{ji} . Por último se actualizan los pesos y umbrales y se calcula el error actual (3.21), $t=t+1$, si el resultado no es satisfactorio se vuelve a calcular las señales de error [Brío&Molina02].

La figura 3.9 muestra un diagrama con los pasos generales del algoritmo de aprendizaje por retropropagación del error.



*Epoch o ciclos de entrenamiento.

Figura 3.9 – Diagrama de flujo de flujo con pasos de entrenamiento
Fuente: Adaptación [Moghadassi09].

3.4 Redes neuronales en la detección y el diagnóstico de fallas.

El desarrollo actual en instrumentos de medición, permiten almacenar un gran volumen de datos de los procesos industriales. Estos datos puede ser aprovechados para desarrollar sistemas de detección y diagnóstico de fallas, pudiéndose a partir de esta información generarse patrones que puedan identificar las condiciones de fallas.

El monitoreo, que engloba estos procedimientos tiene como objetivo garantizar la seguridad de los procesos industriales. Para esto el monitoreo debe detectar la presencia de fallas, a partir de la información extraída de los datos medidos del proceso. Luego de haber detectado las fallas es preciso identificar las variables más relevantes de las fallas, para su posterior diagnóstico, determinando la causa del problema para corregir y en el mejor de los casos eliminar las fallas permanentes del proceso [Chiang01].

Existe una gran variedad de técnicas para la detección y diagnóstico de fallas, basados en modelos cuantitativos y cualitativos y una tendencia hoy en día de métodos basados en data histórica, estos últimos tienen una ventaja importante debido a que no requieren desarrollar un modelo matemático preciso del proceso.

Dentro de estas técnicas se encuentran las basadas en el uso de inteligencia artificial mediante sistemas expertos que intentan reproducir el comportamiento de los expertos humanos. El diagnóstico de fallas es una tarea que se basa en el conocimiento y experiencia del sistema a tratar, por lo tanto puede ser de utilidad el uso de sistemas expertos [Georgeff&Firschein85].

Las Redes Neuronales son útiles para resolver problemas en aquellas tareas de clasificación, identificación, diagnóstico, optimización y predicción en las que se cuenta con más datos que conocimientos específicos para obtener una solución. La habilidad de las redes neuronales artificiales de aprender a través del entrenamiento, ingresando patrones normales de operación y patrones donde se producirán fallas, las hace útiles para la predicción y diagnóstico.

La naturaleza no lineal, y la capacidad de detectar complejas relaciones entre sus entradas, convierte a las redes neuronales en una herramienta potente para la resolución de problemas bioquímicos, como es el caso en particular de la utilización de la técnica para predecir problemas en fermentaciones vínicas, tema de la presente tesis.

Los modelos de Perceptrón Multicapa son capaces de generalizar condiciones defectuosas no incluidas en el conjunto de entrenamiento, números son los trabajos que demuestran que el MPL es efectivo para la detección, diagnóstico, y predicción de fallas, los cuales serán tratados en el siguiente punto.

3.5 Aplicaciones

Numerosos son los trabajos realizados en la detección y diagnóstico de fallas en procesos industriales mediante Redes Neuronales y muchos de estos aplicados al área bioquímica. La bibliografía revisada muestra una predominante aplicación de las Redes Neuronales Artificiales a la tarea de la identificación de anomalías desde la perspectiva del reconocimiento de patrones [Dietz&Kiech88], [Himmelblau89], [Sorsa91], [Barschforff92], [Ranaweera94].

Las redes neuronales artificiales se presentan como una herramienta de aproximación funcional a tener en cuenta en todo problema de identificación de sistemas con características no lineales. Estas características han multiplicado el número de aplicaciones de RNA a la detección y aislamiento de anomalías basados en modelos [Sorsa91], [Chow93], [LosArcos93], [Ayoubi&Isermann94], [Polycarpou&Vemuri95].

En la operación de procesos productivos, Minchao [Minchao97] presenta un sistema de monitoreo en línea para una turbobomba de alimentación de combustible a un motor de reacción. El autor entrena una red neurona-difusa para identificar y aislar tres clases de fallas ocasionadas por la apertura anormal de válvulas, utilizando la información de un vector de ocho parámetros de entrada compuesto por presiones y velocidades en diferentes puntos, cuyas tendencias de cambio con el tiempo son similares para diferentes tipos de fallas.

El trabajo realizado por Chow [Chow93] presenta una forma económica de diagnosticar motores de inducción pequeños en tiempo real para detectar fallas incipientes en los devanados y problemas en los rodamientos; mostrando la factibilidad de usar redes neuronales artificiales en situaciones industriales reales. Las entradas corresponden a las señales de corriente (I) y velocidad del motor (Ω), ambas en estado estacionario; las salidas son las tres condiciones indicativas del estado del motor: bueno, regular y pobre respectivamente.

En la detección de fallas, Quezada y Noriega proponen un sistema de detección de fallas utilizando redes de perceptrón multicapas. El sistema lineal supervisado es un reactor de oxígeno disuelto simulado. Son entradas a la red, las entradas medibles del sistema y el estado actual de este. El detector de fallas se entrena para localizar parámetros defectuosos y estimar su magnitud. El detector de fallas está formado por un par de redes de perceptrón multicapas, cada red detecta un tipo diferente de falla. Los autores demostraron que el empleo de Perceptrones multicapa es efectivo en la estimación de fallas [Quezada&Noriega97].

En procesos de fermentación, Ascencio, Butler y Payne [Leal96], presentan un estudio de instrumentación de un proceso de fermentación a través de redes neuronales. En él, utilizan redes *feed forward* usando retropropagación, empleando el algoritmo de aprendizaje de Levenberg - Marquardt para la estimación robusta de biomasa en la producción de antibióticos con buenos resultados.

Por otro lado, el trabajo realizado por Baruch, Hernandez, Pozo y Cortes presenta un modelo matemático no lineal de un proceso biotecnológico aerobio de un sistema de fermentación por lote. Se propone un control neuronal indirecto adaptable con término integral utilizando una red neuronal recurrente de identificación. La red representa un aproximador de salida de la planta que proporciona parámetros y estados a un controlador lineal que genera la señal de control de forma tal que la concentración de la biomasa pueda ser regulada [Baruch05].

En el área bioquímica, Millán y Ostojich presentan un estudio de predicción mediante redes neuronales en la transferencia de masa de frutas osmóticamente deshidratadas, para esto se desarrollo un modelo neuronal artificial compuesto por cinco neuronas de entrada y dos capas ocultas de procesamiento de información, compuestas por cinco neuronas cada una, utilizando funciones sigmoides como medio de comunicación. La arquitectura neuronal desarrollada y entrenada mediante el algoritmo de Levenberg – Marquardt permitió predecir más del 90% de la variabilidad de los datos en los fenómenos de transferencia estudiados, constituyéndose en un modelo alternativo a las ecuaciones paramétrica desarrolladas hasta el momento [Millán&Ostojich05].

Capítulo 4: Metodología

4.1 Introducción

Los problemas de fermentación tienen un impacto directo en la productividad y calidad del vino. La detección temprana de fermentaciones problemáticas, antes de los 3 primeros días sería de gran utilidad al enólogo, lo que permitiría tomar medidas correctivas adecuadas para garantizar que la vinificación concluya con éxito, asegurando una óptima calidad.

Los modelos basados en redes neuronales artificiales son utilizados para el reconocimiento de patrones no lineales característicos de los procesos biológicos y como una útil herramienta para la detección de fallas y el control de procesos. Son capaces de detectar complejas relaciones entre sus entradas. Esto es de gran utilidad ya que una de las características de los procesos bioquímicos es la complejidad de las interrelaciones de las variables del proceso. Además la habilidad de las redes neuronales artificiales de aprender a través del entrenamiento en lugar de descripciones formales, las convierte en una herramienta alternativa para modelar procesos de variables con interrelaciones complejas.

En aplica Redes Neuronales Artificiales para la predicción de problemas de fermentación. Los datos proporcionados para el estudio corresponden a la tesis doctoral titulada “Monitoreo de fermentaciones vnicas por medio de espectroscopia infrarroja mediana y técnicas de minería de datos”. Los datos fueron recogidos a partir de 24 estanques de fermentación de *Cabernet Sauvignon*. Las fermentaciones se llevaron a cabo en una bodega del Valle del Maipo el año 2002. Entre 30 y 35 muestras fueron tomadas por fermentación en función de la duración de la vinificación. En total se analizaron 33 compuestos correspondientes a azúcares, alcoholes, ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados, lo que generó aproximadamente 22.000 datos [Urtubia06a].

4.2 Base de datos

Antes de aplicar técnicas de predicción, es necesario conocer las características de la base de datos analizada, con el fin de escoger la mejor arquitectura neuronal.

4.2.1 Características

Los datos proporcionados para el estudio provienen de un estudio de monitoreo por medio de espectroscopia infrarroja mediana y técnicas de minería de datos. Para la utilización de espectroscopia se desarrollaron diferentes tipos de calibraciones para la cuantificación de azúcares, alcoholes y ácidos orgánicos, en fermentaciones normales y anormales. Utilizando un procedimiento de validación externa se encontró un error de predicción porcentual promedio que varió entre un 6 y un 8% dependiendo del compuesto analizado. Finalmente se

utilizaron estas calibraciones para monitorear las 24 fermentaciones del presente estudio [Urtubia06a].

Los datos se encuentran por fermentación, clasificados en base a criterios de azúcar residual y tiempo de duración de vinificación en días, contando con fermentaciones normales, y problemáticas, de estas últimas fermentaciones paradas y lentas.

4.2.2 Compuestos analizados

En total se analizaron 33 compuestos correspondientes a azúcares, alcoholes, ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados. La tabla 4.1 muestra los compuestos que componen la base de datos.

Tabla 4.1 – Compuestos analizados en fermentaciones industriales de *Cabernet Sauvignon*.

Azúcares (g/L)	Compuestos Nitrogenados (mg/L)	
Glucosa	Amonio	Tirosina
Fructosa	Cloruro de Amonio	Cisteína
Alcoholes (g/L)	Arginina	Metionina
Glicerol	Prolina	Lisina
Alcohol *	Triptófano	Valina
Ácidos orgánicos (g/L)	Acido Aspártico	Leucina
Acido Tartárico	Acido Glutámico	Fenilalanina
Acido Málico	Serina	Isoleucina
Acido Cítrico	Glicina	
Acido Succínico	Glutamina	
Acido Láctico	Histidina	
Acido Acético	Treonina	
Densidad (g/mL)	Alanina	

* % v/v

Fuente: [Urtubia06]

4.2.3 Fermentaciones normales y problemáticas

Fermentaciones paralizadas o incompletas son definidas como aquellas con un contenido de azúcar residual mayor en el vino al final de la fermentación. Enólogos consideran una fermentación completa o seca con un contenido de azúcar residual de 0,2% a 0,4%; lo que equivale de 2 a 4 g/L de azúcares C5 y C6 [Boulton96]. Los azúcares en este estudio corresponden a los azúcares fermentables las hexosas glucosa y fructosa. Una

fermentación lenta es definida como aquella que tardan un mayor tiempo necesario para el consumo de azúcar. En promedio, una fermentación normal dura de 7 a 10 días [Urtubia06a].

Tabla 4.2 – Condiciones iniciales, finales y clasificación de fermentaciones.

Clasificación	Cuba	Días	Azúcar Inicial (g/L)	Azúcar Final (g/L)	Densidad Inicial (mg/mL)	Alcohol
N	1	7	142,12	0	1095	10.7
N	2	7	193,02	0.21	1095	11.4
N	3	9	184.5	0.81	1093	11.8
N	4	11	144.57	0	1102	13.9
N	5	11	230	0.64	1103	14.4
N	6	11	230.36	0.7	1097	11.1
N	7	12	161.34	0	1093	12.3
N	8	12	216,66	0.45	.	13.3
N	9	12	155.1	0.32	1086	11.4
L	10	14	192.49	0	1104	11.5
L	11	14	193.81	0	1103	11.3
L	12	14	225.45	0.21	1100	12.8
L	13	14	234.72	0.37	1105	11.9
L	14	14	204.2	1.93	1104	12.7
L	15	16	156.59	0	1100	13
L	16	16	232.12	0.8	1096	12.3
L	17	15	203.26	0.83	1103	10.4
L	18	17	189.42	1.21	1087	12.4
L	19	22	234.02	0.46	1104	12.5
P	20	8	119.56	13.46	1098	12.6
P	21	11	157.65	7.06	1091	11.1
P	22	11	261.31	3.03	1103	11
L/P	23	19	145.49	3.09	.	12
L/P	24	22	152.56	2.98	1095	12.5

Fuente: Adaptación [Urtubia06]

Las 24 fermentaciones se clasifican en base a criterios de azúcar residual y tiempo de vinificación en días. La primera condición que se establece como una fermentación problemática es aquella con un contenido mayor a 2 g/L de azúcar residual. De la tabla 4.2, el azúcar total (>2g/L) no se consume en las fermentaciones 20, 21, 22, 23 y 24. Estas fermentaciones corresponden a fermentaciones paralizadas.

El tiempo de fermentación es otro factor que se toma en cuenta. Se considera 13 días como punto para determinar la clasificación. Cualquier fermentación que dure mayor tiempo que este, es designada como lenta incluso si el contenido de azúcar residual finalmente cae por debajo de 2 g/L. Utilizando este criterio, de la fermentación 10 a la 19 son lentas, mientras que las fermentaciones 23 y 24 son lentas y por último paralizadas. [Urtubia06a].

En base a los criterios mencionados, se tiene 9 fermentaciones normales correspondientes a un 37.5% y 15 problemáticas correspondientes a un 62.5%. De las 15 fermentaciones problemáticas, 10 corresponden a lentas (42%), 3 paralizadas (13%), y 2 lentas y paralizadas (8%). La tabla 4.2 muestra la clasificación y las condiciones iniciales y finales de las 24 fermentaciones.

4.3 Software

Se utilizó el software Matlab versión r2008b con la herramienta de Redes Neuronales de Matlab, *Neural Network Toolbox*, para el diseño, ejecución y simulación de las redes utilizadas. Además se utilizará la herramienta para ajuste de curvas *Curve Fitting Toolbox* para el suavizamiento, ajuste, interpolación y extrapolación de curvas.

El software SPSS 16 se utilizó para análisis de datos, junto con la herramienta para Redes Neuronales *SPSS Neural Networks 16.0*, el cual permite la implementación del algoritmo de aprendizaje *backpropagation* en una arquitectura de Perceptrón [SPSS07].

4.4 Casos analizados

Se realizaron diferentes casos en función de las variables seleccionadas. Las variables glucosa y fructosa se consideran como una sola variable para un mejor desempeño del modelo neuronal.

Se analizarán 8 casos, dependiendo del número de variables y de la forma de ingreso al modelo neuronal. La forma de ingreso entrega patrones de fermentaciones normales y problemáticas de forma distinta. La forma de ingreso analizada corresponde o por puntos o por fermentación. Por puntos, los patrones corresponden a una medición en algún tiempo determinado de la fermentación (o lote), mientras que por fermentación los patrones corresponden a una fermentación completa (o lote). Se explica con más detalle en la sección 4.5.2 ingreso de variables. La tabla 4.3 muestra el resumen de casos utilizados, indicando la forma de ingreso y los compuestos utilizados.

Tabla 4.3 – Casos de estudio analizados

Casos	Ingreso variables		Compuestos Seleccionados							
	Puntos	Fermen.	Densidad	Azúcar	Alcoholes		Ácidos orgánicos		Compuestos Nitrogenados	
					G.A	Glicerol	Todos	Selec.	Todos	Selec.
A	X		X	X	X	X	X	X		X
B	X		X	X	X	X	X	X		
C	X		X	X	X	X		X		
D	X		X	X	X	X		X		X
E	X	X	X	X	X					
F		X	X							
G		X		X						
H		X			X					

Fuente: Elaboración propia

Para el caso de los ácidos orgánicos y los compuestos nitrogenados se analizaron casos donde se incluyen todos los compuestos y en los cuales se incluye una selección de ellos. A partir de análisis de perfiles de todos los compuestos, se establecieron 4 ácidos orgánicos seleccionados y 14 compuestos nitrogenados con perfiles definidos. Un compuesto con perfil definido corresponde a uno con una curva promedio similar al de cada lote. La figura 4.1 muestra la diferencia entre dos ácidos orgánicos. El ácido Acético considerado bajo el criterio anterior como un compuesto con un perfil definido y el ácido succínico considerado como un compuesto sin perfil definido. La tabla 4.4 muestra los compuestos seleccionados.

Tabla 4.4 - Ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados seleccionados

Ácidos orgánicos seleccionados (g/L)	Compuestos Nitrogenados seleccionados (mg/L)	
Acido Tartárico	Arginina	Tirosina
Acido Málico	Prolina	Cisteína
Acido Láctico	Acido Aspártico	Metionina
Acido Acético	Acido Glutámico	Valina
	Glutamina	Leucina
	Histidina	Fenilalanina
	Alanina	Isoleucina

Fuente: Elaboración propia

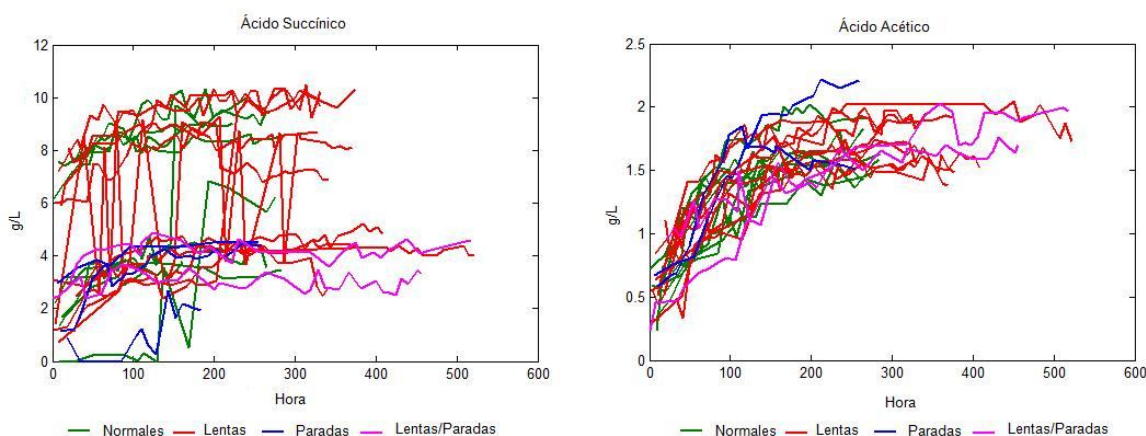


Figura 4.1 - Comparación de perfiles ácido succínico y ácido acético.

Fuente: Elaboración propia

Los casos anteriores se analizaron para los tiempos 72, 96 y 256 horas, con excepción de los casos por fermentación los cuales fueron analizados para tiempos 96 y 72 horas debido a la cantidad de variables predictoras que tendría el modelo (numero de compuestos por el numero de observaciones hasta el tiempo 256).

Estos tiempos en conjunto con los casos fueron escogidos con el fin de encontrar un modelo predictivo en el menor tiempo posible y con la información necesaria para establecer el término de una fermentación con éxito.

4.5 Aplicación RNA

4.5.1 Pre tratamiento de datos

Para la construcción, entrenamiento y prueba del modelo neuronal, se realizó una preparación previa de los datos a través de una normalización y un suavizamiento y ajuste de curvas para el ingreso de las variables por fermentación el cual será explicado más adelante.

4.5.1.1 Suavizamiento

Se realizó suavizamiento previo ajuste de curva a los casos ingresados por fermentación con el fin de tener el mismo número de muestras a intervalos iguales de tiempo requeridos para el ingreso al modelo neuronal. Además se realizara suavizamiento de las curvas de densidad para el ingreso de variables por fermentación y por puntos explicados más adelante.

El método utilizado es por regresión local ponderado, el cual consiste en calcular la regresión que mejor ajuste el conjunto de datos formados por las observaciones vecinas al valor para el que se quiere calcular el valor suavizado, ponderado por su distancia. Es preciso para esto definir el *span* que indica el número de observaciones para realizar la estimación [Matlab08]

El método utilizado corresponde al de *Robust loess*, el cual realiza un ajuste con polinomio de segundo grado y tiene como característica ser resistente a los *outlier* como muestra la figura 4.2. Se utilizaron valores de *span* 0.25, 0,5 y 0,75 para controlar el grado de suavizamiento de la función.

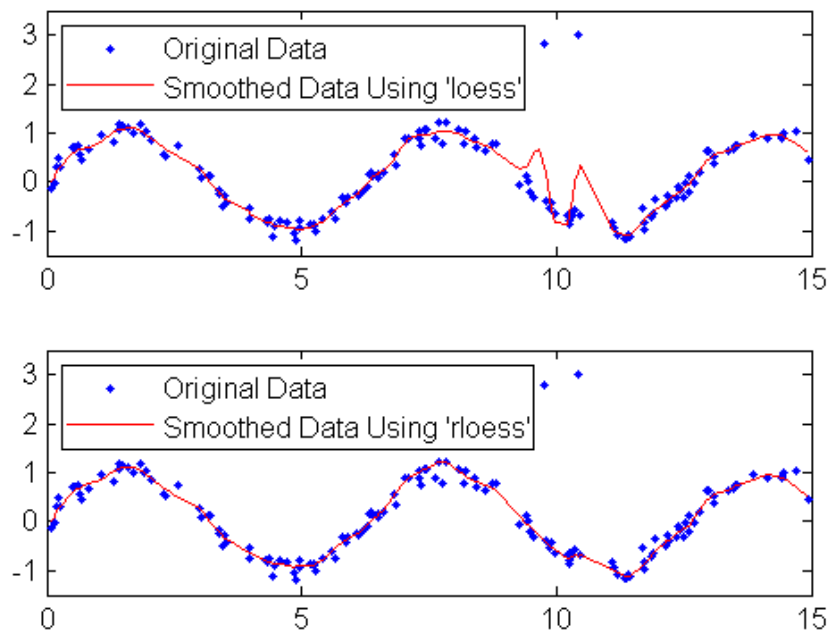


Figura 4.2 – Suavizamiento de datos por métodos de regresión local
Fuente: [Matlab08]

4.5.1.2 Ajuste de curvas

Luego del suavizamiento de las variables seleccionadas para el ingreso por fermentación, se realiza un ajuste polinomial de curvas. El modelo puede ser usado para interpolación o extrapolación. Los modelos polinomiales vienen dados por:

$$y = \sum_{i=1}^{n+1} p_i x^{n+1-i} \quad (4.1)$$

Donde $n+1$ corresponde al orden del polinomio y n al grado del polinomio, con $1 \leq n \leq 9$.

4.5.1.3 Normalización

La normalización de los datos se hace crítica cuando las entradas y las salidas no tienen la misma magnitud. Teniendo en cuenta que los valores de ciertas variables son grandes en comparación con otras (azúcares con ácidos), se corre el riesgo de saturar las funciones de activación de las neuronas, tanto de las capas ocultas, como la de la capa de salida. Conseguir que todas las entradas de la red tengan valores del mismo orden de magnitud, implica que también los valores de los pesos estarán en el mismo rango, lo que ayudará a una convergencia rápida del proceso de aprendizaje y evitara el estancamiento en mínimos locales.

La normalización que se aplicó corresponde a *standardized*, la cual consiste en restar la media y dividir por la desviación típica [SPSS07].

$$x_i = \frac{x_i - \text{media}}{s} \quad (4.2)$$

4.5.2 Ingreso de variables

Como se adelantó en el punto 4.4, para el ingreso de los datos a la red se proponen dos formas de ingreso: por fermentación y por puntos, para la utilización completa de la base de datos existente.

4.5.2.1 Por fermentación

Para este caso se requiere el ajuste de curva de todas las variables con el fin de tener el mismo número de muestra a intervalos iguales de tiempo. Cada curva se interpoló con un valor inicial y final de 0 y 96 horas respectivamente, a intervalos de 8 horas, resultando 13 observaciones por fermentación (o lote). El vector de entrada que ingresara a la red será un vector columna con un número de filas de tamaño igual al número de variables que se ingresan por la cantidad de observaciones. Los patrones de fermentaciones normales y problemáticas corresponden a la fermentación completa (o lote).

4.5.2.2 Por puntos

Para este caso se toma la base de datos sin ningún ajuste, solo la variable densidad es tratada con ajuste de curva de manera que las curvas de densidad de cada fermentación se ajuste a los tiempos en que se midieron las demás fermentaciones, esto debido a que la variable densidad es la única con distintas mediciones. Con este caso, se busca analizar los patrones de fermentaciones normales y problemáticas sin importar la evolución de una fermentación, sino, en su conjunto. Los patrones corresponden a una medición en un tiempo determinado de una fermentación normal o problemática.

4.5.3 Modelo neuronal

Para la predicción de problemas de fermentación se utilizó un modelo de Perceptrón Multicapa, este modelo de red neuronal artificial es el más utilizado en la práctica para la resolución de problemas de clasificación como de regresión [Lévy08]. Una de las características más importantes es su capacidad como aproximador universal [Allende&Salas03].

Los modelos utilizados estarán compuestos por una capa de entrada, cuyas neuronas dependerán de las variables correspondientes para cada caso analizado. Se utilizaron una o dos capas ocultas de procesamiento de información, con funciones sigmoideas como medio de comunicación y una capa de salida compuesta por dos neuronas que representaran las variables dependientes del modelo.

El algoritmo de entrenamiento utilizado es el de retropropagación del error o *Backpropagation* con la variante de gradiente descendiente. La utilización del algoritmo *backpropagation* y sus múltiples variantes supone aproximadamente el 80% de las aplicaciones que se realizan con Redes Neuronales [Caudill&Butler92].

Para los distintos casos, los parámetros que se variaron corresponden al número de capas, las neuronas que componen dichas capas, con sus funciones de activación, a través de ensayo y error hasta encontrar la que tenga mejores resultados de predicción.

4.5.4 Entrenamiento y prueba

El tipo de entrenamiento determinara el modo en que la red procese los registros. Para el modelo es utilizado el tipo de entrenamiento por lote. Este tipo de entrenamiento actualiza las ponderaciones sinápticas sólo tras pasar todo los registros de datos de entrenamiento, es decir, utilizara todos los registros del conjunto de datos de entrenamiento. Este tipo de entrenamiento se suele preferir porque minimiza el error total, y para pequeños conjuntos de datos. El error total que se intenta minimizar es el error de entropía cruzada que utiliza la función de activación *softmax* de la capa de salida del modelo neuronal, durante el entrenamiento.

Para los casos se cuenta con 22 fermentaciones, de las cuales 8 corresponden a normales y 14 problemáticas. De las 14 problemáticas se tienen 10 lentas, 3 paralizadas y por último 1 lenta y paralizada.

Por lo tanto tomando un 70% para entrenamiento y un 30% para prueba aproximadamente (porcentajes basados en bibliografía), se tiene el siguiente número de fermentaciones para los diferentes tipos de fermentación.

Tabla 4.5 – Numero de fermentaciones de entrenamiento y prueba

Clasificación	22 fermentaciones	
	Entrenamiento	Prueba
	70%	30%
Normales	6	2
Lentas	4	2
Paralizada	2	1
Normales	6	2
Problemáticas	6	3

Fuente: Elaboración propia

Se considera para las dos formas de ingreso de las variables, el mismo lote de fermentaciones para entrenamiento y prueba, con el fin de poder sacar conclusiones que no se vean afectadas por distintos lotes escogidos para entrenamiento y prueba. Para esto, los lotes fueron escogidos de manera que se cumpliera un 70% de los datos para entrenamiento y un 30% para prueba y además que en el caso de los lotes con problemas se consideren en esta proporción las fermentaciones lentas y paradas. Esto debido a que las entradas a la red deben contener suficiente información representativa del conjunto de datos, en este caso particular de las 22 fermentaciones.

En base a estos criterios las fermentaciones para entrenamiento y prueba son las siguientes:

Tabla 4.6 - Fermentaciones para entrenamiento y prueba

Clasificación	22 lotes	
	Entrenamiento	Validación
NORMALES	1	6
	2	7
	3	
	4	
	5	
PROBLEMATICAS	9	
	10	17
	11	18
	12	
	13	
	20	21
	22	

Fuente: Elaboración propia

4.5.5 Evaluación del rendimiento

La evaluación del rendimiento de una Red Neuronal entrenada se realiza mediante el uso de un grupo de datos que no haya participado en el proceso de aprendizaje, lo que se conoce como el grupo de *test* o prueba.

La evaluación del rendimiento de la red se realizara a través del porcentaje de fermentaciones clasificadas correctamente, y del análisis de curvas ROC (*Receiver Operating Characteristic*).

4.5.5.1 Tablas de Clasificación

Las tablas de clasificación muestran un resumen de los porcentajes de clasificación para cada variable dependiente. Además del error de predicción. Para los casos con función de activación softmax en la capa de salida, la tabla indica la función de error que corresponde al error de entropía cruzada (*Cross Entropy Error*). Por el contrario, para los casos con función de activación hiperbólica en la capa de salida, la tabla indica la función de error que corresponde a la suma de los cuadrados del error (*Sum of Squares Error*).

4.5.5.2 Curvas ROC

Las curvas ROC proporcionan una representación visual de la sensibilidad y especificidad para todos los cortes posibles en un único gráfico. [SPSS07].

Para este caso, la curva ROC consiste en la representación gráfica del porcentaje de verdaderos positivos (sensibilidad) en el eje de las ordenadas, contra el porcentaje de falsos positivos (1-especificidad) en el eje de las abscisas, para diferentes puntos de corte aplicados sobre la salida que proporciona la red neuronal (un valor cuantitativo aproximadamente entre 0 y 1). Los verdaderos positivos corresponden a las fermentaciones normales clasificadas como normales, mientras que los falsos positivos corresponden a las fermentaciones problemáticas clasificados como normales.

El grafico para este caso muestra dos curvas, una para la categoría problemática (0, azul) y una para la categoría normal (1, verde). Debido a que hay sólo dos categorías, las curvas son simétricas con respecto a una línea de 45 grados (la cual no se muestra) que va de la esquina superior izquierda del gráfico a la esquina inferior derecha.

Para este análisis se utilizará el área bajo la curva como medida resumen. Esta medida se interpreta como la probabilidad de clasificar correctamente un par de fermentaciones, una normal y otra problemática, seleccionados al azar, fluctuando su valor entre 0,5 y 1. Esta medida ha sido validada durante los últimos años para evaluar la precisión diagnostica de un instrumento [Palmer&Montaño99].

4.6 Diagrama metodología

De manera de simplificar los pasos para el desarrollo del modelo neuronal, la figura 4.3 muestra el diagrama de la metodología utilizada.

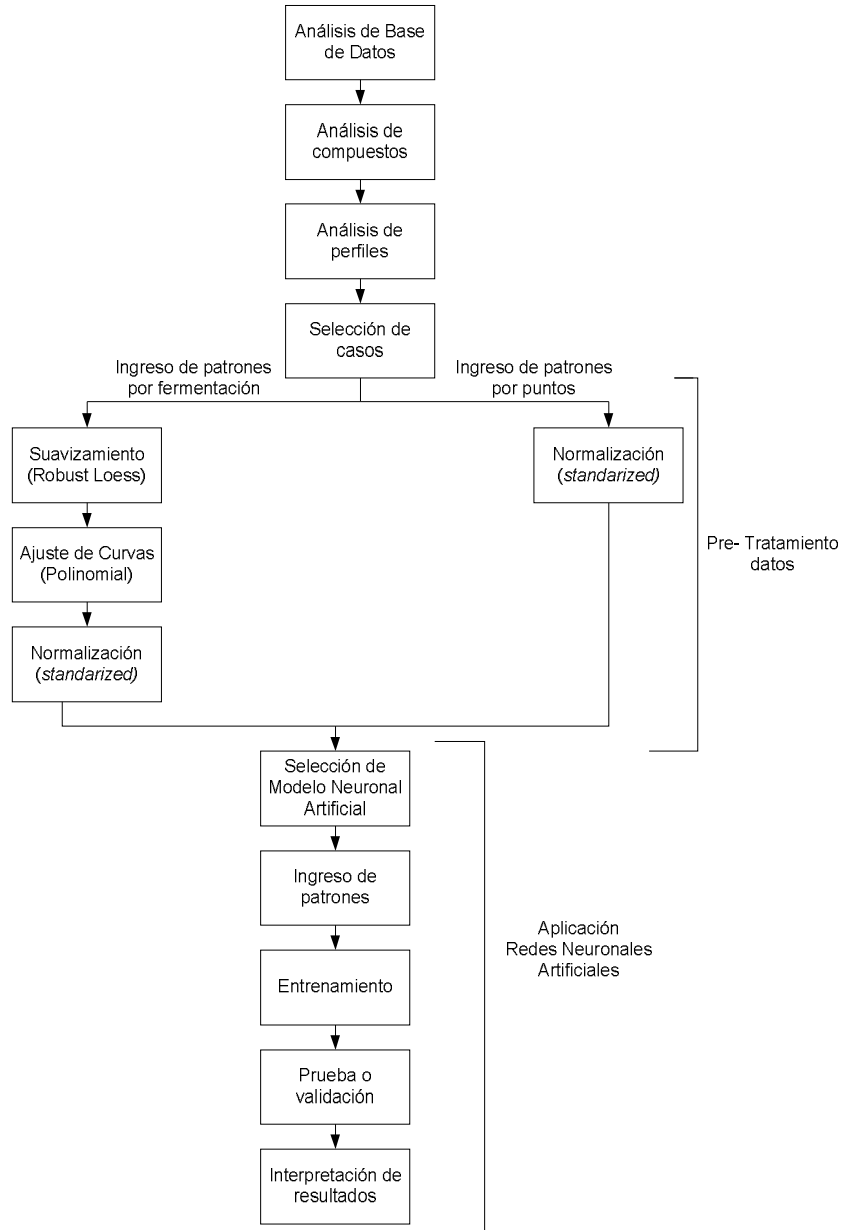


Figura 4.3 – Diagrama de flujo de metodología

Fuente: Elaboración propia

Capítulo 5: Resultados y discusiones

5.1 Introducción

En este capítulo se analizarán los resultados de la utilización de un modelo Neuronal Artificial para predecir problemas en el proceso de fermentación del vino. Los resultados obtenidos fueron analizados de acuerdo al porcentaje de clasificación, predicción y al análisis de curvas ROC. Para las dos formas de ingreso de las variables.

5.2 Casos por puntos

Para el análisis por puntos, aproximadamente el 70% de los datos se asignaron a la muestra de entrenamiento de la red, y un 30% como muestra de prueba. El resumen de muestras para los diferentes tiempos se presenta en la tabla 5.1, donde n corresponde al número de patrones para entrenamiento y prueba (para esta forma de ingreso, la suma de las muestras de cada fermentación).

Tabla 5.1 – Resumen de muestras utilizadas

	Resumen 22 lotes					
	256		96		72	
Muestra	n	%	n	%	n	%
Entrenamiento	203	67,8%	77	67,5%	54	65,9%
Prueba	97	32,2%	37	32,5%	28	34,1%
Validos	301	100%	114	100%	82	100%

Fuente: Elaboración propia

Para asignar las muestras de entrenamiento y prueba se utilizó una variable de partición, esta variable asigna cada caso del conjunto de datos a la muestra de entrenamiento y prueba. Los casos con un valor positivo (1) se asignaron a la muestra de entrenamiento, y los casos con un valor 0 a la muestra de prueba. Esto con el fin de permitir la réplica de resultados.

La información resumida de las arquitecturas utilizadas para cada caso se presenta en la tabla 5.2. La tabla muestra el número de capas utilizadas, el número de neuronas correspondiente a cada capa y las funciones de activación de las capas ocultas y las capas de salida. Para todas las arquitecturas se utilizó un tipo de entrenamiento por lote, y como algoritmo de entrenamiento gradiente descendiente, explicados anteriormente en metodología. Por lo que no se incluyen en la tabla 5.2 como información de arquitectura.

Tabla 5.2 – Resumen de arquitectura utilizada para diferentes casos por puntos.

Caso	Tiempo	N° de capas ocultas	N° neuronas 1 capa oculta	N° neuronas 2 capa oculta	Función de activación capas ocultas	Función de activación capa de salida
A	256	2	30	10	Hiperbólica	Softmax
	96	1	4	x	Hiperbólica	Softmax
	72	2	30	10	Hiperbólica	Softmax
B	256	1	10	x	Hiperbólica	Softmax
	96	1	7	x	Hiperbólica	Hiperbólica
	72	1	30	x	Hiperbólica	Softmax
C	256	1	7	x	Hiperbólica	Hiperbólica
	96	2	15	15	Hiperbólica	Hiperbólica
	72	2	20	20	Hiperbólica	Hiperbólica
D	256	1	10	x	Hiperbólica	Softmax
	96	1	5	x	Hiperbólica	Softmax
	72	1	30	x	Hiperbólica	Softmax
E	96	2	10	7	Hiperbólica	Softmax
	72	1	1	x	Hiperbólica	Softmax

Fuente: Elaboración propia

Los parámetros mostrados en la tabla 5.2 corresponden a las arquitecturas que obtuvieron mejores resultados de clasificación, predicción y de rendimiento (curvas ROC), ante diferentes pruebas de arquitecturas (mínimo de 5 ensayos por arquitectura). Para cada caso, el número de capas, el número de neuronas para cada capa y las funciones de activación se escogieron a través de ensayo y error.

Dependiendo de la función de salida, las funciones para el error que busca minimizar el algoritmo de entrenamiento puede diferir. Para la función softmax utilizada en la capa de salida, la función de error que busca minimizar el algoritmo de entrenamiento corresponde al error de entropía cruzada (*Cross Entropy Error*). La función Softmax toma un vector de argumentos de valor real y lo transforma en un vector cuyos elementos quedan comprendidos en el rango (0,1) y suman 1, por lo tanto, pueden ser interpretadas como probabilidades condicionadas de pertenencia a una clase [SPSS07]. Para la función de activación hiperbólica en la capa de salida, el error que busca minimizar el algoritmo de entrenamiento corresponde a la suma de los cuadrados del error (*Sum of Squares Error*).

Para cada arquitectura, los resultados de predicción y clasificación, y rendimiento (curvas ROC), se presentan en la tabla 5.3. La tabla muestra los porcentajes de fermentaciones problemáticas y normales clasificadas correctamente, el porcentaje global de clasificación, el error de predicción, el error de entropía cruzada (*Cross Entropy Error*) para los casos con función de activación Softmax en la capa de salida, la suma de los cuadrados del error (*Sum of Squares Error*) para los casos con función de activación hiperbólica en la capa de salida y el área bajo la curva para la evaluación del rendimiento.

Tabla 5.3 – Resumen de resultados de entrenamiento

Tiempo	Caso	Entrenamiento						
		Clasificación correcta %			Error de predicción %	Error		Área ROC
		0	1	general		ESS	EEC	
256	A	89,5	55,1	72,9	27,1	x*	112,3	0,747
	B	82,9	64,3	73,9	26,1	x	112,2	0,732
	C	81,9	82,7	82,3	17,7	29,4	x	0,819
	D	76,2	56,1	66,5	33,5	x	130,9	0,665
	E**	x	x	x	x	x	x	x
96	A	69,2	81,6	75,3	24,7	x	39,4	0,815
	B	87,2	60,5	74,0	26,0	13,8	x	0,773
	C	76,9	73,7	75,3	24,7	12,9	x	0,794
	D	86,5	92,3	89,5	10,5	x	24,6	0,931
	E	74,4	76,9	75,6	24,4	x	88,9	0,739
72	A	85,7	46,2	66,7	33,3	x	30,7	0,713
	B	78,6	76,9	77,8	22,2	x	26,2	0,818
	C	89,3	88,5	88,9	11,1	5,4	x	0,902
	D	67,9	61,5	64,8	35,2	x	33,3	0,638
	E	68,3	81,4	74,8	25,2	x	70,9	0,759

* Caso con función de activación softmax en la capa de salida

** Caso E no es analizado para un tiempo 256.

Fuente: Elaboración propia

La tabla 5.3 se interpreta de la siguiente manera. Para el caso A a las 256 horas, 94 de 105 patrones de fermentaciones normales han sido clasificados correctamente, lo que corresponde a un 89,5% de clasificación. Por el contrario, 54 de 98 patrones de fermentaciones problemáticas han sido clasificados correctamente, lo que corresponde a un 55,1% de clasificación. El porcentaje general de clasificación corresponde a los patrones normales y problemáticos clasificados correctamente, es decir 148 de 203 patrones, correspondientes al 72,9%. El error de predicción para la muestra de entrenamiento corresponde al 27,1%. Para los casos con función de activación softmax en la capa de salida, la tabla indica la función de error que corresponde al error de entropía cruzada (*Cross Entropy Error*). Por el contrario, para los casos con función de activación hiperbólica en la capa de salida, la tabla indica la función de error que corresponde a la suma de los cuadrados del error (*Sum of Squares Error*).

Para los casos por puntos, los valores de clasificación general varían entre un 60% y 80%. Los mejores resultados se presentan para el caso D, con un tiempo de 96 horas, y el caso C, con tiempos de 256 y 96 horas. Por porcentajes de clasificación por sobre el 80%. Esto se podría explicar por los ácidos orgánicos seleccionados con buen perfil considerado en ambos

casos (Acético, Láctico, Málico y Tartárico) y el rol que tienen estos compuestos en la fermentación. Cabe destacar que el ácido málico desaparece en el transcurso de la fermentación maloláctica y su presencia en el vino indica que esta fermentación no ha tenido lugar o que no ha sido terminada [Delanoë03]. En la práctica se presta atención a la presencia de ácido láctico que se forma durante la fermentación alcohólica, el cual es indicador de un ataque de los azúcares por las bacterias lácticas, con formación de ácido acético. Las concentraciones no deberían pasar los 400 mg/L [Flanzy00].

Debido a la gran variabilidad de los resultados no es posible concluir que la adición de compuestos nitrogenados con perfiles definidos sea la causa de los mejores resultados de clasificación, para el caso D.

Tabla 5.4 – Resumen de resultados de prueba

Tiempo	Caso	Prueba						
		Clasificación correcta %			Error de predicción %	Error		Área ROC
		0	1	global		ESS	CEE	
256	A	82,8	35,9	63,9	36,1	X*	67,8	0,747
	B	72,4	25,6	53,6	46,4	x	69,7	0,732
	C	72,4	43,6	60,8	39,2	24,1	x	0,819
	D	79,3	43,6	64,9	35,1	x	66,1	0,665
	E	x*	x	x	x	x	x	x
96	A	90,5	50,0	73,0	27,0	x	22,0	0,815
	B	42,9	81,2	59,5	40,5	9,7	x	0,773
	C	33,3	81,2	54,1	45,9	9,4	x	0,794
	D	95,7	66,7	84,2	15,8	x	13,7	0,931
	E	38,5	79,5	63,1	36,9	x	43,5	0,739
72	A	47,1	63,6	53,6	46,4	x	21,3	0,713
	B	47,1	90,9	64,3	35,7	x	18,4	0,818
	C	41,2	100,0	64,3	35,7	7,2	x	0,902
	D	64,7	9,1	42,9	57,1	x	22,7	0,638
	E	28,6	93,3	66,7	33,3	x	33,3	0,759

* Caso con función de activación softmax en la capa de salida

** Caso E no es analizado para un tiempo 256.

Fuente: Elaboración propia

Para la validación del modelo, los porcentajes de clasificación bajan considerablemente para los casos C con tiempo 96 y 72 horas, esto puede ser motivo de la detección de falsos patrones que aparecen en los datos de entrenamiento y para esto se sugiere un nuevo análisis

de muestras de entrenamiento y validación (diferentes lotes, diferentes porcentajes de entrenamiento y prueba, por ejemplo 80 y 20%).

El único caso que mantiene su porcentaje de clasificación es el caso D. El caso D tiene un porcentaje de predicción del 84%. Utilizando ácidos orgánicos seleccionados y compuestos nitrogenados, sin embargo como se mencionó anteriormente no es posible concluir que sea la adición de estos compuestos la causa de este mejor poder de predicción, sin embargo debido al papel que juegan estos compuestos en la fermentación del vino, se podría explicar la mejora en los resultados.

Los bajos valores de predicción se pueden explicar por la forma de ingreso de las variables al modelo neuronal. Los patrones de fermentaciones normales y problemáticas no siguen una evolución de la fermentación. Cada patrón que se entrega a la red corresponde a una medición en algún tiempo determinado, sin ninguna relación con la siguiente medición, no pudiendo ser capaz la red de generalizar, es decir, la capacidad de la red de proporcionar una respuesta correcta ante patrones que no han sido empleados en su entrenamiento.

Para evaluar el rendimiento de la red se presentan los valores de área bajo las curvas ROC en la tabla 5.3 y 5.4. Estas medidas se interpretan como la probabilidad de clasificar correctamente un par de fermentaciones, una normal y otra problemática, seleccionados al azar. Los mejores resultados se presentan para los casos D con un tiempo de 96 y el caso C con un tiempo de 256 y 72 horas presentados en la figura 5.1. Los gráficos COR se basan en la muestras de pruebas y entrenamiento.

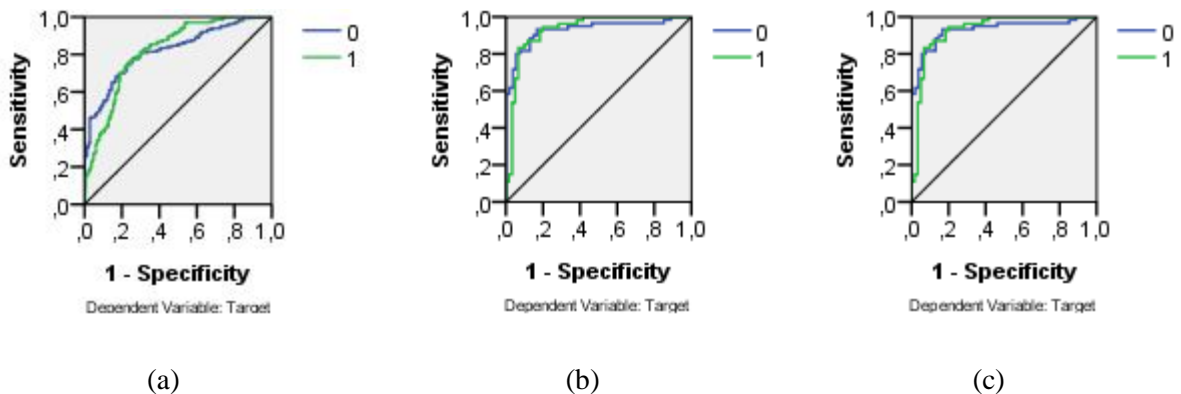


Figura 5.1 - Curvas ROC de los casos con mejores áreas bajo las curvas para caso por puntos
Fuente: Elaboración propia

5.3 Casos por fermentación

Para el análisis por fermentación, aproximadamente el 70% de los datos se asignaron a la muestra de entrenamiento de la red, y un 30% como muestra de prueba. El resumen de muestras para los diferentes tiempos se presenta en la tabla 5.5, donde n corresponde al número de patrones para entrenamiento y prueba (para esta forma de ingreso corresponde a un lote completo normal o problemático)

Tabla 5.5 – Resumen de muestras utilizadas casos por fermentación

Muestra	n	%
Entrenamiento	12	70,6%
Prueba	5	29,4%
Válidos	17	100%

Fuente: Elaboración propia

Al igual que para los casos por puntos para las muestras de entrenamiento y prueba se utilizó una variable de partición para asignar cada caso del conjunto de datos a la muestra de entrenamiento y prueba. Los casos con un valor positivo (1) se asignaron a la muestra de entrenamiento, y los casos con un valor 0 a la muestra de prueba. Esto con el fin de permitir la réplica de resultados.

La información resumida de las arquitecturas utilizadas para cada caso se presenta en la tabla 5.6. La tabla muestra el número de capas utilizadas, el número de neuronas correspondiente a cada capa y las funciones de activación de las capas ocultas y las capas de salida. Al igual que para el caso por puntos, para todas las arquitecturas se utilizó un tipo de entrenamiento por lote, y como algoritmo de entrenamiento gradiente descendiente por lo que no se incluyen en la tabla como información de arquitectura.

Tabla 5.6 – Resumen de arquitectura utilizada para diferentes casos por fermentación

Caso	Tiempo	N° de capas ocultas	N° neuronas 1 capa oculta	N° neuronas 2 capa oculta	Función de activación capas ocultas	Función de activación capa de salida
E	96	2	30	30	Hiperbólica	Hiperbólica
	72	2	30	30	Hiperbólica	Hiperbólica
F	72	2	20	10	Hiperbólica	Hiperbólica
G	72	1	15	x	Hiperbólica	Softmax
H	72	2	10	10	Hiperbólica	Softmax

Fuente: Elaboración propia

Los parámetros mostrados en la tabla 5.6 corresponden a las arquitecturas que obtuvieron mejores resultados de clasificación, predicción y de rendimiento (curvas ROC), ante diferentes pruebas de arquitecturas (mínimo de 5 ensayos por arquitectura). Para cada caso, el número de capas, el número de neuronas para cada capa y las funciones de activación se escogieron a través de ensayo y error.

Para cada arquitectura, los resultados de predicción y clasificación, y rendimiento (curvas ROC), se presentan en la tabla 5.7.

Tabla 5.7 – Resumen de porcentaje de clasificación por fermentación

Tiempo	Caso	Entrenamiento						
		Clasificación correcta %			Error de predicción %	Error		Área ROC
		0	1	global		ESS	CEE	
96	E	100	83,3	91,7	8,3	0,9	x*	0,986
72	E	100	100	100	0	0,9	x	1
	F	83,3	83,3	83,3	16,7	1,5	x	0,917
	G	100	85,7	92,3	7,7	x	2,9	0,975
	H	100	100	100	0	x	1,9	0,957

* Caso con función de activación hiperbólica en la capa de salida

Fuente: Elaboración propia

Debido a que las variables predictoras para el ingreso por fermentación corresponden al número de compuestos por la cantidad de observaciones hasta el tiempo determinado, no es posible la incorporación de más variables para estos casos. Sin embargo, es con esta forma de ingreso de variables donde se obtienen los mejores resultados, con porcentajes de clasificación por sobre un 80%

Los mejores resultados se obtienen para el caso E para los dos tiempos 96 y 72, con porcentajes de clasificación por sobre 90%. El mejor caso es a las 72 horas con un 100% de clasificación. Para este caso, se consideró el azúcar, la densidad y el grado alcohólico.

Los mejores resultados se pueden explicar debido a que los patrones de fermentaciones normales y problemáticas corresponden a la fermentación completa hasta el tiempo determinado.

Si se considera que para el caso E, el modelo neuronal es utilizado con 30 variables predictoras (3 compuestos por el número de observaciones hasta el tiempo 72), y que se cuenta con 17 patrones para entrenamiento y prueba, con resultados de un 100% de clasificación, es posible deducir que se pueden obtener buenos resultados con una mayor cantidad de compuestos (adición de ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados), contando con un

número mayor de patrones de fermentaciones normales y problemáticas (lotes de fermentación), que por el caso por puntos. Sin embargo con el resultado obtenido con este caso, solamente se puede concluir que hasta un tiempo de 72 horas con los compuestos azúcar, densidad y grado alcohólico es posible clasificar correctamente fermentaciones problemáticas y normales con un 100%.

Los casos F, G y H muestran que las variables azúcar, densidad y grado alcohólico por separado entregan buenos resultados de predicción por sobre el 80%.

Además de la forma de ingreso de las variables predictoras los buenos resultados, se deben a la importancia que tiene la densidad, el azúcar y el grado alcohólico en el desarrollo de la fermentación alcohólica y en los problemas de fermentación. El azúcar tiene una gran importancia para determinar el estado de una fermentación. Es interesante observar que los altos contenidos de azúcar inicial, los cuales se pueden observar al inicio de la fermentación y que son una de las principales causas de fermentaciones problemáticas, permitan explicar los buenos resultados de clasificación.

Se puede explicar también los altos porcentajes de clasificación debido a la densidad, el cual es uno de los parámetros más elementales utilizados para el control y seguimiento de la de la fermentación alcohólica. Por debajo de 1,005 g/mL, si la densidad desciende uno o dos milésimas solamente por día, se puede prever una interrupción de la fermentación antes del consumo completo de azúcar.

La importancia que tiene el grado alcohólico, en la asimilación nitrogenada, lo que paraliza la levadura pudiendo terminar en fermentaciones paralizadas, podría en conjunto con los demás compuestos explicar además los resultados de clasificación.

Tabla 5.8 – Resumen de resultados de prueba

Tiempo	Caso	Prueba						Área ROC
		Clasificación correcta %			Error de predicción %	Error		
		0	1	global		ESS	CEE	
96	E	66,7	100	80	20	1	x	0,986
72	E	100	100	100	0	0,7	x	1
	F	66,7	100	80	20	0,9	x	0,917
	G	100	50	80	20	x	2,2	0,975
	H	100	50	83,3	16,7	x	1,6	1

Fuente: Elaboración propia

A diferencia que en el caso por fermentación, los porcentajes de clasificación no disminuyen para la muestra de prueba, el caso E para un tiempo 72 horas, el porcentaje de predicción del modelo es de un 100%.

Para los casos E con un tiempo de 96 horas, y los casos F, G, H con un tiempo de 72 horas, el porcentaje de predicción del modelo es de un 80%.

La figura 5.2 presenta dos graficas ROC, para el caso E, con un tiempo de 96 (a) y un tiempo de 72 horas (b). Estos valores confirman la precisión diagnostica del modelo. Para los casos por fermentación.

El área bajo la curva de valor 1 para el caso E para un tiempo 72, corresponde al de un instrumento perfecto, ya que permite clasificar sin error el 100% de las fermentaciones. Esto es de gran importancia porque lo que se busca es un modelo que permita la mejor predicción en el menor tiempo posible.

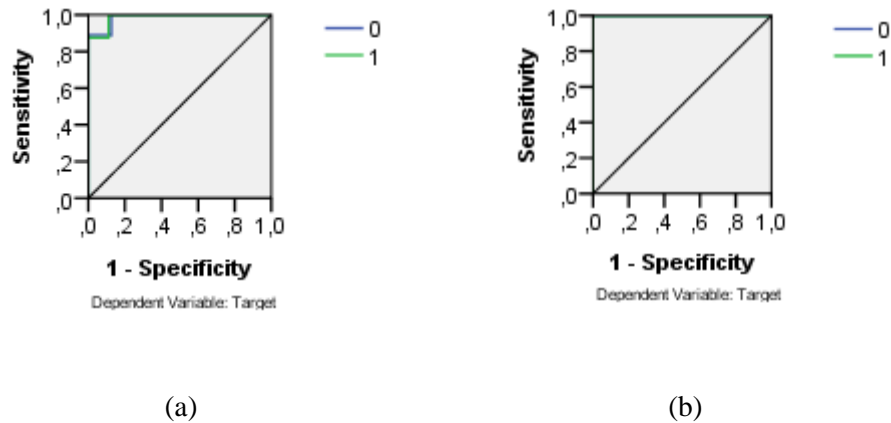


Figura 5.2 - Curvas ROC de los casos con mejores áreas bajo las curvas para caso por lote.
Fuente: Elaboración propia

En resumen, es posible concluir que el ingreso por fermentación (o lote) es el más adecuado para el ingreso de las variables predictoras al modelo. Esto se ve explicado por como son consideramos los patrones de fermentaciones normales y problemáticas, mientras que para el caso por puntos, estos no siguen una evolución de la fermentación (cada patrón que se entrega a la red corresponde a una medición en algún tiempo determinado, sin ninguna relación con la siguiente medición), para el caso por fermentación o lote, los parámetros de fermentaciones normales o problemáticas corresponden a una fermentación completa hasta el tiempo determinado, permitiendo que la evolución de la fermentación sea considerada.

Esta diferencia hace que para el caso por fermentación los porcentajes de predicción del modelo estén por sobre el 80%, encontrando un modelo perfecto de predicción considerando como variables predictoras, el azúcar, la densidad y el grado alcohólico.

La limitancia de esta forma de ingreso es que no es posible, ingresar toda la base de datos para ver los resultados que se tendrían con la adición de ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados, esto debido a la cantidad de fermentaciones que se cuentan para entrenamiento y prueba del modelo.

Una de las causas de la disminución de los porcentajes de clasificación con la muestra de prueba, se puede deber un sobreajuste en el modelo. Este fenómeno aparece cuando el número de parámetros o pesos de la red resulta excesivo en relación al problema a tratar y al número de patrones de entrenamiento disponibles. La consecuencia más directa del sobreajuste es una disminución en la capacidad de generalización del modelo (capacidad de predicción), es decir, la capacidad de la red de proporcionar una respuesta correcta ante patrones que no han sido empleados en su entrenamiento.

La bibliografía sugiere para mejorar la generalización de la red, que la muestra de datos puede ser dividida en tres grupos: entrenamiento, validación y test.

Durante la etapa de aprendizaje de la red, los pesos son modificados de acuerdo a la muestra de entrenamiento. Cuando el número de parámetros o pesos es excesivo en relación al problema, fenómeno conocido como sobreajuste, el modelo se ajusta demasiado a las particularidades irrelevantes presentes en los patrones de entrenamiento en vez de ajustarse a la función subyacente que relaciona entradas y salidas, perdiendo su habilidad de generalizar su aprendizaje a casos nuevos [Palmer00].

Para evitar el problema del sobreajuste, se utiliza un segundo grupo de datos diferentes a los de entrenamiento, denominado grupo de validación, que permite controlar el proceso de aprendizaje.

Si se desea medir de una forma completamente objetiva la eficacia final del sistema construido, la bibliografía aconseja no basarse en el error que se comete ante los datos de validación, debido a que han participado de alguna manera en el proceso de entrenamiento, para esto se utiliza un tercer grupo de datos independientes, denominado grupo de test el cual proporciona una estimación insesgada del error de generalización.

Finalmente con los resultados obtenidos se propone la utilización de Redes Neuronales Artificiales como herramienta de detección de problemas de fermentación de forma temprana, antes de las 72 horas, con la medición de azúcar, densidad y grado alcohólico.

Capítulo 6: Conclusiones

En la presente tesis se ha presentado un modelo de Red Neuronal Artificial capaz de predecir los problemas de fermentaciones vínicas de la variedad *Cabernet Sauvignon*.

El ingreso de las variables predictoras a través de dos formas de ingreso permitió comparar los resultados para poder concluir, de acuerdo a los resultados obtenidos que la forma adecuada de ingreso corresponde al caso por fermentación (o lote)

Para los casos por puntos los mejores resultados obtenidos con la adición de ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados para un tiempo de 96, no permiten concluir que la adición de estos aporten en la predicción de problemas de fermentación, esto debido a la variabilidad de los resultados para el mismo caso con tiempos distintos (72 y 256 horas).

Para el caso C que cuenta con la adición de ácidos orgánicos seleccionados con un buen perfil, los mejores resultados para los tiempos 256 y 72 horas, se ven afectados por los resultados para un tiempo 96. Por esto no es posible concluir también que la adición de ácidos orgánicos seleccionados sea un aporte en la predicción de problemas de fermentación para esta forma de ingreso de variables.

Sin embargo cabe destacar que los tres mejores resultados cuentan con la adición de ácidos orgánicos con perfiles definidos, y se podría analizar la adición de estos con nuevos casos, o analizando solo estos compuestos por separado.

Para el ingreso de las variables por fermentación o lote el modelo ha sido capaz de predecir correctamente el 100 % de los patrones de fermentaciones normales y problemáticas para un tiempo de 72 horas con tan solo 3 compuestos analizados, lo cual es de gran importancia, ya que lo que se busca es un modelo que sea capaz de detectar problemas de fermentación en el menor tiempo posible.

La técnica además ha sido capaz de predecir correctamente los patrones de fermentaciones normales y problemáticas por sobre un 80%, para un tiempo de 72 horas con tan solo un compuesto (azúcar, densidad o grado alcohólico). Lo que demuestra que la técnica es de gran utilidad para el monitoreo de una sola variable.

Si se considera, la importancia de los ácidos orgánicos y de los compuestos nitrogenados en el proceso de fermentación y en particular en el desarrollo de una fermentación exitosa, como se mencionó en el capítulo 2. Es posible concluir que con una cantidad de lotes que permita el ingreso por fermentación de estas variables, se podría encontrar un modelo de RNA, capaz de predecir de forma temprana los problemas de fermentaciones vínicas con buenos resultados de predicción.

Dado que esta no es la realidad, se recomienda analizar por separado ácidos orgánicos y compuestos nitrogenados por fermentación para observar la capacidad de predicción de estas

variables y si en su conjunto son capaces de predecir de forma temprana los problemas de fermentación.

Se recomienda además, realizar estudios para el caso por fermentación con tiempos menores de predicción, que continúen con un 100% de predicción.

Finalmente con los resultados obtenidos se propone la utilización de Redes Neuronales Artificiales como herramienta de detección de problemas de fermentación de forma temprana, antes de las 72 horas, con la medición de azúcar, densidad y grado alcohólico. Presentándolo como un modelo alternativo no paramétrico para la predicción de problemas en fermentaciones vínicas, considerando que el número de patrones de fermentaciones normales y problemáticas juega un papel fundamental para su entrenamiento y validación.

Anexos

Anexo A – Curvas ROC para casos por puntos

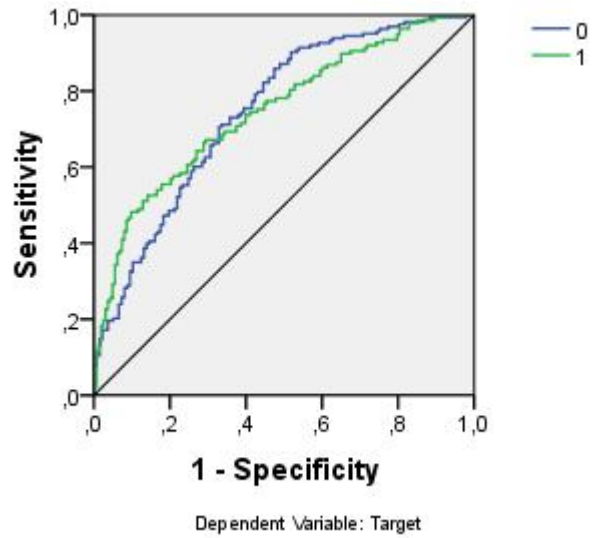


Figura A.1 – Curva ROC para caso A con tiempo 256 horas.
Fuente: Elaboración propia

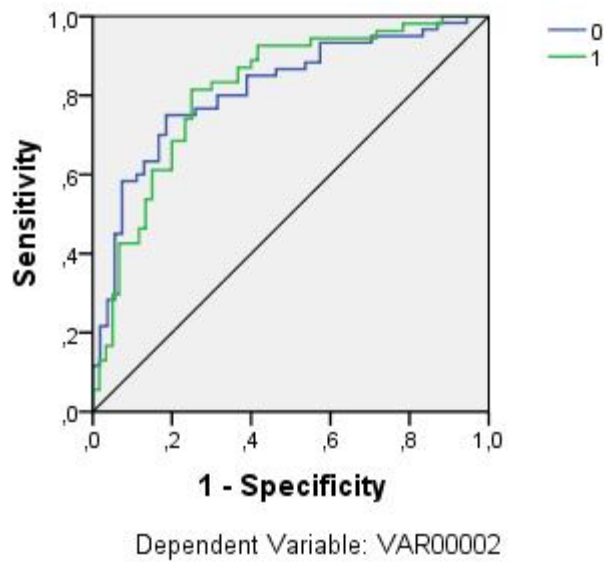


Figura A.2 – Curva ROC para caso A con tiempo 96 horas.
Fuente: Elaboración propia

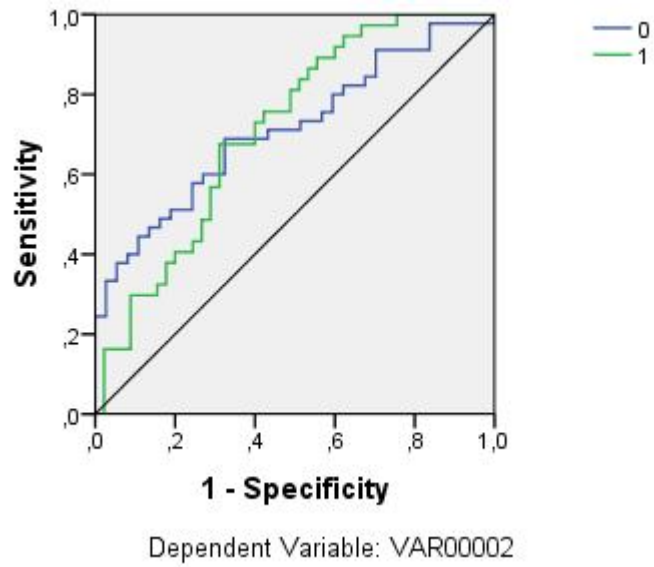


Figura A.3 – Curva ROC para caso A con tiempo 72 horas.
Fuente: Elaboración propia

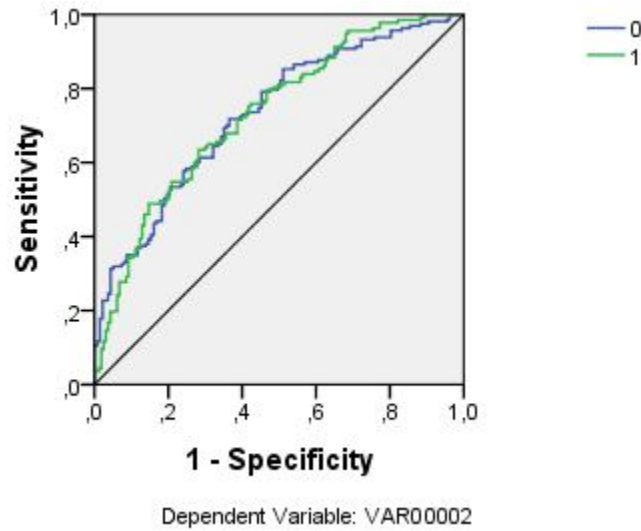


Figura A.4 – Curva ROC para caso B con tiempo 256 horas.
Fuente: Elaboración propia

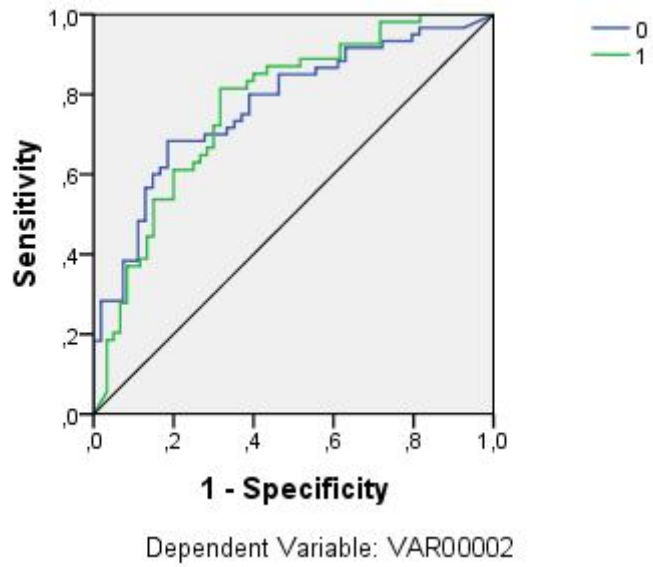


Figura A.5 – Curva ROC para caso B con tiempo 96 horas.
Fuente: Elaboración propia

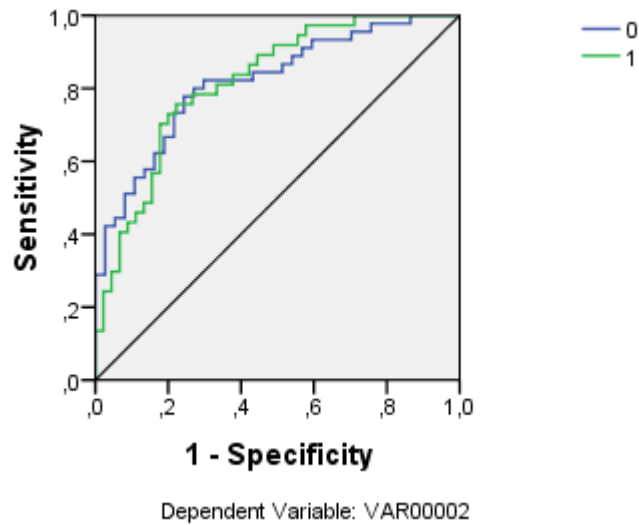


Figura A.6 – Curva ROC para caso B con tiempo 72 horas.
Fuente: Elaboración propia

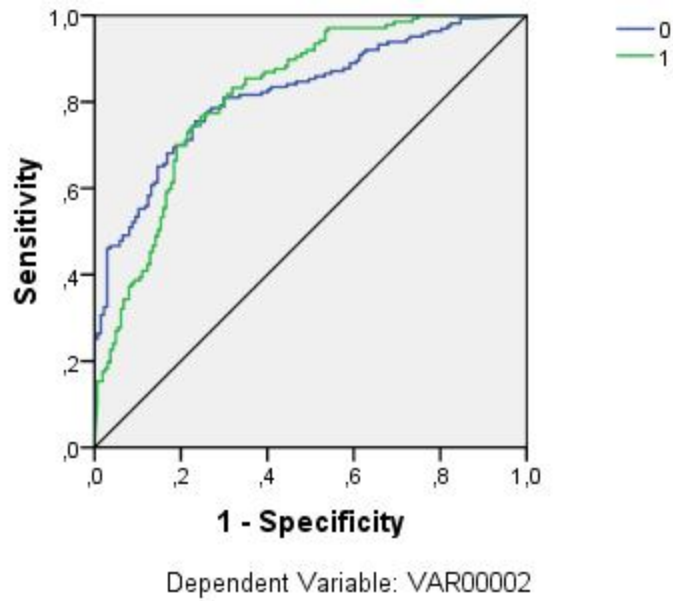


Figura A.7 – Curva ROC para caso C con tiempo 256 horas.
Fuente: Elaboración propia

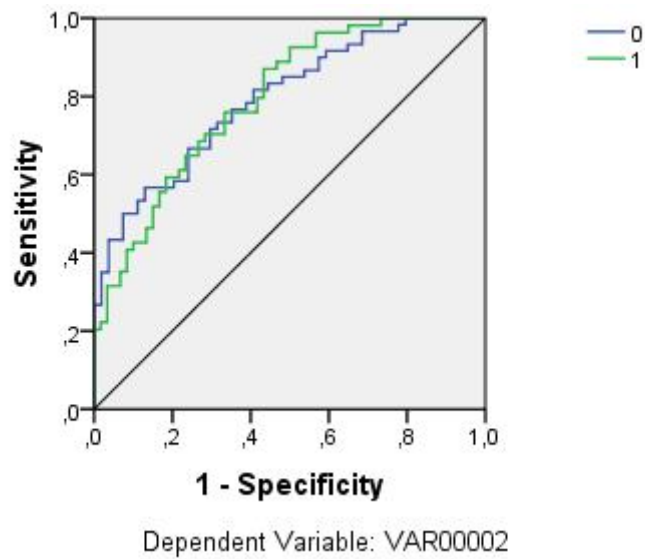


Figura A.8 – Curva ROC para caso C con tiempo 96 horas.
Fuente: Elaboración propia

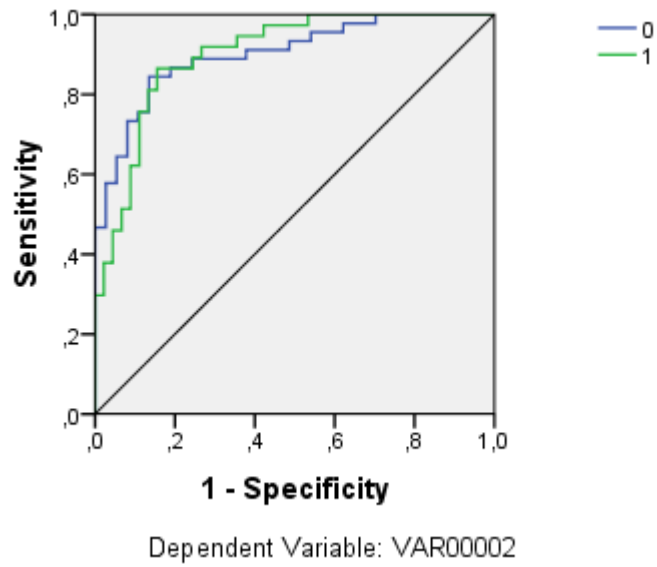


Figura A.9 – Curva ROC para caso C con tiempo 72 horas.
Fuente: Elaboración propia

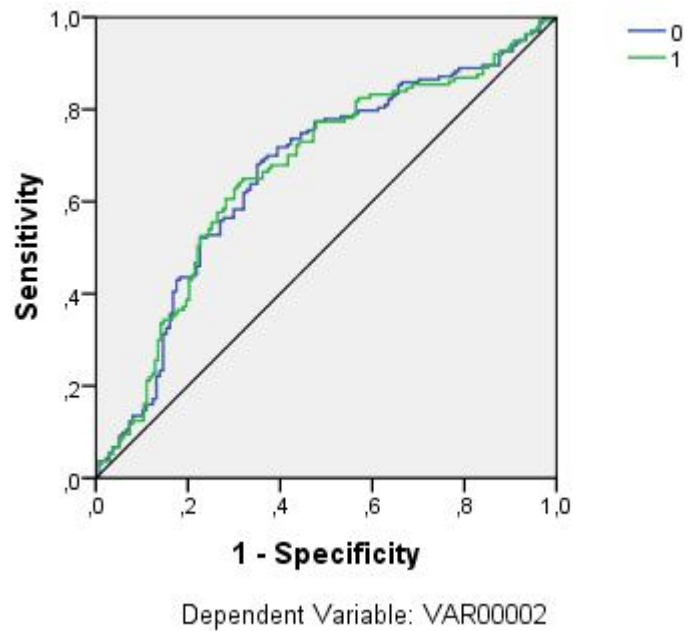


Figura A.10 – Curva ROC para caso D con tiempo 256 horas.
Fuente: Elaboración propia

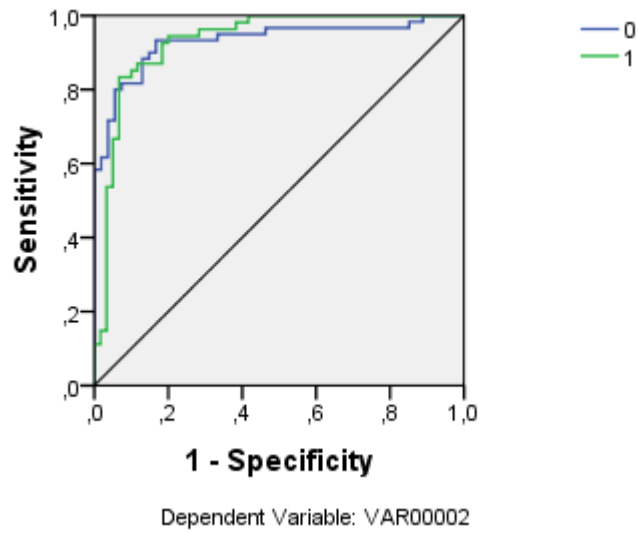


Figura A.11 – Curva ROC para caso D con tiempo 96 horas.
Fuente: Elaboración propia

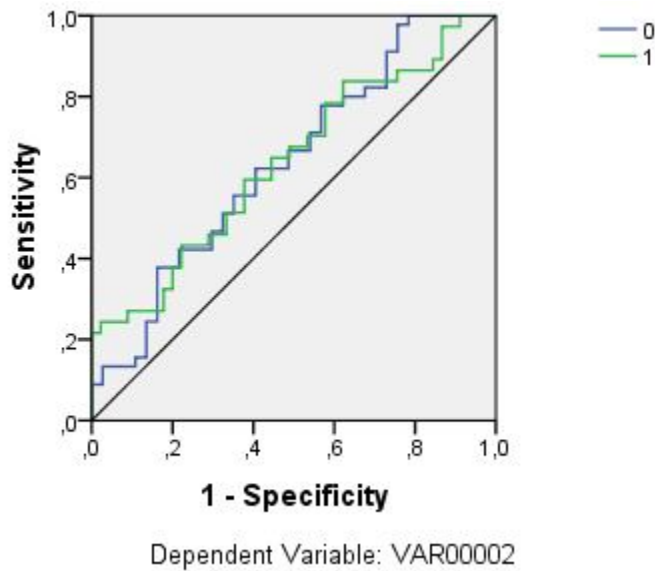


Figura A.12 – Curva ROC para caso D con tiempo 72 horas.
Fuente: Elaboración propia

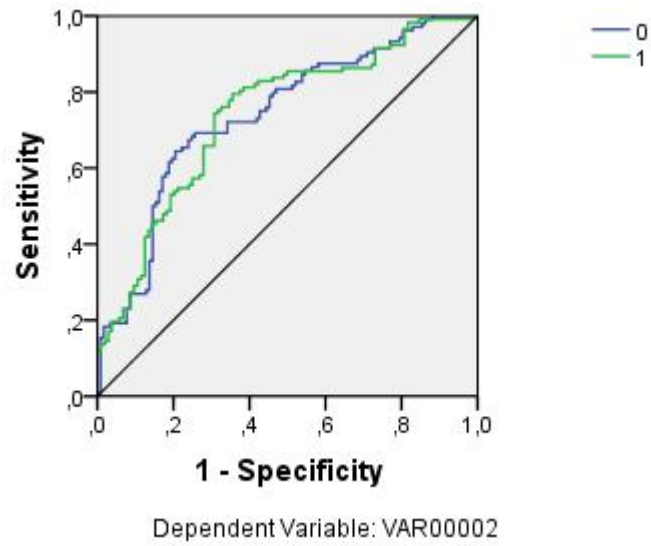


Figura A.13 – Curva ROC para caso E con tiempo 96 horas
Fuente: Elaboración propia

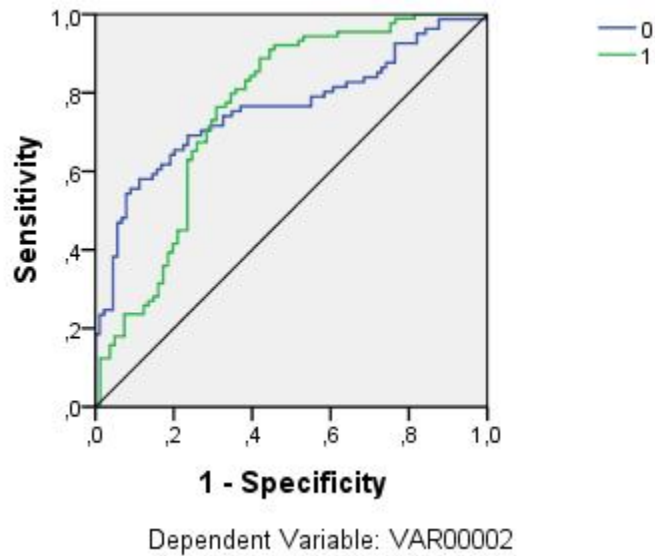
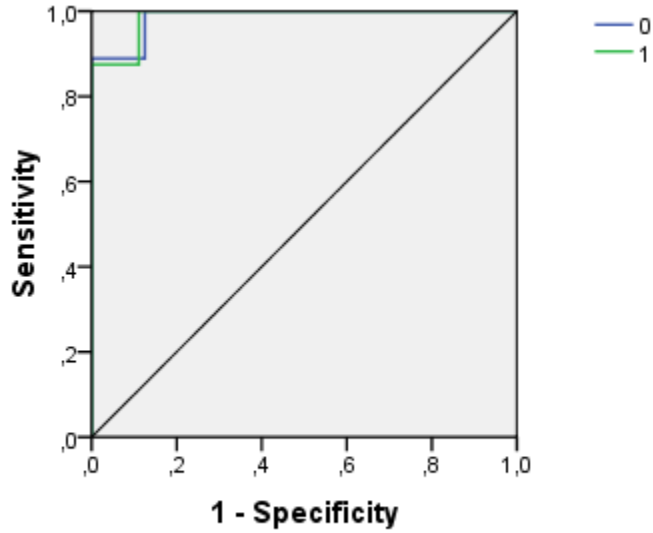


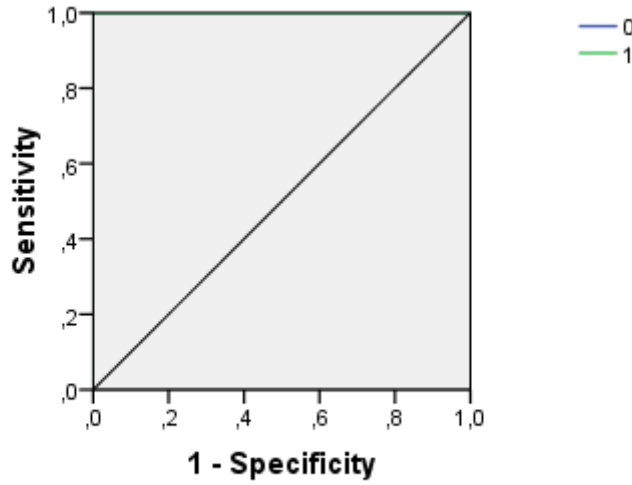
Figura A.14 – Curva ROC para caso E con tiempo 72 horas
Fuente: Elaboración propia

Anexo B – Curvas ROC para casos por fermentación



Dependent Variable: VAR00002

Figura B.1 – Curva ROC para caso E con tiempo 96 horas
Fuente: Elaboración propia



Dependent Variable: VAR00002

Figura B.2 – Curva ROC para caso E con tiempo 72 horas.
Fuente: Elaboración propia

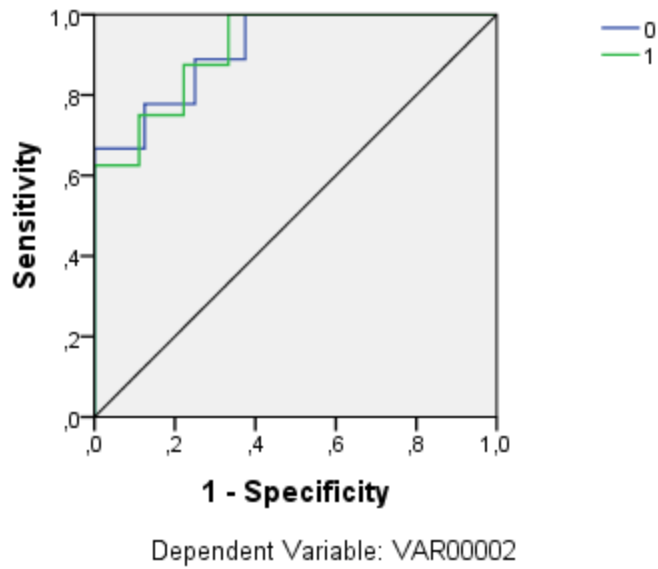


Figura B.3 – Curva ROC para caso F con tiempo 72 horas
Fuente: Elaboración propia

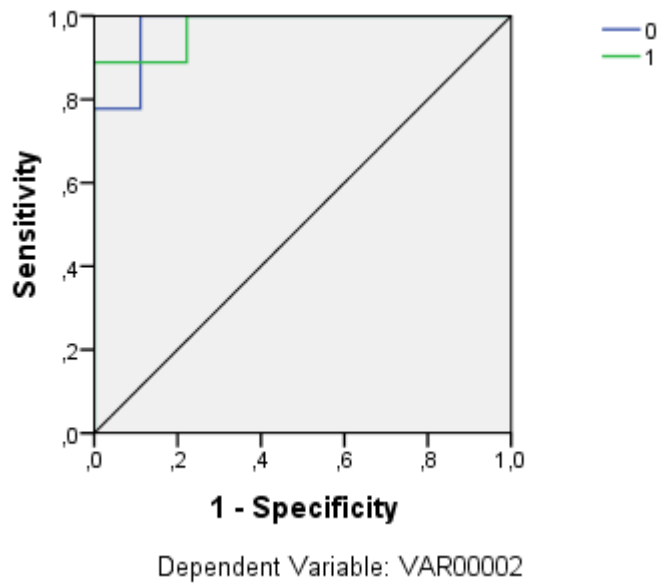


Figura B.4 – Curva ROC para caso G con tiempo 72 horas
Fuente: Elaboración propia

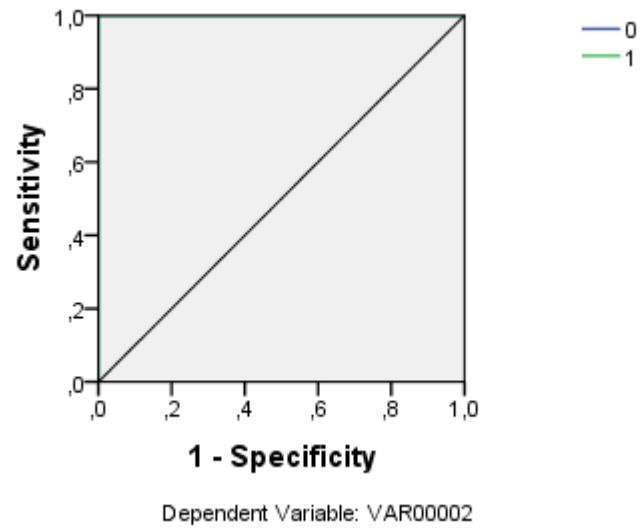


Figura B.5 – Curva ROC para caso H con tiempo 72 horas
Fuente: Elaboración propia

Bibliografía

- [Alexandre&Charpentier98] Alexandre, H.; Charpentier, C. *Biochemical aspect of stuck and sluggish fermentation in grape must*. Journal of Industrial Microbiology, France, v.20, p. 20-27, 1998.
- [Allende&Salas03] Allende, H.; Salas, R. *Artificial Neural Networks in Times Series Forecasting: A Comparative Analysis*. Kybernetika, v.38, n.6, p. 685-707. Chile, 2002.
- [Ayala04] Ayala, M; Durán, M. **Determinantes de la calidad del vino en la industria Chilena**. Tesis Facultad de Economía y Administración. Escuela de Economía y Administración. Universidad de Chile. Santiago, Chile 2004.
- [Ayoubi&Isermann94] Ayoubi, M.; Isermann, R. *Model-based fault detection and diagnosis with neural nets and application to a turbocharger*. IFAC Artificial Intelligence in Real-Time Control, AIRTC, Valencia, Spain, 1994.
- [Baruch05] Baruch, I., et al. **Control neuronal con término integral para un proceso de fermentación**. Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial, México D.F., v.2, n.1, p. 64-69, Ene. 2005.
- [Barschdorff92] Barschdorff, D. *Comparison of Neural and Classical Decision Algorithms. Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes*. IFAC Symposia Series, n.6, 1992.
- [Bishop04] Bishop, C. *Neural Networks and their applications*. Rev. Sci. Instrum., 1994. n.65, p 1803-1832.
- [Bisson99] Bisson, L. *Stuck and Sluggish Fermentations*. American Journal of Enology and Viticulture, p.107-119, 1999.
- [Bisson00] Bisson, L.; Butzke, C. *Diagnosis and Rectification of Stuck and Sluggish Fermentations*. American Journal of Enology and Viticulture, p.159-177, 2000.
- [Blateyron&Sablayrolles01] Blateyron, L; Sblayrolles, J.M. *Stuck and Slow Fermentations in Enology: Statical Study of Causes and Effectiveness of Combined Additions of Oxygen and Diammonium Phosphate*, Journal of Bioscience and Bioengineering, Montpellier, France, v.91, n.2, p. 184-189, , Nov. 2001.
- [Bordeu&Gonzalez00] Bordeu, E; Gonzalez, A. **Niveles de Nitrógeno Fácilmente Aprovechable. Levaduras en Mostos Chilenos**. Dpto. de Fruticultura y Enología, CEVIUC, Chile, 2000.

- [Boulton96] Boulton B., et al. *Principles and Practices of Winemaking*. Chapman Hall, New York, 1996. Chap.4, p 135-176. Chap. 5, p 193.
- [Brío&Molina02] Brío, Bonifacio, M; Molina, Alfredo, S. *Redes Neuronales y Sistemas Difusos*, Alfaomega, 2^a edición, México D.F., 2002. Cap. 1, p 3-37. Cap. 3, p 47-79.
- [Caudill&Butler92] Caudill, M.; Butler, C. *Understanding neural networks: Computer explorations*. V.2. A Bradford Book / MIT Press. Cambridge, 1992.
- [Chiang01] Chiang, L.H. et al. R.D. *Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems*. Springer, p.3-81. 2001.
- [Chow93] Chow, M. et al. *On the application and design of artificial neural networks for motor fault detection* IEEE Trans. on Industrial Electronics, v.40, n.2, p.181-196, Apr. 1993.
- [Cruz99] **Fermentaciones detenidas, un riesgo que no se debe perder de vista**. 2009 (disponible vía Web en http://www.vendimia.cl/revistas/index_neo.php?id=390 visitada en Diciembre del 2009).
- [Cruz09] Cruz, G. Productos Enológicos e Industriales, Paradas de Fermentación (disponible vía Web en http://www.gon-cruz.com/index_archivos/Page4435.htm visitada en Noviembre 2009)
- [Dietz&Kiech88] Dietz, W. Kiech, E. *Pattern based fault diagnosis using neural networks*. Association for Computing, Machinery 1988.
- [Delanoë03] Delanoë, D. et al. **El vino: Del análisis a la elaboración**. Editorial Acribia. Zaragoza España, 2003. p. 7-15, p. 45-74.
- [DelaFuente99] De la Fuente, M. **Aplicaciones de las Redes Neuronales en Supervisión, Diagnóstico y Control de Procesos**. Ed. Equinoccio. Universidad Simón Bolívar, Venezuela, 1999. Cap. 1, p. 11-39, Cap. 2, p 69.
- [Demuth&Beale08] Demuth,H. Beale, M. *Neural Network Toolbox User's Guide For Use with MATLAB™*. The Math Works, Inc. 1992.
- [Flanzy00] Flanzy, Claude. **Enología: Fundamentos Científicos y Tecnológicos**, 2^a Ed., Madrid, 2002. Cap. 1, p. 43-45. Cap. 3, p. 97- 110. Cap. 8, p. 218-221.
- [Freeman&Skapura93] Freeman, J; Skapura, D. **Redes Neuronales: Algoritmos, aplicaciones y técnicas de programación**, Addison-Wesley, 1993, Cap. 1, p. 8-23.
- [Georgeff&Firschein85] Georgeff, M.; Firschein, O. *Expert systems for space station automation*. Control and Systems Magazine 1985, v.5, p. 3-8
- [Gutiérrez09] Gutiérrez, J. Revista Pythagoras (disponible vía Web en <http://www.filosofiyaliteratura.org/Revista/Articulos/biologia/biologia.htm#Edita:>)

[Guyton&Hall01] Guyton, A.; Hall, J. **Tratado de Fisiología Médica**. 11^a Edición, Ed. Elsevier, España, 2006. Cap. 45, p. 555-560

[Hidalgo03] Hidalgo, J. **Tratado de Enología. Tomo I**. Editorial Mundi – Prensa, Madrid 2003.

[Hilera&Martinez95] Hilera, J; Martínez, V. **Redes Neuronales Artificiales. Fundamentos, modelos y aplicaciones**. Ed. Alfaomega. 2000.

[Himmelblau89] Himmelblau, D., et al. *Incipient Fault Diagnosis of Chemical Processes via Artificial Neural Networks*. AICh Journal, v.35, n.11, Nov. 1989.

[Hernández06] Hernández, L. **Predicción y Optimización de Emisores y Consumo mediante Redes Neuronales en Motores Diesel**. Ed. Revertè, España, 2006. Cap. 3, p. 45-88.
[Jackson94] Jackson, R. *Principles and Applications*, Wine Science, Academic Press, San Diego, 1994, p. 592.

[Kouzimine00] Kouzimine, V. **Exportaciones no tradicionales latinoamericanas: un enfoque no tradicional**, Chile Jun. 2000. (disponible vía Web en www.cepal.cl/publicaciones/Comercio/2/LCL1392/lcl1392e.pdf visitada septiembre 2009)

[Lafon84] Lafon, L. et al. *Ways of initiating the action of yeast ghosts during winemaking. Connaissance de la Vigne et du Vin*, 1984, v.18, p. 111-125.

[Leal96] Leal, R. et al. **Instrumentación de un proceso de fermentación a través de Redes Neuronales Artificiales**. Departamento de Ingeniería Electrónica, México, 1996.

[Lévy08] Lévy, Jean Pierre. et al. **Las Redes Neuronales Artificiales. Fundamentos Teóricos y Aplicaciones Prácticas**. España, 2008. Cap. 3, p. 46-50.

[Lohoz-Beltrá04] Lahoz-Beltrá, R. **Bioinformática: Simulación, Vida Artificial e Inteligencia Artificial**. Ed. Díaz de Santos, Madrid, 2004. Cap. 2, p. 389.

[LosArcos93] Los Arcos, J. et al. **Diagnóstico basado en modelos de una planta de destilación de crudo**. Actas de la V Conferencia de la Asociación Española para la Inteligencia Artificial, CAEPIA, 1993.

[Matlab08] *Curve Fitting Toolbox™. User's Guide*. The Math Works, Inc. 2008

[Mesas&Alegría99] Mesas, J; Alegría, M. **El papel de los microorganismos en la elaboración del vino**. ALTAGA, Revista Ciencia, Tecnología y Alimento, España, v.2, n.4, p. 174-183, Sep. 1999.

[Millán&Ostojich05] Millán, F.; Ostojich, Z. **Predicción mediante Redes Neuronales Artificiales de la transferencia de masa en frutas osmóticamente deshidratadas**, Interciencia, Venezuela, v. 3, n.3, p. 206-210, Mar. 2006

[Minsky69] Minsky, M., *Perceptrons: An Introduction to Computational Geometry*. MIT Press, 1969.

[Moghadassi09] Moghadassi, A. et al. *A New Approach for Estimation of PVT properties of pure gases based on Artificial Neural Network Model*. Brazilian Journal of Chemical Engineering. Iran, v.26, n.1, p. 199-206, Mar. 2009

[Moguillansky06] Moguillansky, G. et al. **Innovación en la Industria del Vino**, Cepal, Universidad Adolfo Ibáñez, CORFO, 2006.

[Müller03] Müller, Katrina. **Chile vitivinícola en pocas palabras**. Facultad de Ciencias Agronómicas. Departamento de Agroindustria y Enología, Universidad de Chile, 2003.

[OIV09] Organización Internacional de la Viña del Vino. **Extracto del Informe sobre la situación de la vitivinicultura mundial en 2008**, presentado por el Director General de la OIV, Zagreb, Jun. 2009. (disponible en a Web en http://news.reseau-concept.net/images/oiv_es/Client/Communique_de_presse_Zagreb_stats_ES.pdf visitada en Octubre 2009).

[Olavarría00] Olavarría, J. et al. **Evaluación de la gestión de calidad en bodegas de vinificación de la VI y VII Región**. V Congreso de Economía Agraria, Santiago, Chile, 2000, p. 196-207.

[Palmer&Montaño99] Palmer, P.; Montaño, M. **¿Qué son las Redes Neuronales Artificiales? Aplicaciones realizadas en el ámbito de las adicciones**. Adicciones, v.11, n.3, p.243-255, Baleares, 1999.

[Pérez&Sancho03] Pérez, M; Sancho, F. **Máquinas moleculares basadas en ADN**. Universidad de Sevilla, 2003. Cap. 1, p. 1-16, Cap. 3, p 55.

[Pino01] Pino, R. et al. **Introducción a la Inteligencia Artificial: Sistemas Expertos, Redes Neuronales Artificiales, Computación Evolutiva**. Universidad de Oviedo, España, 2001. Cap. 3, p. 26-86.

[Priddy&Keller05] Priddy, K.; Keller, P. *Artificial Neural Networks: An Introduction*. International Society for Optical Engineering, 2005.

[Polycarpou&Vemuri95] Polycarpou, M. Vemuri, A. *Learning methodology for failure detection and accommodation*. IEEE Control Systems, Jun. 1995.

[Pszczólkowski01] Pszczólkowski, P. et al. **Reflexiones sobre la madurez de Cosecha y las condiciones de vinificación, con relación a la Problemática de Fermentaciones Alcohólicas Lentas y/o paralizante, en Chile**, Facultad de Agronomía. Pontificia Universidad Católica de Chile, 2001.

[Quezada&Noriega97] Quezada, A.; Noriega, B. **Detección de fallas en un sistema no lineal utilizando Redes de Perceptrón Multicapa.** 1997

[Ranaweera94] Ranaweera, D. *Comparison of neural network models for fault diagnosis of power systems.* Electric Power Systems, 1994, Research, 29, p.99-104.

[Reinhard05] Reinhard, Eder. **Defectos del vino: Reconocimiento, Prevención, Corrección.** Barcelona, España, 2005.

[Renders95] Renders, J., et al. *A prototype neural network to perform early warning in nuclear power plant.* Fuzzy Sets and Systems 74, p.139-151. 1995.

[Ribéreau03] Ribéreau Gayon, P. et al. **Tratado de enología: Microbiología del vino vinificaciones.** Editorial Hemisferio Sur, Buenos Aires, 2003, Cap. 2, p. 74-88. Cap. 3, p. 122-43.

[Rosenblat58] Rosenblatt, F. *Principles of Neurodynamics.* Spartan Books. Washington, DC, 1962.

[Rumelhart86] Rumelhart, D. *Learning representations by back-propagating errors.* Nature London, 1986, n. 323, p.533-536,

[SAG09] Servicio Agrícola y Ganadero. División de Protección Agrícola Subdepartamento de Viñas y Vinos. **Informe Ejecutivo: Producción de Vinos 2009.** (Disponible vía Web en http://www2.sag.gob.cl/svyv/dec_cos/inf_ej/INFORME_PRODUCCION_2009.pdf visitada en Octubre del 2009).

[SantaMaría95] Santa María, P et al. **Influencia de la temperatura en la fermentación alcohólica.** INIA, La Rioja, v.7, p. 137-149, 1995.

[Sorsa91] Sorsa, T. *Neural Networks in Process Fault Diagnosis.* IEEE Trans. on Systems, Man. and Cybernetics, Jul. 1991, v.21, n.4.

[SPSS07] *SPSS Neural Network 16.0.* SPSS Inc.2007

[Suárez&Iñigo04] Suarez, Lepe; Ínigo, Leal. **Microbiología Enológica: Fundamentos de Vinificación.** 3^a Edición, Editorial Muldisprensa, Madrid 2004.

[Urtubia06] Urtubia, A. et al. *Using data mining techniques to predict industrial wine problem fermentations.* Food Control, Volume 19, Issue 4. 2006.

[Urtubia06a] Urtubia, A. *Monitoring of Wine Fermentations Using MIR Spectroscopy and Data Mining Techniques.* Thesis submitted to the Office of Research and Graduate Studies in partial fulfillment of the requirements for the Degree of Doctor of Science in Engineering. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Escuela de Ingeniería. Chile, Abril. 2006.

[Vilanoba&Tardágila] Vilanoba, M; Tardáguila, J. **La Investigación Vitivinícola en Australia, Revista Enólogos**, La Rioja, n.42, Ago. 2006. (disponible en la página Web en http://www.enologo.com/tecnicos/eno42/eno42_1.html visitada en Octubre 2009)

[Werbos90] Werbos, P. *Backpropagation through time: What it does and how to do it*. Proc. Of the IEEE, Oct., 1990. P. 1550-1560.

[Widrow&Hoff60] Widrow, B.; Hoff, M. *Adaptive switching circuits. Neurocomputing*. p. 126-134. J. MIT Press, Cambridge, MA. 1960.

[WinesofChile09] Wines of Chile, The Wines 2009. (Disponible vía Web en <http://www.winesofchile.org/the-wines/> visitada en Noviembre 2009).