



Výzkumný ústav pивovarský a sladařský

Synergie analytické chemie a umělé inteligence pro pochopení složitých dějů v pivovarství

Tomáš Vrzal



Výzkumný ústav pивovarský a sladařský, a.s.

Výzkum a vývoj:

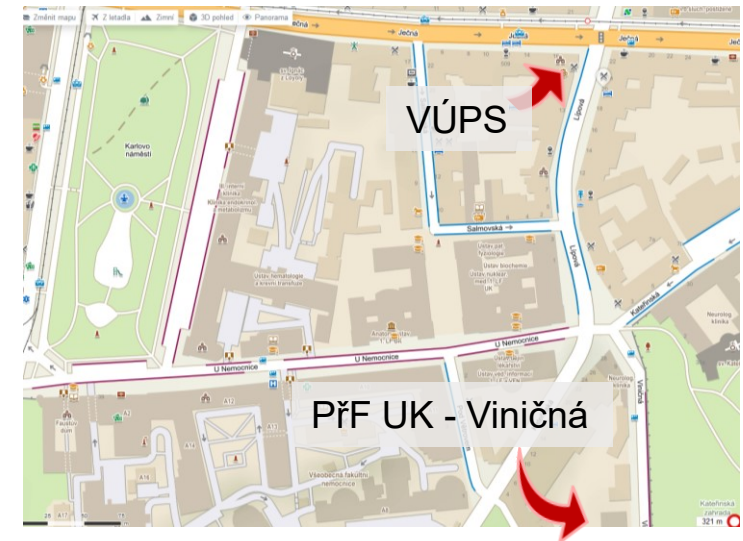
- suroviny
- senzorní vlastnosti piva (senzorníka)
- látky kontaminující pivo
- stárnutí piva
- analýza piva a surovin
-
- absolventské práce - PřF UK, ČZU, VŠCHT, ...

Analytický servis:

- základní piv. analýzy, speciální analýzy, senzorní analýza
- mikrobiologické rozbory

Vzdělávání:

- senzorní semináře
- rekvalifikační kurzy



Co nás čeká?

- vysvětlení pojmů
- základní teorie
- složité děje v pivovarské vědě
- 2 příklady aplikace (+ praktická ukázka)



Vysvětlení pojmů

Synergie analytické chemie a umělé inteligence pro pochopení složitých dějů v pivovarství



Vysvětlení pojmů

Synergie analytické chemie a umělé inteligence **pro pochopení složitých dějů v pivovarství**



Co je umělá inteligence?



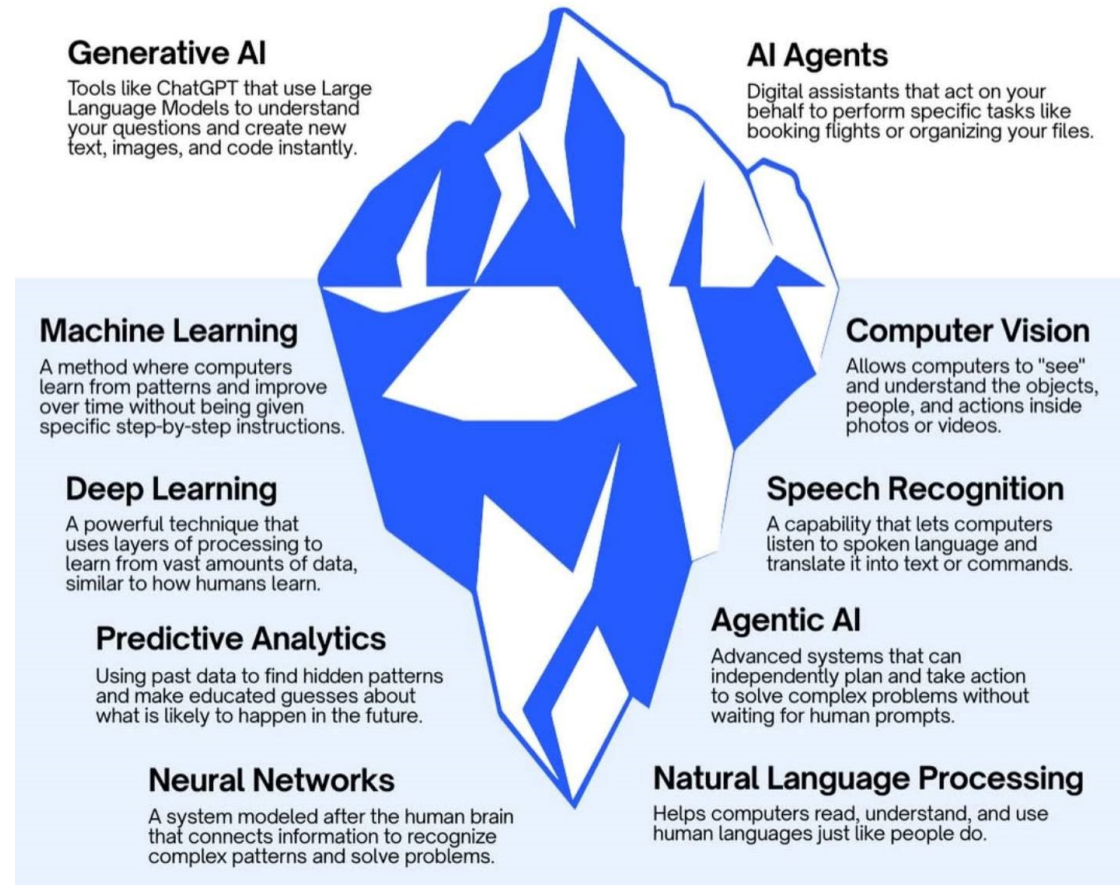
Umělá inteligence (AI) je soubor technologií, které umožňují počítačům učit se, uvažovat a provádět řadu pokročilých úkolů způsoby, které dříve vyžadovaly lidskou inteligenci, jako je porozumění jazyku, analýza dat a dokonce i poskytování užitečných návrhů.

AI se ale nevyužívá pouze v oblastech, kde nahrazuje člověka (usnadňuje mu práci), ale zejména tam, v oblastech kde člověk selhává, nebo na to nestačí.



The AI Iceberg

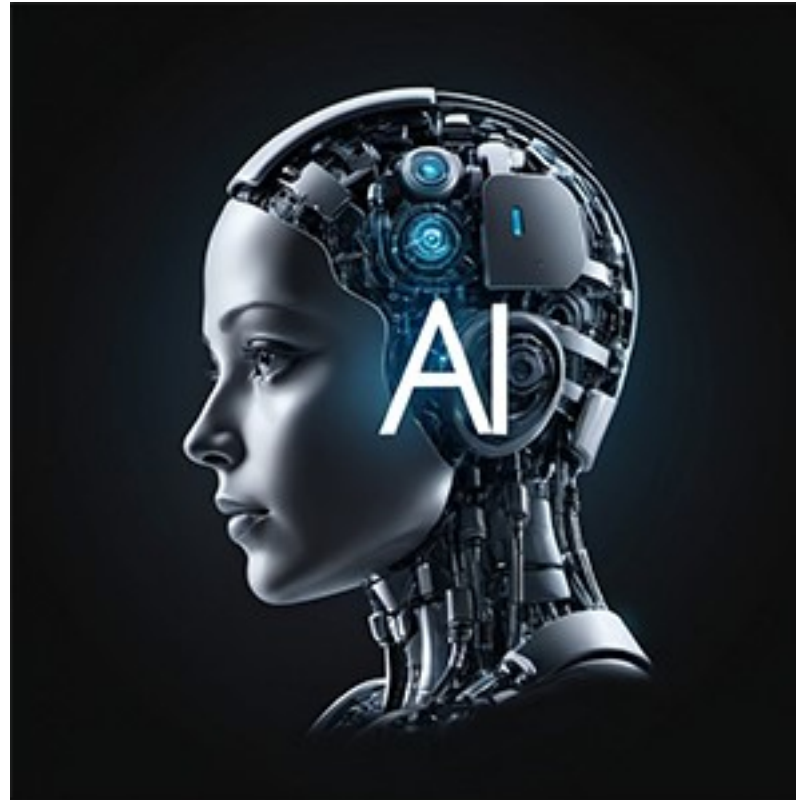
What people *think* AI is



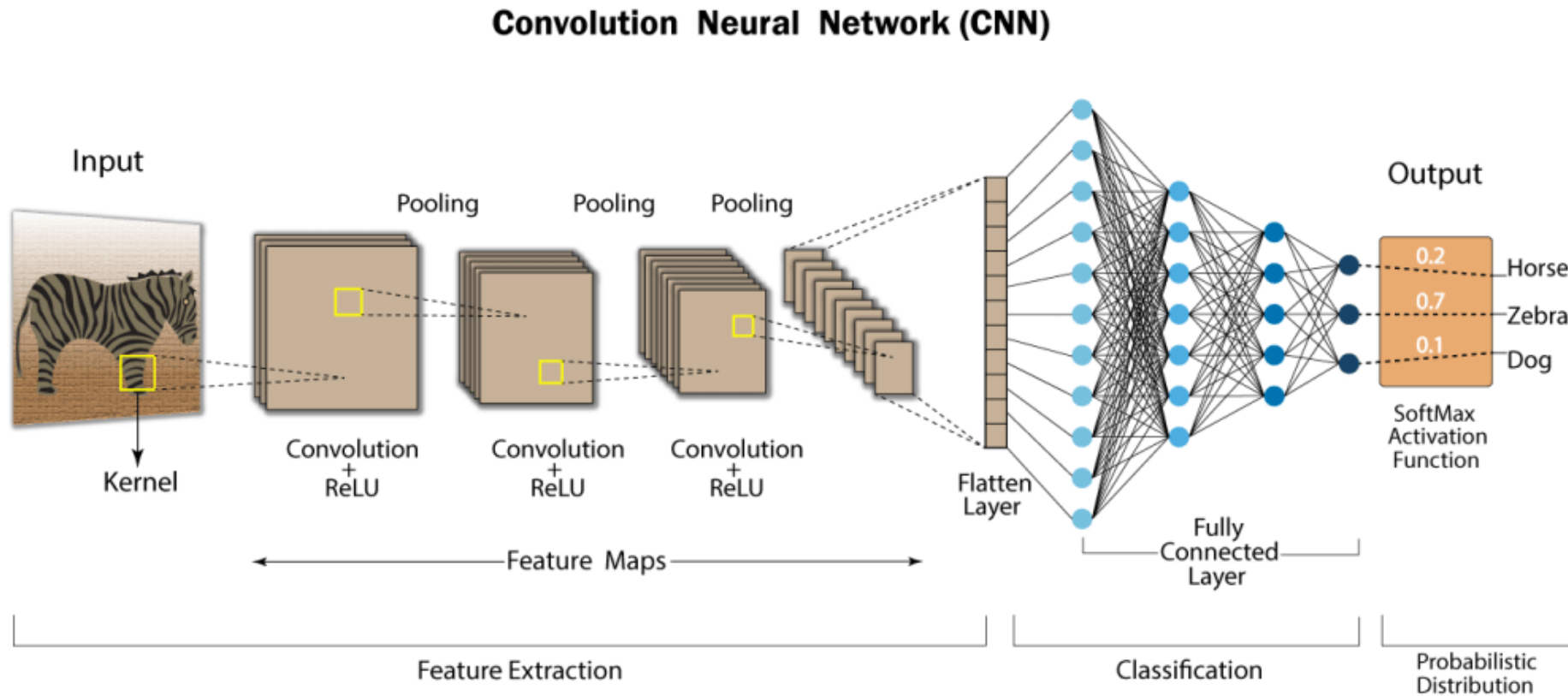
O tom to dnes nebude



Představa



Realita



Soubor matematických operací – složitá síť, schopna řešit komplexní úlohy



Realita v praxi

```
1 library(keras)
2 library(tfprobability)
3
4 input <- layer_input(shape = c(32,183,1), name = "input")
5
6 output1 <- input %>% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same", kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %>%
7   layer_activation("relu") %>%
8   layer_batch_normalization()
9 res1 <- input %>% layer_conv_2d(filter= 512, kernel_size = 1, padding = "same")
10 add1 <- layer_add(list(res1, output1))
11 output2 <- add1 %>% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3),kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01), padding = "same") %>%
12   layer_activation("relu") %>%
13   layer_batch_normalization() %>%
14   layer_max_pooling_2d(pool_size=c(2,2)) %>%
15   layer_dropout(0.1)
16 res2 <- res1 %>% layer_conv_2d(filters = 512, kernel_size = 1, padding = "same") %>% layer_activation("relu") %>% layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2,2))
17 add2 <- layer_add(list(res2, output2))
18 output3 <- add2 %>% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same",kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %>%
19   layer_activation("relu") %>%
20   layer_batch_normalization() %>%
21   layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same",kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %>%
22   layer_activation("relu") %>%
23   layer_batch_normalization() %>%
24   layer_max_pooling_2d(pool_size=c(2,2)) %>%
25   layer_dropout(0.1)
26 res3 <- res2 %>% layer_conv_2d(filters = 512, kernel_size = 1, padding = "same") %>% layer_activation("relu") %>% layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2,2))
27 add3 <- layer_add(list(output3, res3))
28 output4 <- add3 %>% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same",kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %>%
29   layer_activation("relu") %>%
30   layer_batch_normalization() %>%
31   layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same", kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %>%
32   layer_activation("relu") %>%
33   layer_batch_normalization() %>%
34   layer_max_pooling_2d(pool_size=c(2,2)) %>%
35   layer_dropout(0.1) %>%
36   layer_flatten(name = "flatten")
37
```



Co je analytická chemie?



Vědecký obor, který vyvíjí a aplikuje strategie, přístroje a postupy k získání informací o složení a podstatě hmoty v prostoru a času.

definice IUPAC



Co je synergie?



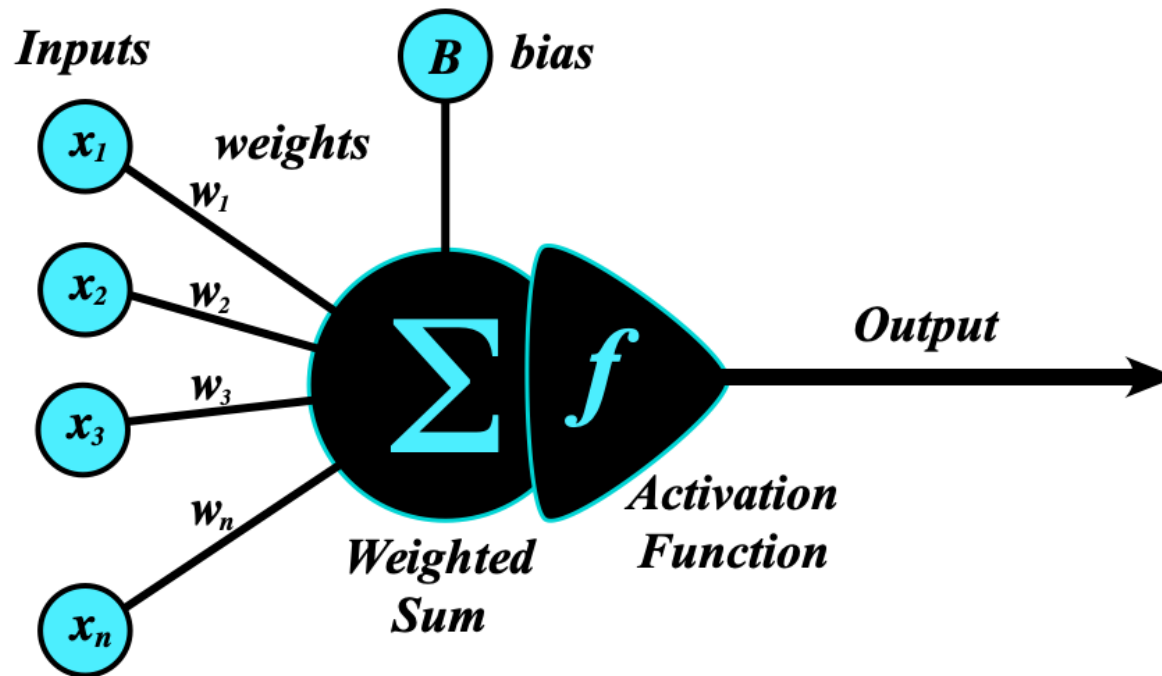
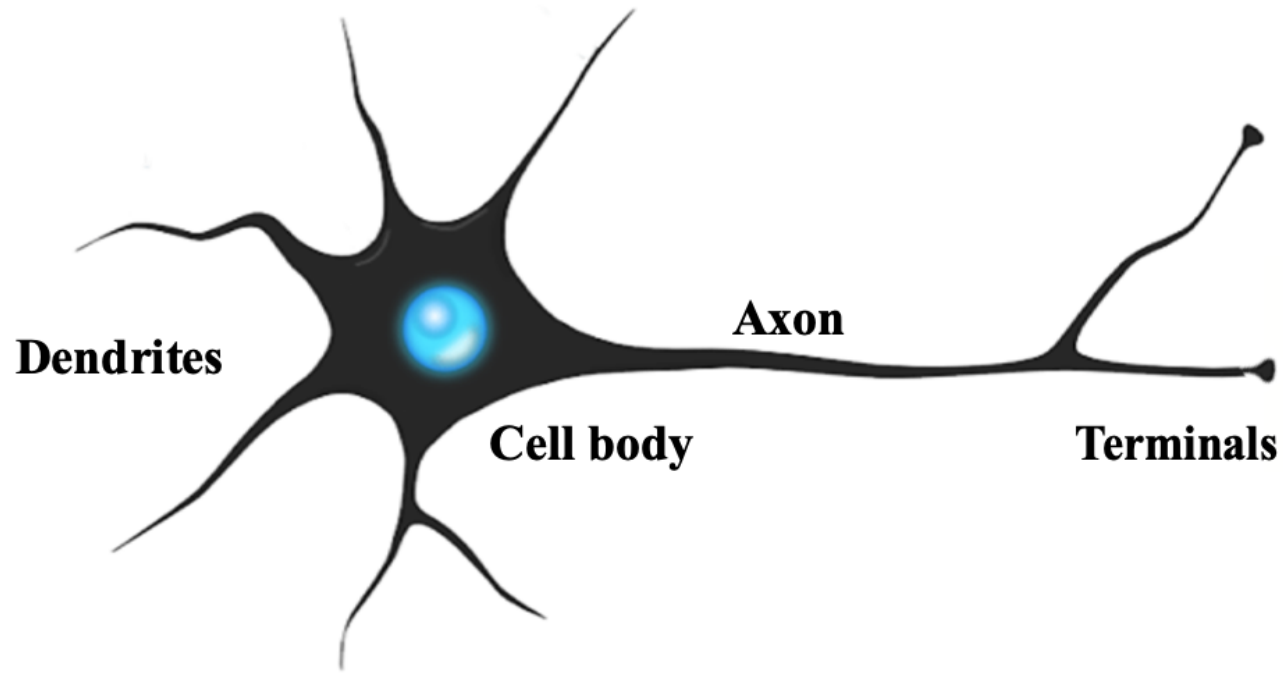
Synergie je součinnost či spolupráce dvou a více činitelů, kdy společný výsledný efekt je vyšší než pouhý součet jejich individuálních účinků ($1 + 1 > 2$).



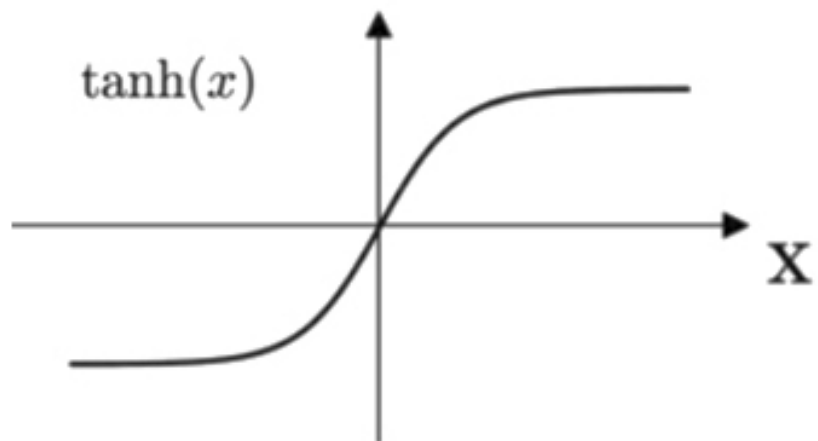
Základní teorie

Jak fungují umělé neuronové sítě?

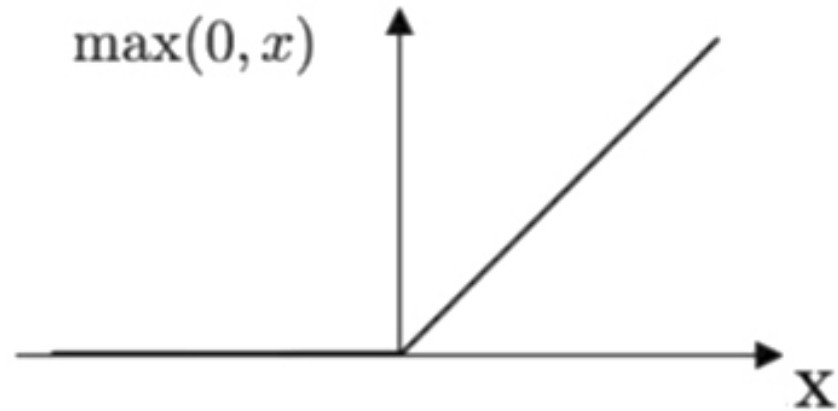




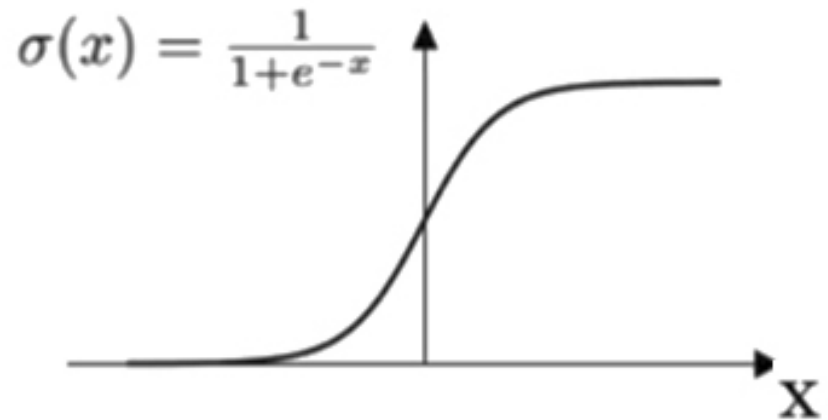
Tanh



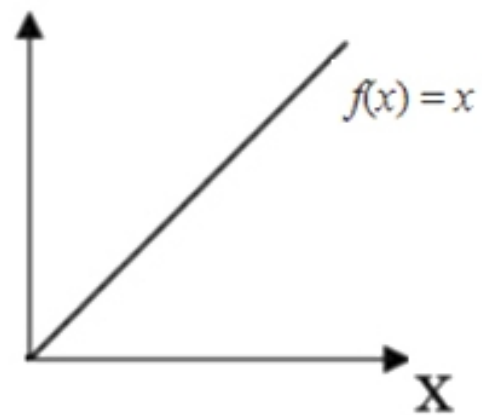
ReLU



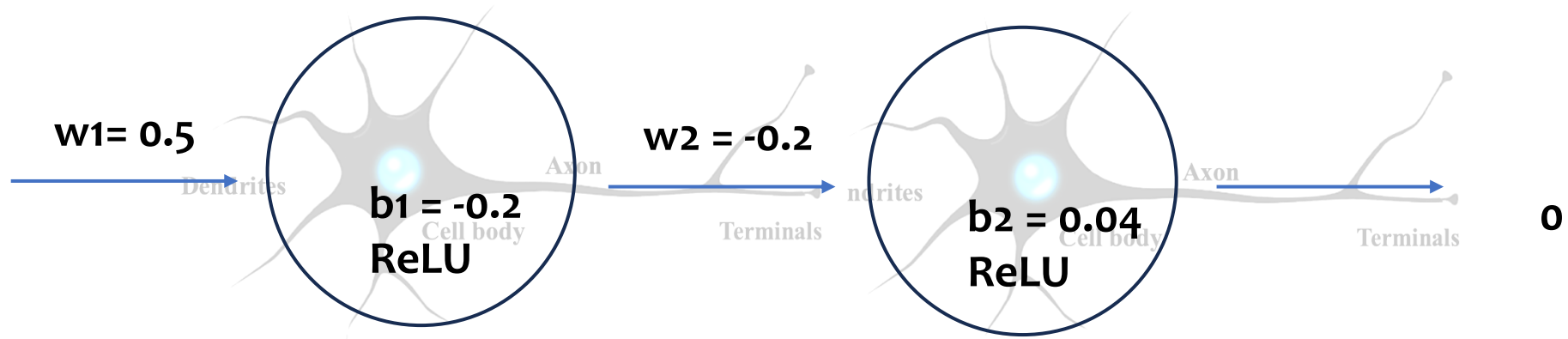
Sigmoid



Linear



1



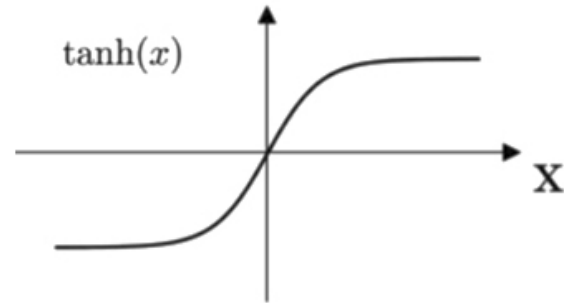
$$Y_1 = \text{input} \cdot w_1 + b_1 \rightarrow \text{aktivace}$$

$$Y_2 = Y_1 \cdot w_2 + b_2 \rightarrow \text{aktivace}$$

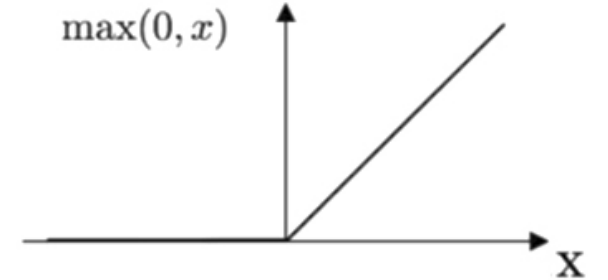
$$Y_1 = 1 \cdot 0.5 - 0.2 = 0.3 \rightarrow \text{aktivace} \rightarrow 0.3$$

$$Y_2 = 0.3 \cdot (-0.2) + 0.04 = -0.06 \rightarrow \text{aktivace} \rightarrow 0$$

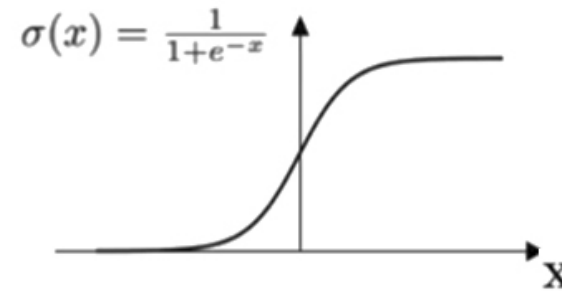
Tanh



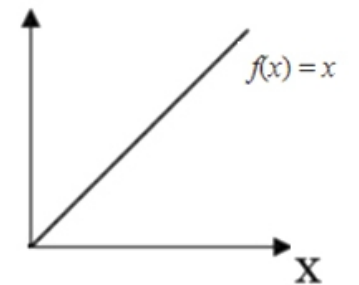
ReLU



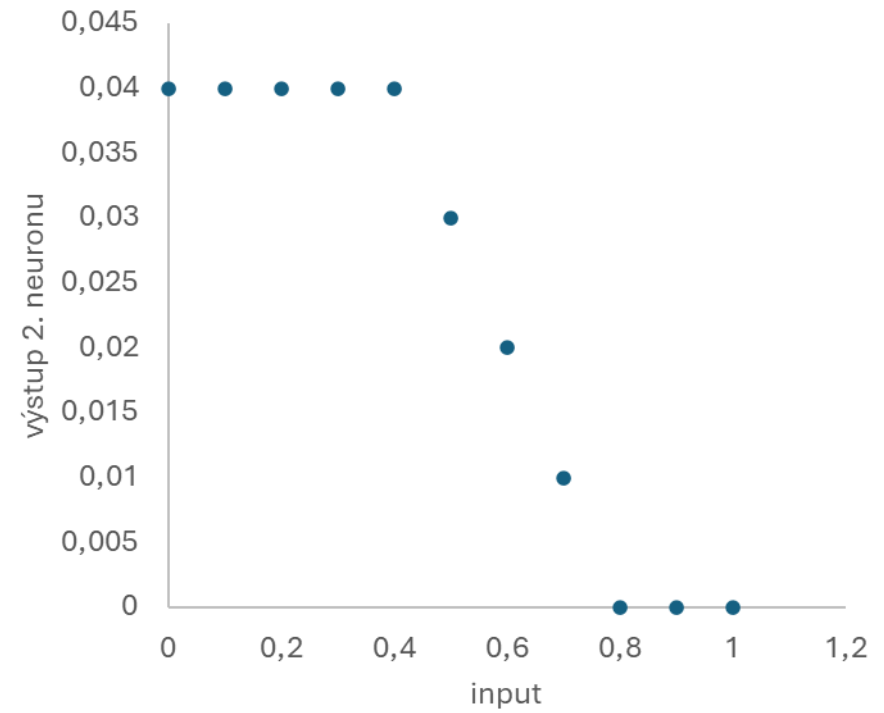
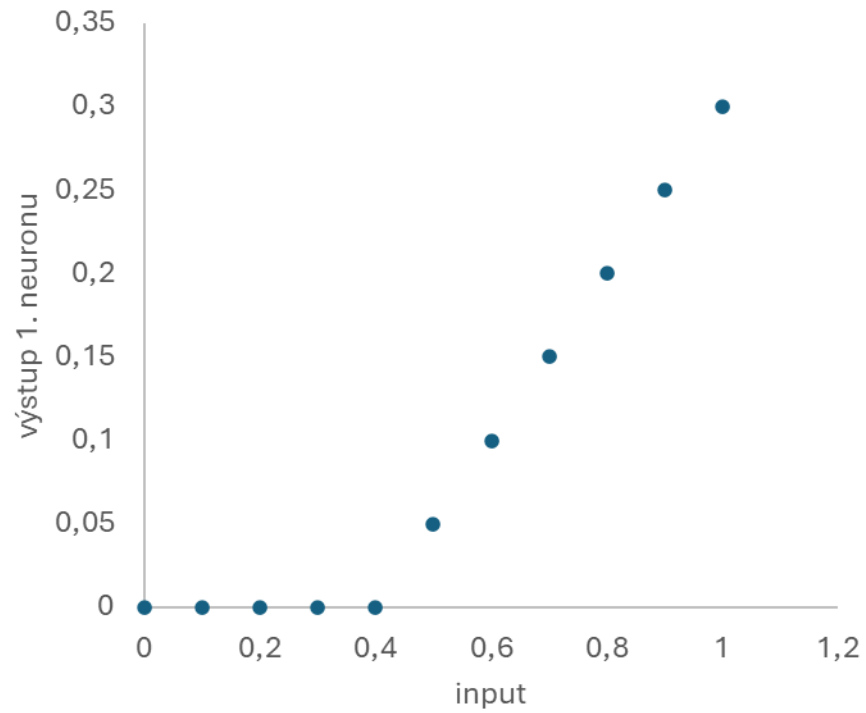
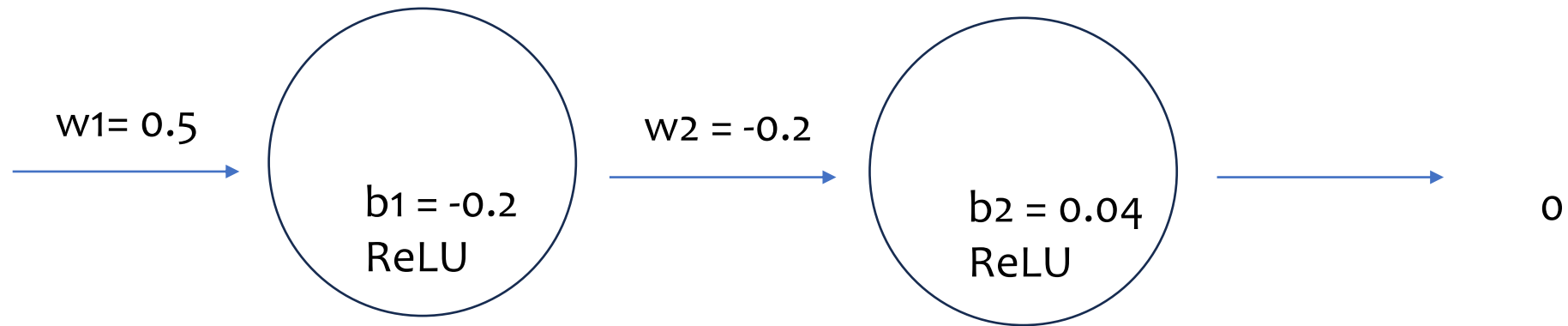
Sigmoid

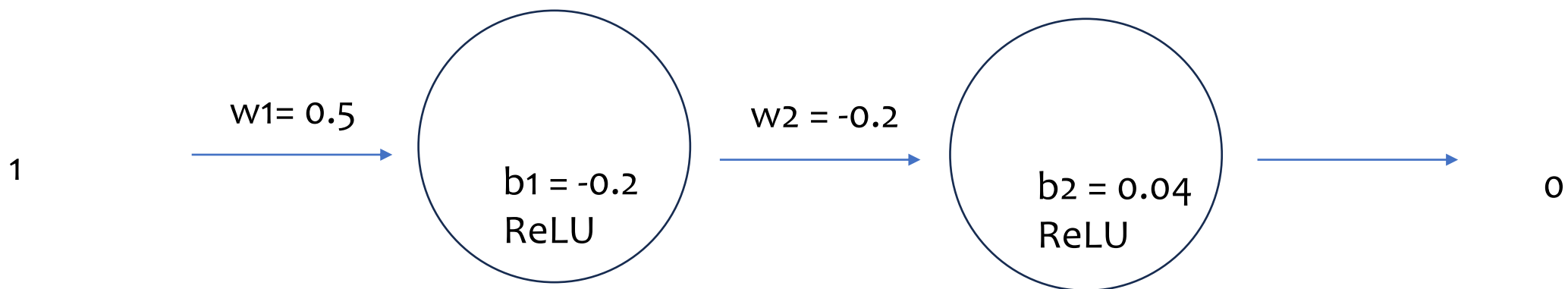


Linear



1



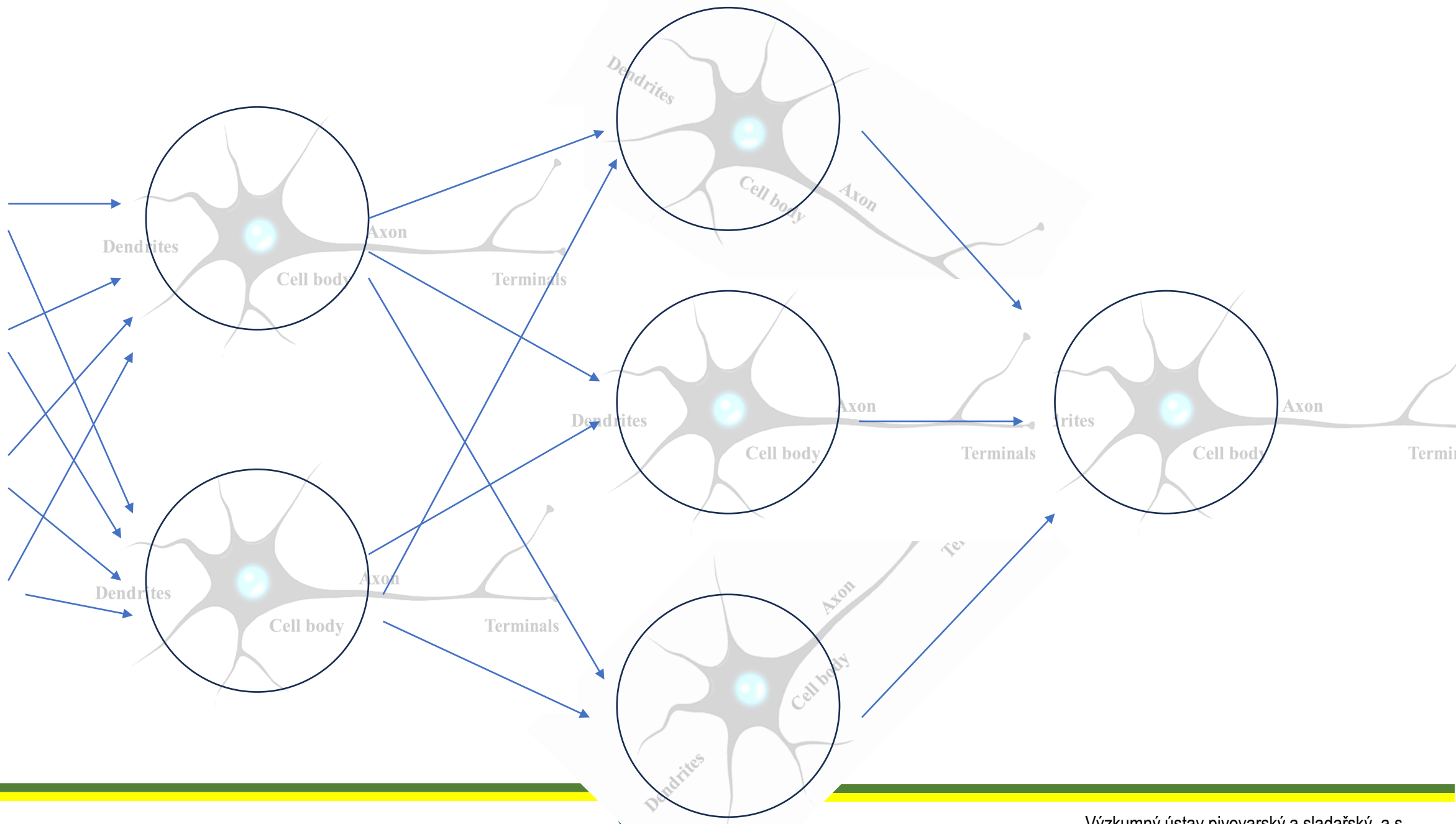


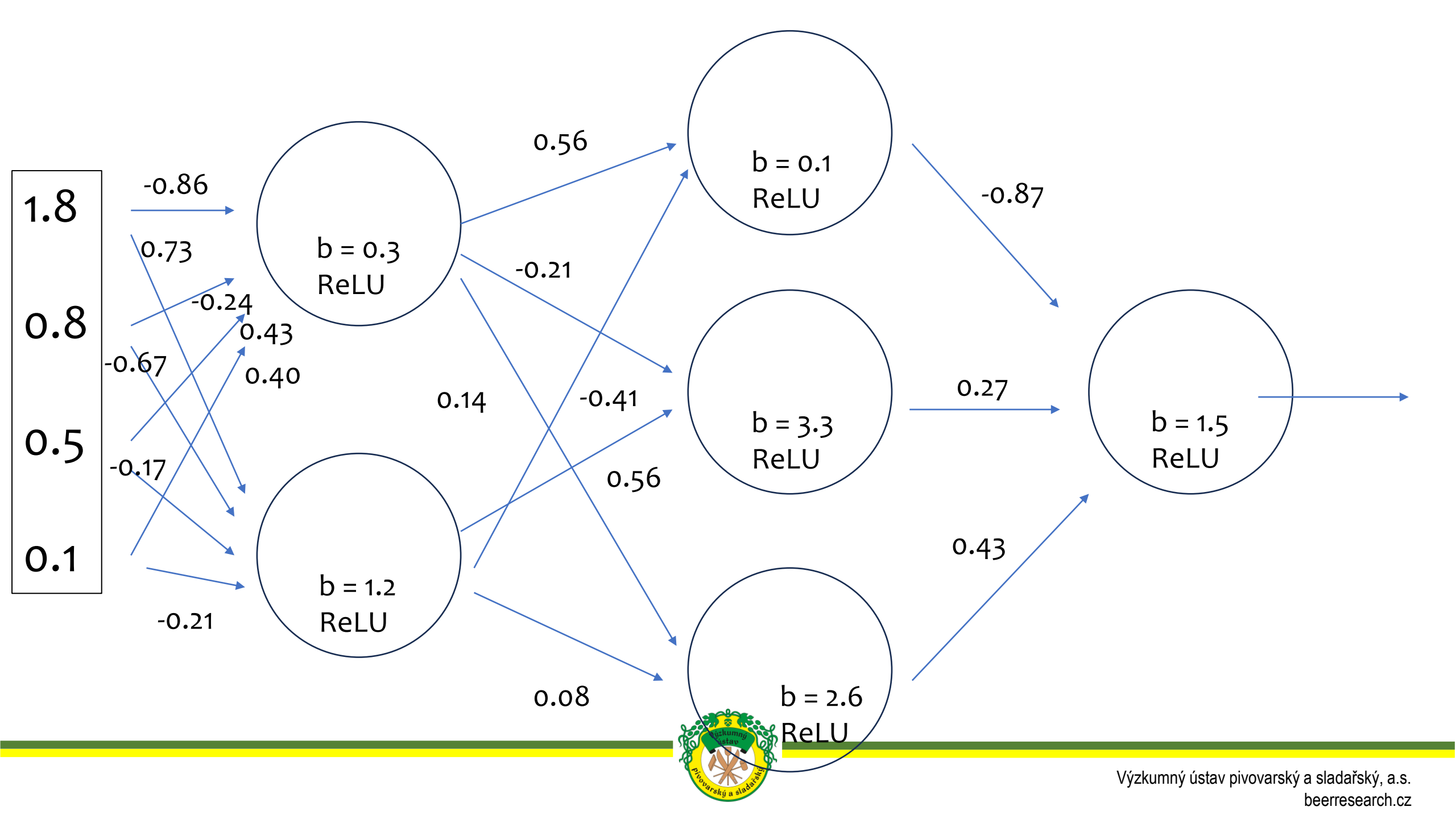
Koeficienty w a b jsou hledány pomocí **zpětné propagace** – minimalizace rozdílu mezi výstupem sítě a požadovaným výstupem (učící proces).

- 1) Koeficienty jsou náhodně vygenerovány.
- 2) Data (trénovací sada) jsou zpracovány sítí. Vstup \rightarrow síť \rightarrow výstup
- 3) Výpočet ztrátové funkce (např. průměrná kvadratická chyba mezi výstupem a skutečností).
- 4) Algoritmus se vrací zpět od výstupní vrstvy ke vstupní a počítá gradienty ztrátové funkce vzhledem k jednotlivým koeficientům (w a b).
- 5) Na základě gradientů dochází k aktualizaci hodnot koeficientů w a b .
- 6) Algoritmus se opakuje.

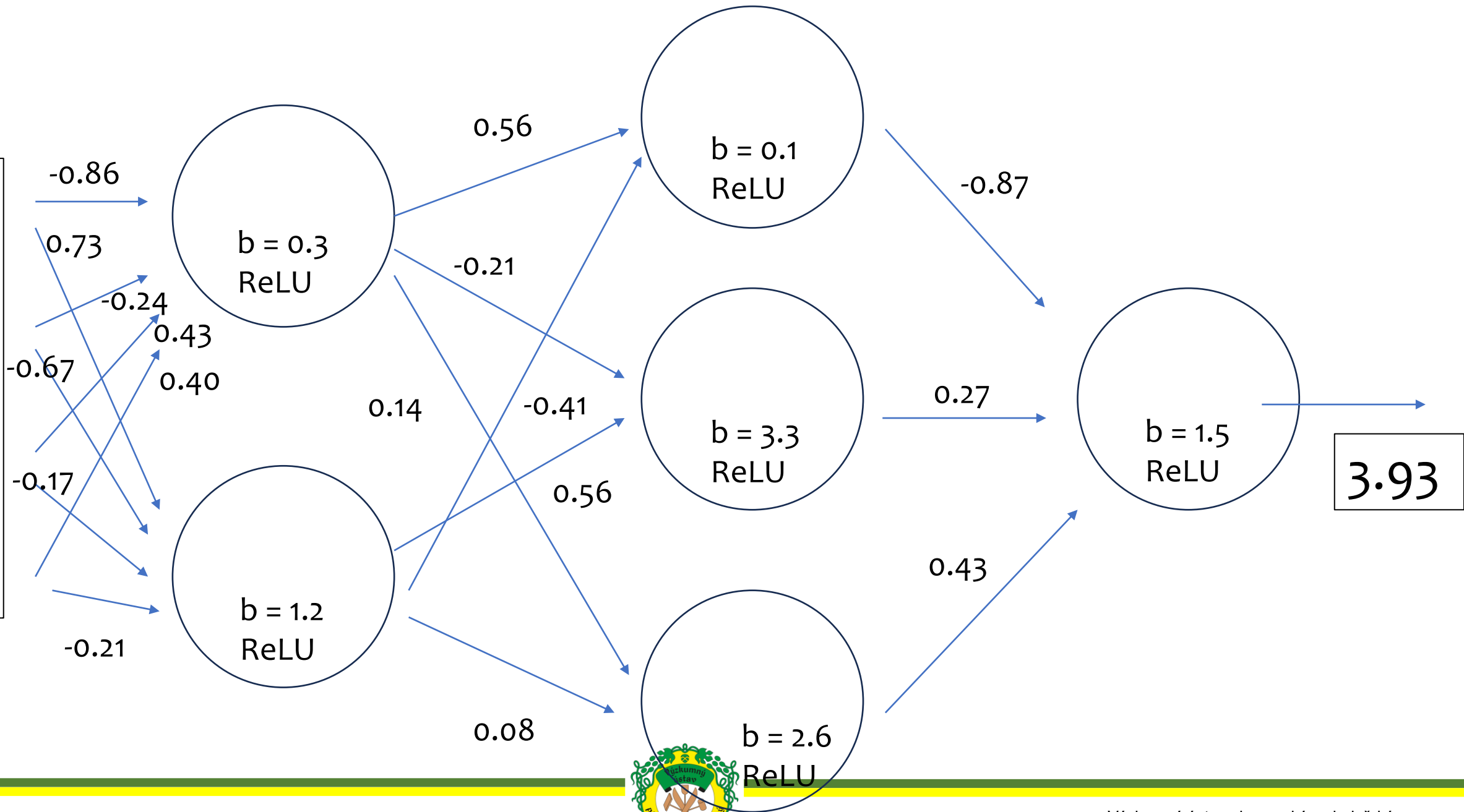


1.8
0.8
0.5
0.1

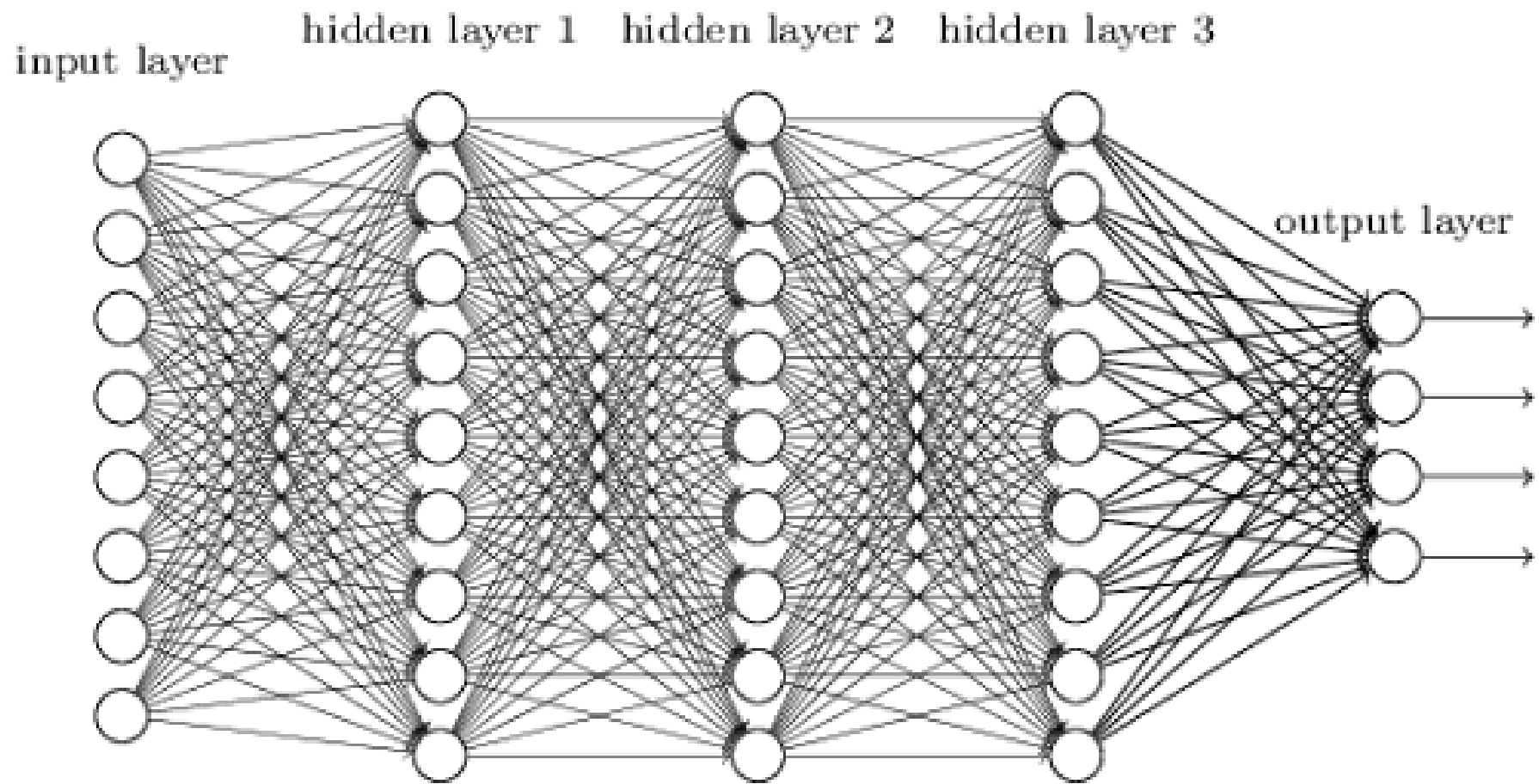




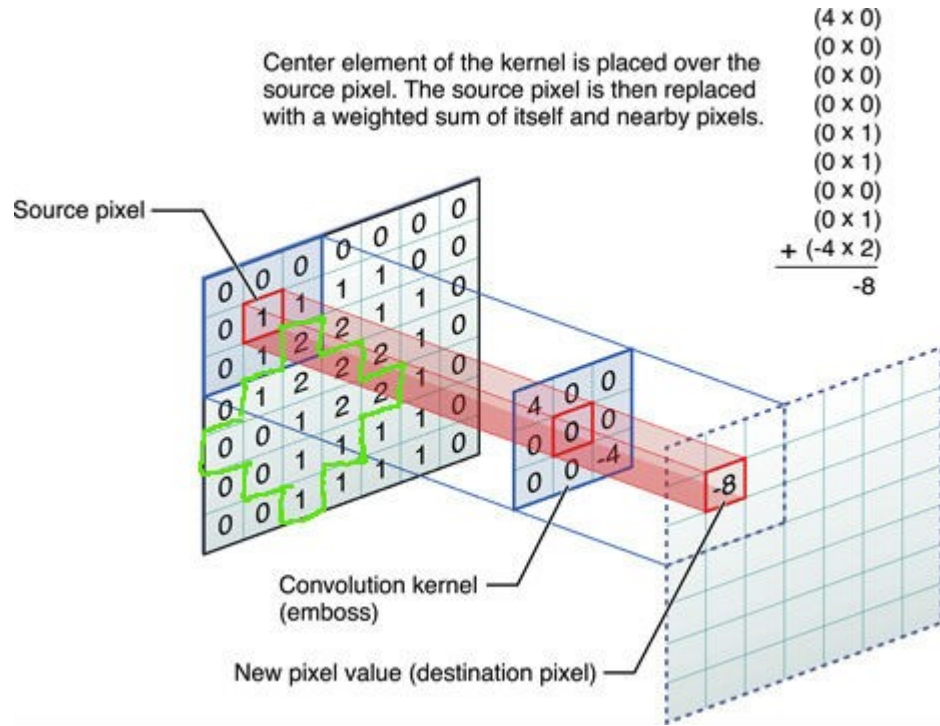
1.8
0.8
0.5
0.1



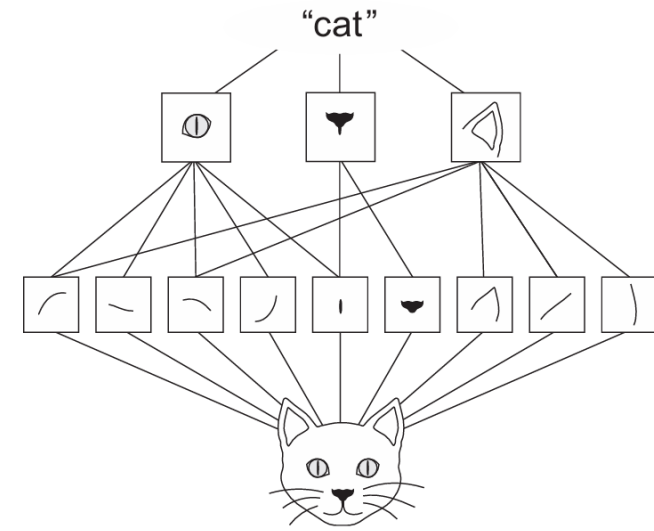
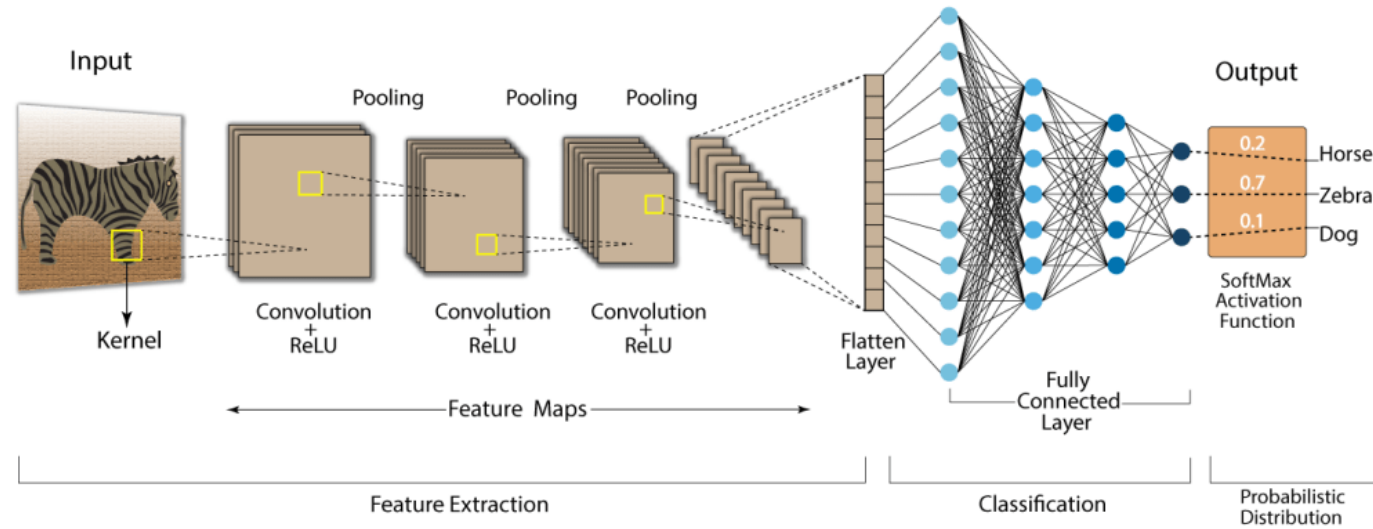
Hluboké neuronové sítě

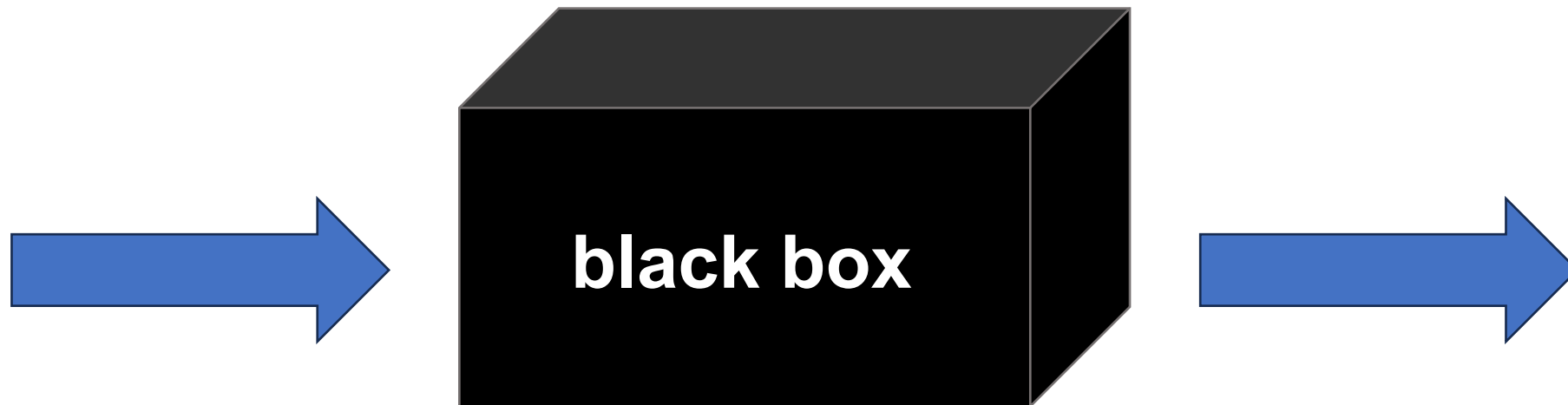


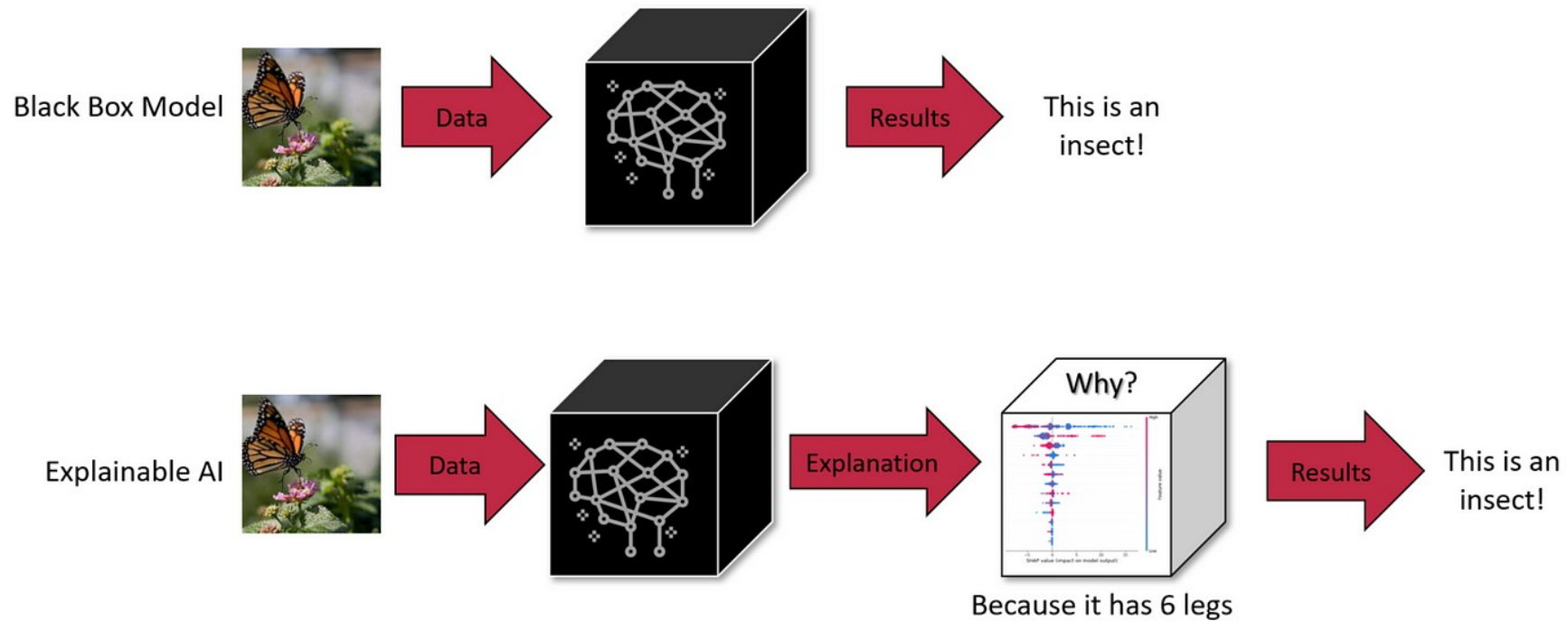
Konvoluční neuronové síť



Convolution Neural Network (CNN)







Lantos, D. et al (2021) How to explain your machine learning model using SHAP? Medium



SHapley Additive exPlanations (SHAP) analysis

- Lokální (z pohledu jednotlivých objektů) i globální vysvětlení (z pohledu modelu)
- jednoduché na interpretaci

$$f(i) = \phi_0 + \sum_{\text{features}} \phi_{i,j}$$

Model prediction for sample i Average prediction Sum of all SHAP values for sample i

Ponce-Bobadilla et al. 2024

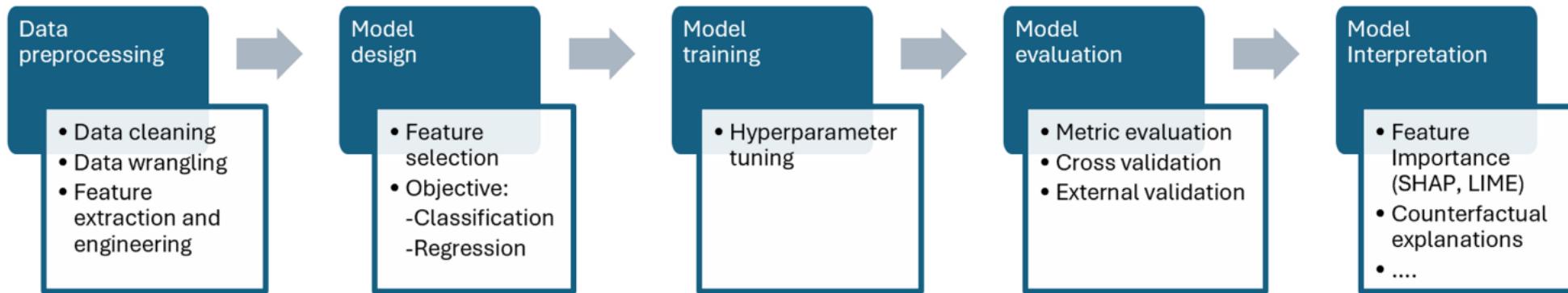


FIGURE 1 Standard supervised ML workflow.

Ponce-Bobadilla et al. 2024



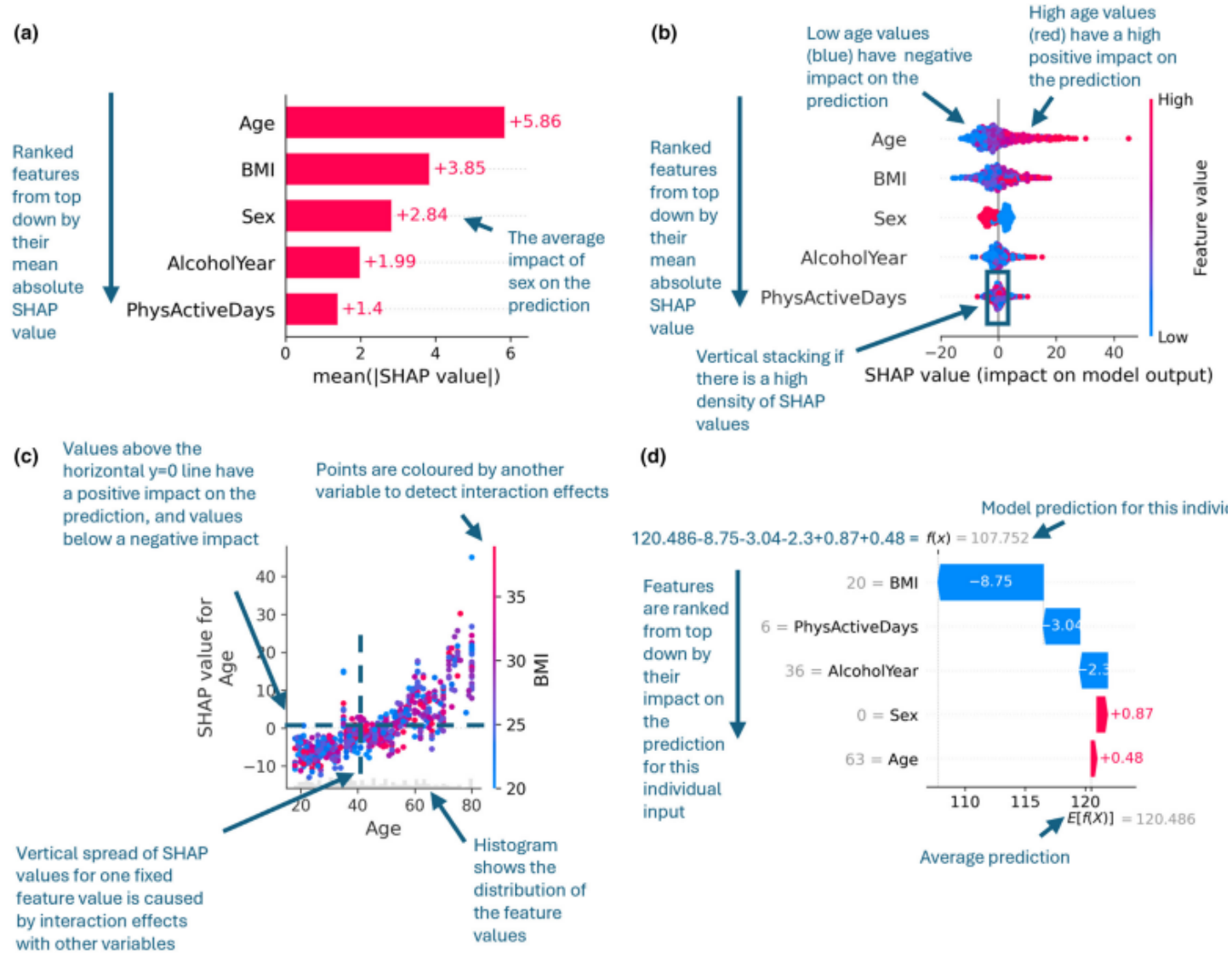


FIGURE 2 Different visualization plots of SHAP values from an XGBoost model when predicting blood pressure: (a) Bar plot; (b) Beeswarm plot; (c) A scatter plot for the feature age colored by each subject's BMI; (d) Waterfall plot for an example subject.



Lze použít pro:

Validace výsledného modelu

Model použít pouze jak o nástroj pro extrakci zákonitostí skrytých v datech – model extrahuje, SHAP analyzuje co model extrahuje (jak pochopil data, co je v datech skryto)

Rozhodování založené na datech, cílenejší řešení problému

Tento přístup lze použít pro extrakci skrytých struktur v datech (data mining), které nelze zcela vytěžit pomocí klasických nástrojů (typicky komplexita informace, nelineární chování, vzájemné interakce).



Složité děje v pivovarské vědě

Příklady komplexních jevů v pivovarské vědě?

Preference konzumentů k nealkoholickým pivům – jak je to ovlivněno chemickým složením piva?

Senzorický charakter českého ležáku.

Stárnutí piva

Chemické transformace látek v průběhu pivovarského procesu.

Vliv počasí v průběhu pěstování chmele na jeho výslednou kvalitu.

...

Běžné chemometrické nástroje jsou schopny z takto komplikovaných dat vytěžit pouze omezené množství informací – problémy: komplexita, nelinearita, vzájemné interakce.



A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	W	X	Y	Z	AA	AB	AC	AD	AE	AF	AG	AH	AI	AJ	AK	AL	AM	AN	AO	AP	AQ	AR	AS	AT	AU	AV	AW	AX	AY	AZ	BA	BB	BC	BD	BE	BF	BG	BH	BI	BJ	BK	BL	BM	BN	BO	BP	BQ	BR	BS	BT	BV	BW	BX	BY	BZ	CA	CB	CC	CD	CE	CF	CG	CH	CI	CJ	CK	CL	CM	CN	CO	CP	CQ	CR	CS	CT	CV	CW	CX	CY	CZ	DA	DB	DC	DD	DE	DF	DG	DH	DI	DJ	DK	DL	DM	DN	DO	DP	DQ	DR	DS	DT	DV	DW	DX	DY	DZ	EA	EB	EC	ED	EE	EF	EG	EH	EI	EJ	EK	EL	EM	EN	EO	EP	EQ	ER	ES	ET	EV	EW	EX	EY	EZ	FA	FB	FC	FD	FE	FF	FG	FH	FI	FJ	FK	FL	FM	FN	FO	FP	FQ	FR	FS	FT	FV	FW	FX	FY	FZ	GA	GB	GC	GD	GE	GF	GG	GH	GI	GJ	GK	GL	GM	GN	GO	GP	GQ	GR	GS	GT	GV	GW	GX	GY	GZ	HA	HB	HC	HD	HE	HF	HG	HH	HI	HJ	HK	HL	HM	HN	HO	HP	HQ	HR	HS	HT	HV	HW	HX	HY	HZ	IA	IB	IC	ID	IE	IF	IG	IH	II	IJ	IK	IL	IM	IN	IO	IP	IQ	IR	IS	IT	IV	IW	IX	IY	IZ	JA	JB	JC	JD	JE	JF	JG	JH	JI	IJ	JK	KL	LM	LN	LO	LP	LQ	LR	LS	LT	LV	LW	LX	LY	LZ	MA	MB	MC	MD	ME	MF	MG	MH	MI	MJ	MK	ML	MM	MN	MO	MP	MQ	MR	MS	MT	MV	MW	MX	MY	MZ	NA	NB	NC	ND	NE	NF	NG	NH	NI	NJ	NK	NL	NM	NN	NO	NP	NQ	NR	NS	NT	NV	NW	NX	NY	NZ	OA	OB	OC	OD	OE	OF	OG	OH	OI	OJ	OK	OL	OM	ON	OO	OP	OQ	OR	OS	OT	OV	OW	OX	OY	OZ	PA	PB	PC	PD	PE	PF	PG	PH	PI	PJ	PK	PL	PM	PN	PO	PP	PQ	PR	PS	PT	PV	PW	PX	PY	PZ	QA	QB	QC	QD	QE	QF	QG	QH	QI	QJ	QK	QL	QM	QN	QO	QP	QR	QS	QT	QV	QW	QX	QY	QZ	RA	RB	RC	RD	RE	RF	RG	RH	RI	RJ	RK	RL	RM	RN	RO	RP	RQ	RR	RS	RT	RV	RW	RX	RY	RZ	SA	SB	SC	SD	SE	SF	SG	SH	SI	SJ	SK	SL	SM	SN	SO	SP	SQ	SR	SS	ST	SV	SW	SX	SY	SZ	TA	TB	TC	TD	TE	TF	TG	TH	TI	TJ	TK	TL	TM	TN	TO	TP	TQ	TR	TS	TV	TW	TX	TY	TZ	UA	UB	UC	UD	UE	UF	UG	UH	UI	UJ	UK	UL	UM	UN	UO	UP	UQ	UR	US	UT	UV	UW	UX	UY	UZ	VA	VB	VC	VD	VE	VF	VG	VH	VI	VJ	VK	VL	VM	VN	VO	VP	VQ	VR	VS	VT	VW	VX	VY	VZ	WA	WB	WC	WD	WE	WF	WG	WH	WI	WJ	WK	WL	WM	WN	WO	WP	WQ	WR	WS	WT	VW	WX	WY	WZ	XA	XB	XC	XD	XE	XF	XG	XH	XI	XJ	XK	XL	XM	XN	XO	XP	XQ	XR	XS	XT	XV	XW	XX	XY	XZ	YA	YB	YC	YD	YE	YF	YG	YH	YI	YJ	YK	YL	YM	YN	YO	YP	YQ	YR	YS	YT	YV	YW	YX	YZ	ZA	ZB	ZC	ZD	ZE	ZF	ZG	ZH	ZI	ZJ	ZK	ZL	ZM	ZN	ZO	ZP	ZQ	ZR	ZS	ZT	ZV	ZW	ZX	ZY	ZZ
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										

```

1 library(keras)
2 library(tfprobability)
3
4 input <- layer_input(shape = c(32,163,1), name = "input")
5
6 output1 <- input %%% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same", kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %%%
7 layer_activation("relu") %%%
8 layer_batch_normalization()
9 res1 <- input %%% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size = 1, padding = "same")
10 add1 <- layer_add(list(res1, output1))
11 output2 <- add1 %%% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01), padding = "same") %%%
12 layer_activation("relu") %%%
13 layer_batch_normalization() %%%
14 layer_max_pooling_2d(pool_size=c(2,2)) %%%
15 layer_dropout(0.1)
16 res2 <- res1 %%% layer_conv_2d(filters = 512, kernel_size = 1, padding = "same") %%% layer_activation("relu") %%% layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2,2))
17 add2 <- layer_add(list(res2, output2))
18 output3 <- add2 %%% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same", kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %%%
19 layer_activation("relu") %%%
20 layer_batch_normalization() %%%
21 layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same", kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %%%
22 layer_activation("relu") %%%
23 layer_batch_normalization() %%%
24 layer_max_pooling_2d(pool_size=c(2,2)) %%%
25 layer_dropout(0.1)
26 res3 <- res2 %%% layer_conv_2d(filters = 512, kernel_size = 1, padding = "same") %%% layer_activation("relu") %%% layer_max_pooling_2d(pool_size = c(2,2))
27 add3 <- layer_add(list(output3, res3))
28 output4 <- add3 %%% layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same", kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %%%
29 layer_activation("relu") %%%
30 layer_batch_normalization() %%%
31 layer_conv_2d(filter=512, kernel_size=c(3,3), padding="same", kernel_regularizer=regularizer_l1_l2(0.01, 0.01)) %%%
32 layer_activation("relu") %%%
33 layer_batch_normalization() %%%
34 layer_max_pooling_2d(pool_size=c(2,2)) %%%
35 layer_dropout(0.1) %%%
36 layer_flatten(name = "Flatten")
37

```

SYNERGY

Uniting Analytical Chemistry and Artificial Intelligence to Understand Complex Phenomenon in Brewing Science

ANALYTICAL CHEMISTRY

Measurement · Precision · Quality

ARTIFICIAL INTELLIGENCE

Learning · Prediction · Optimization

Accurate Analysis
 Enhanced Quality

Improved Flavor
 Consistent Quality

Insightful Predictions
 Brewing Automation
 Dynamic Optimization
 Efficient Fermentation

Příklad aplikace

Preference konzumentů k nealkoholickým pivům – jak je to ovlivněno chemickým složením piva?

Jaké látky přispívají k preferenci a jakým směrem?



22 nealkoholických piv (neochucená piva)

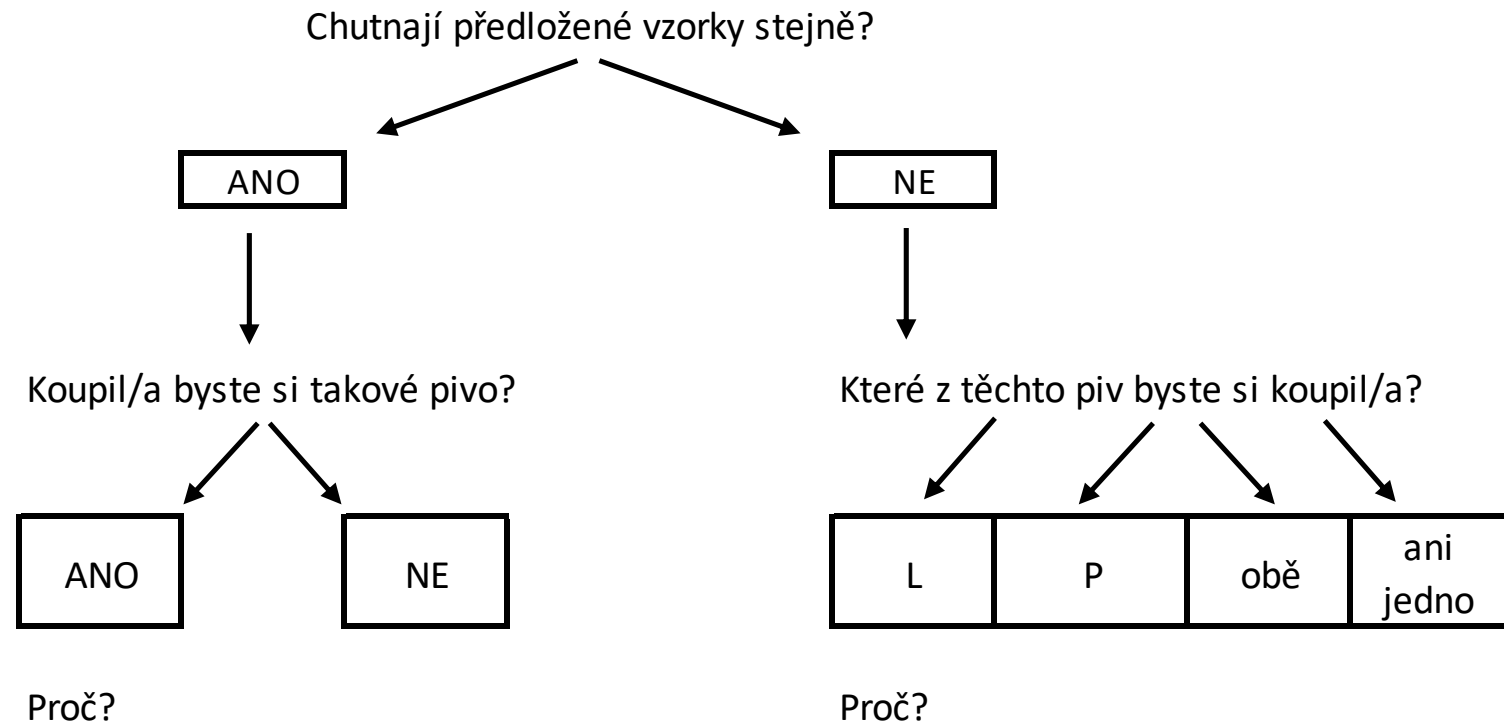
Senzorické hodnocení piv – preference (119 konzumentů)

Senzorické hodnocení nealkoholických piv

.....
jméno a příjmení

termín:

číslo boxu:

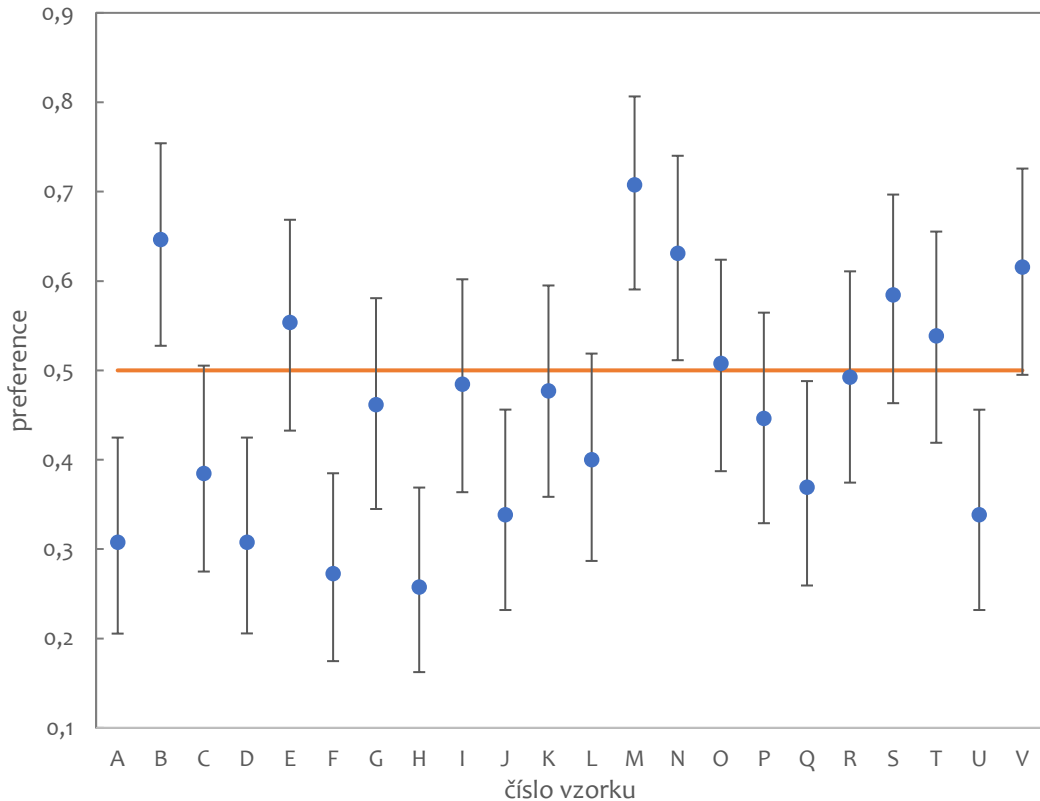


Konzumenti dle jejich odpovědí preferují:

- nealko pivo připomínající skutečné pivo
- hořčí
- s příjemnou hořkostí
- bez cizích chutí a vůní
- vyvážené
- plné

Naopak nepreferují:

- cizí chutě a vůně
- drsnou hořkost
- výraznou mladinovou chuť
- výrazné ovocné nebo limonádové chutě chutě
- prázdné („vodové“)



Preference konzumentů k nealkoholickým pivům – jak je to ovlivněno chemickým složením piva?



Chemické analýzy

Základní parametry piva (extrakt, alkohol, extrakt původní mladiny, prokvašení, pH, CO₂)

Sacharidy

hořké látky a jejich deriváty

Aldehydy a ketony

Estery

Vyšší alkoholy

Další těkavé látky (dicetyl, acetaldehyd, DMS)

Chmelové silice

Sodík + draslík

Polyfenoly

Mastné kyseliny

Aminokyseliny

Organické kyseliny

Necílená GC-MS analýza

NIR

GC (FID, ECD, MS)

HPLC (RI, UV, FLD, MS)

spektrofotometrie

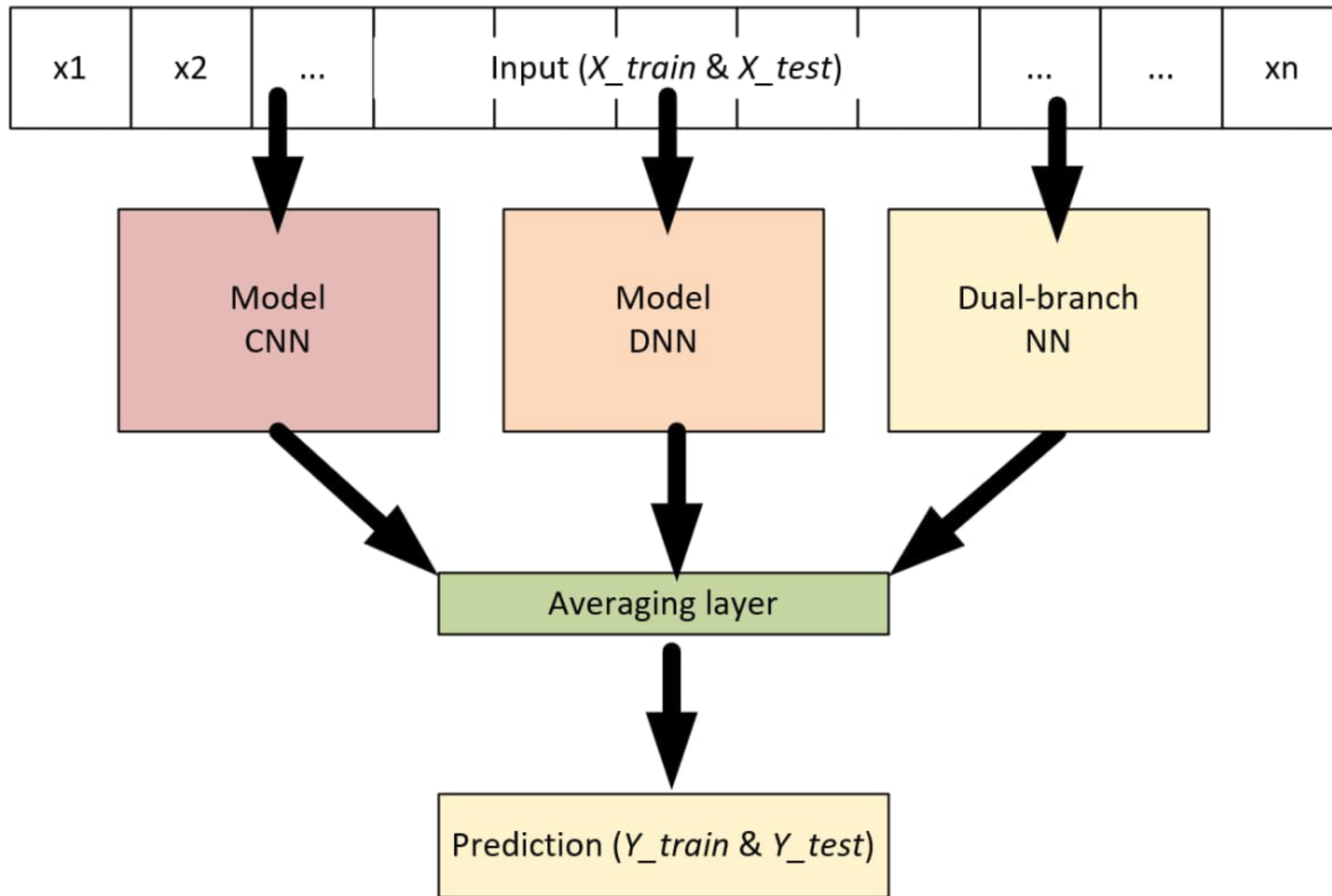
AAS

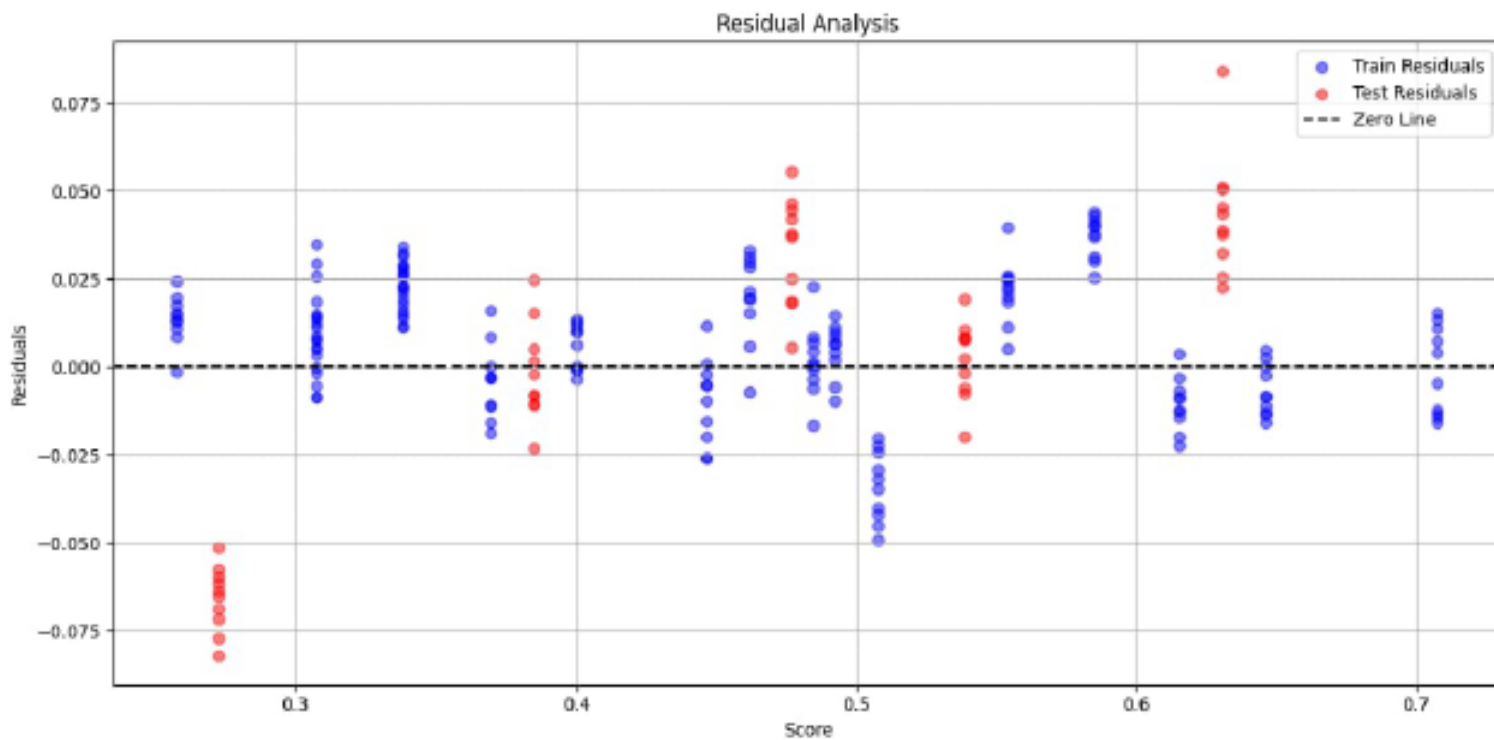
isotachoforéza

potenciometrie

Klasický data mining nevedl k příliš detailním výsledkům.







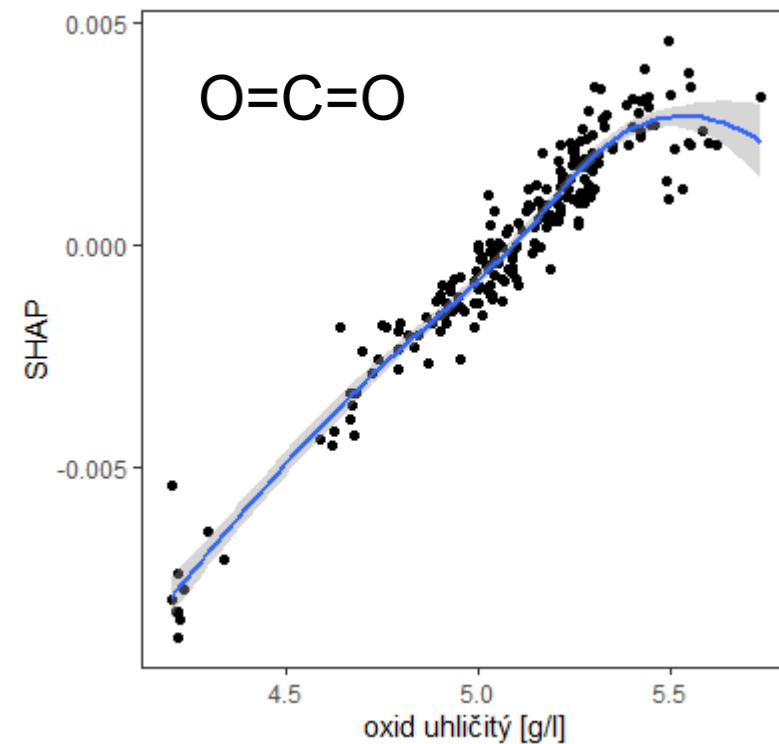
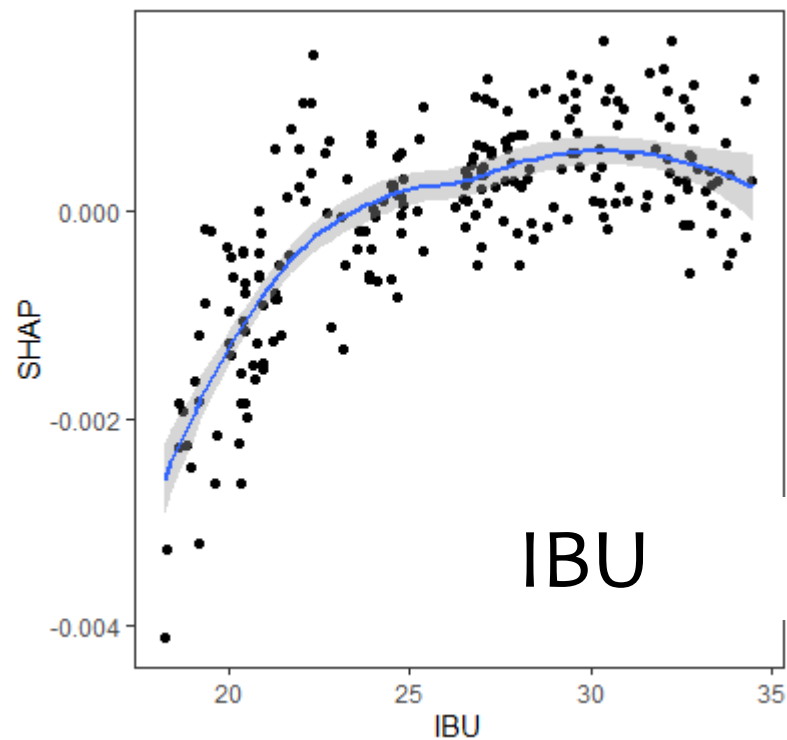
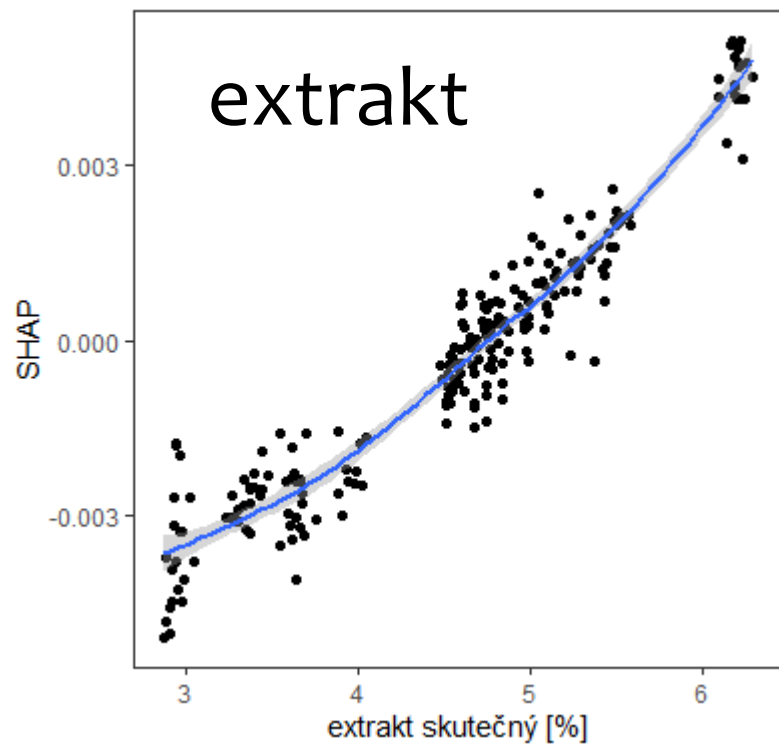
Obrázek 23 Ensemble model Reziduální analýza

Celkově máme tedy model, který lze interpretovat a případně předpovídat preferenci pokud bychom měli jiná piva nebo u těch stávajících změnili koncentrace některých sloučenin.

Nejistota experimentálně stanovených hodnot preference: $\pm 0,10$

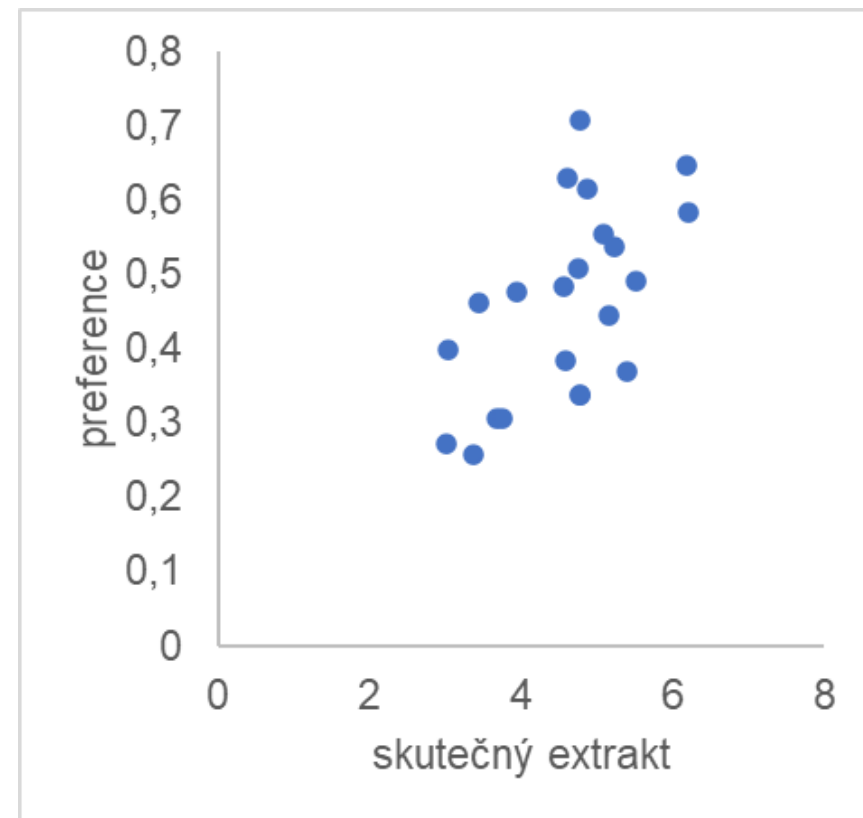
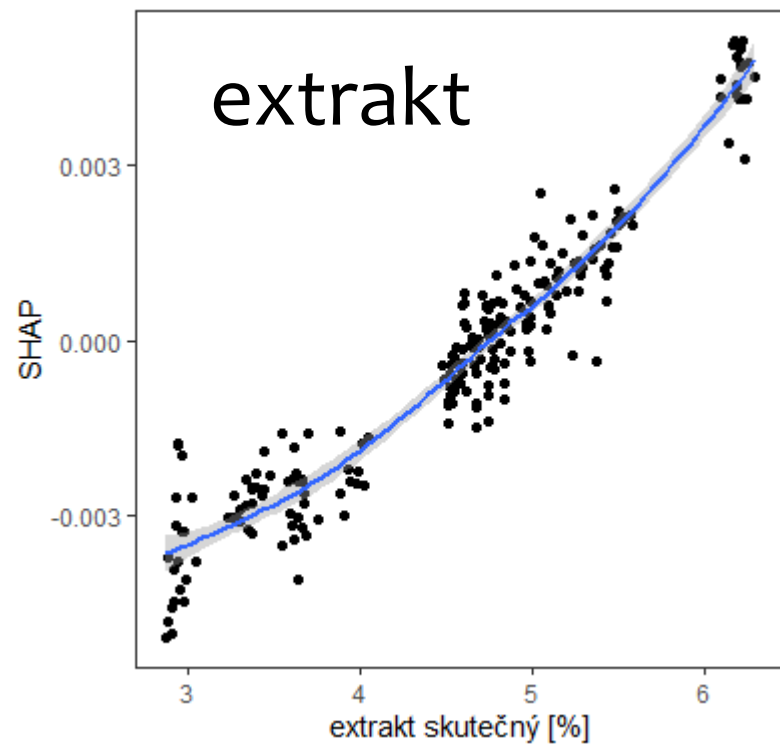
Residua: $\pm 0,08$





plnost + hořkost + říz

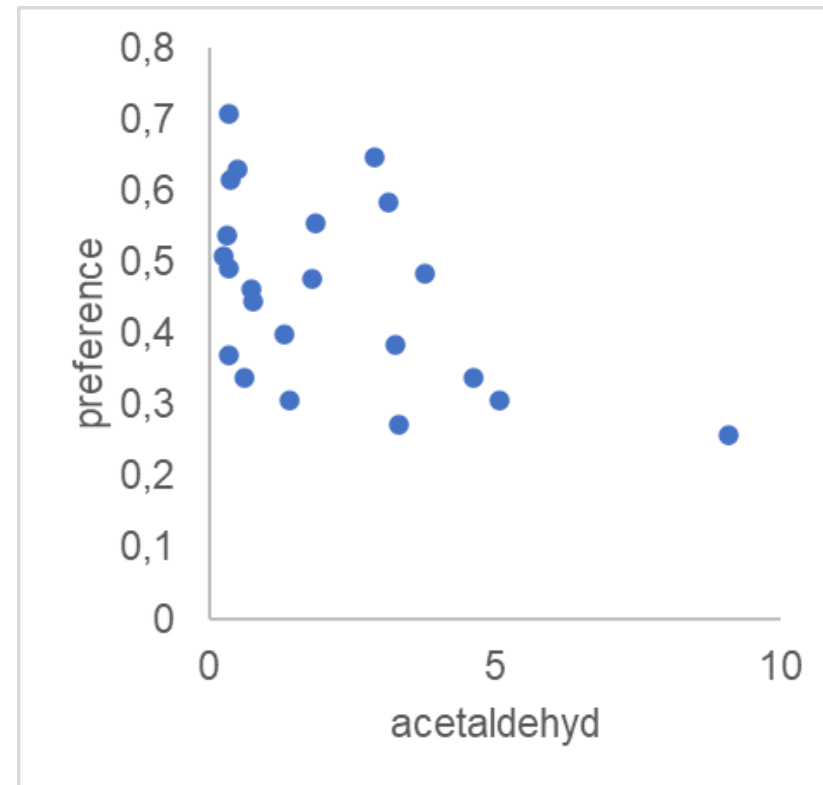
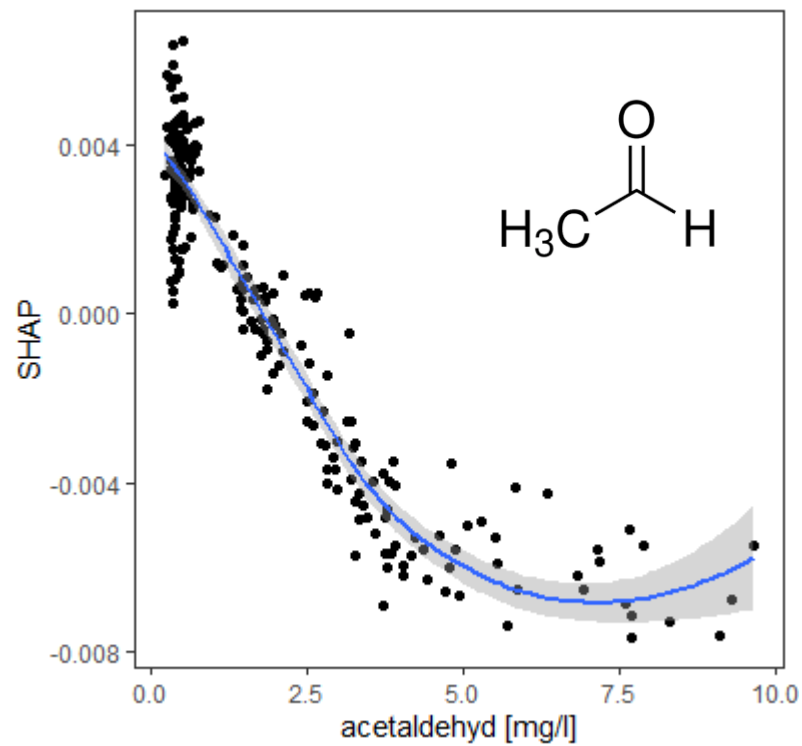




SHAP vs korelace

SHAP graf se nerovná korelační graf mezi závislou a nezávislou proměnnou.

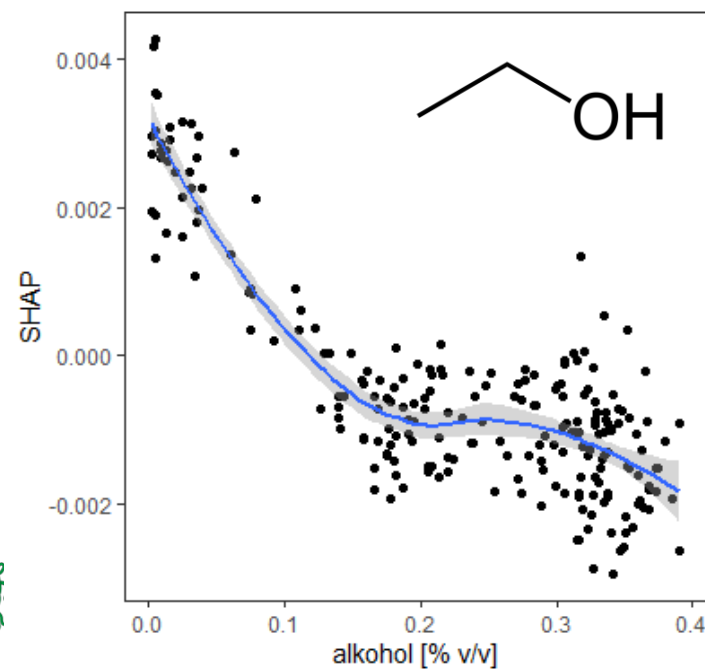
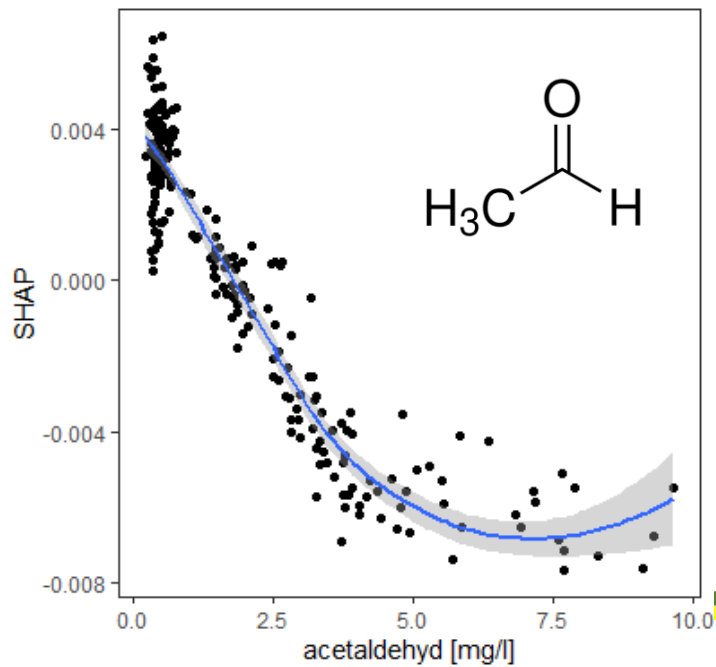
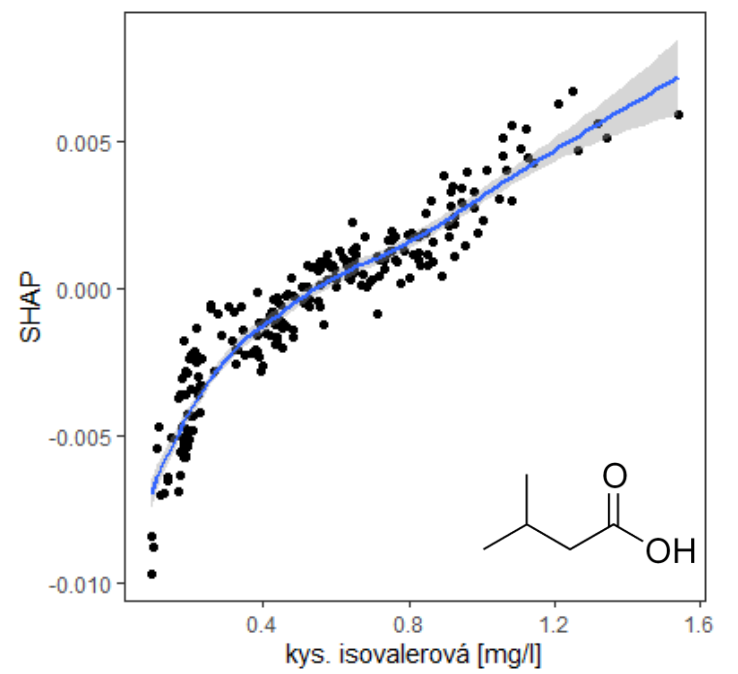
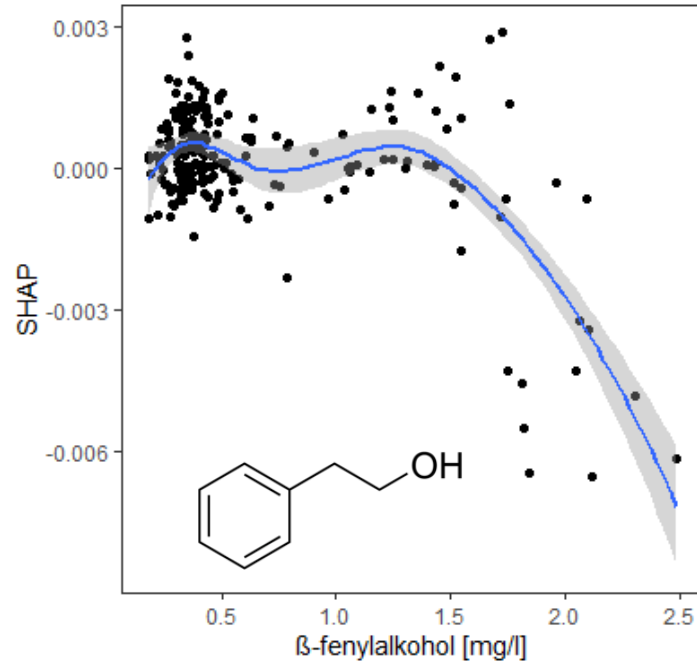
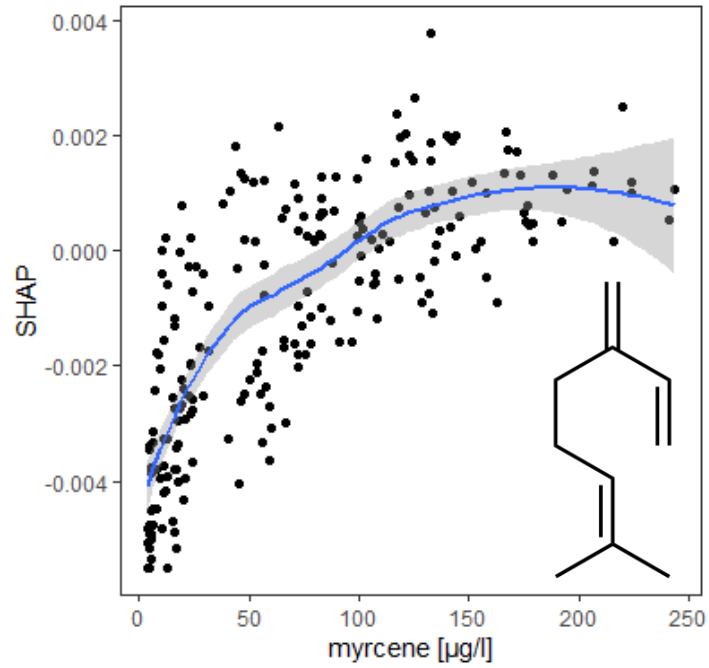




SHAP vs korelace

SHAP graf se nerovná korelační graf mezi závislou a nezávislou proměnnou.





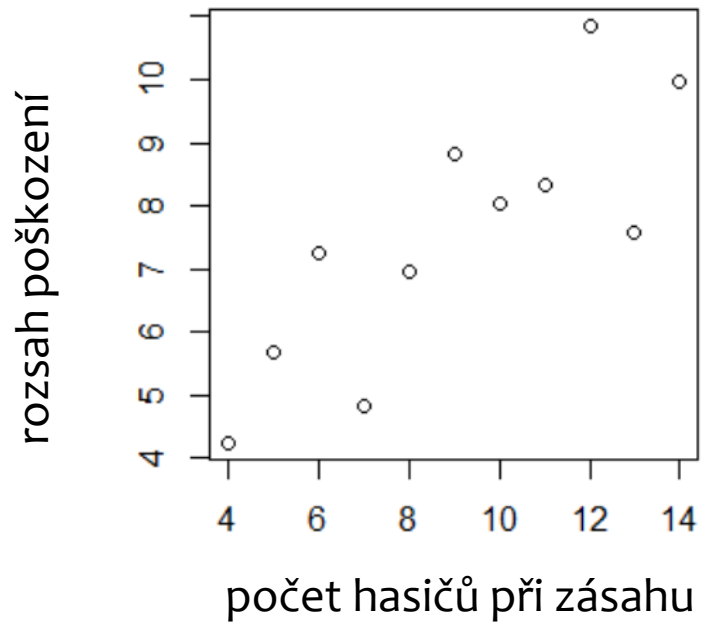
??



Zdánlivé (falešné) korelace



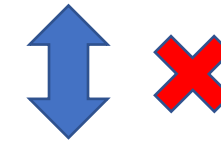
Zdánlivé (falešné) korelace



rozsah požáru

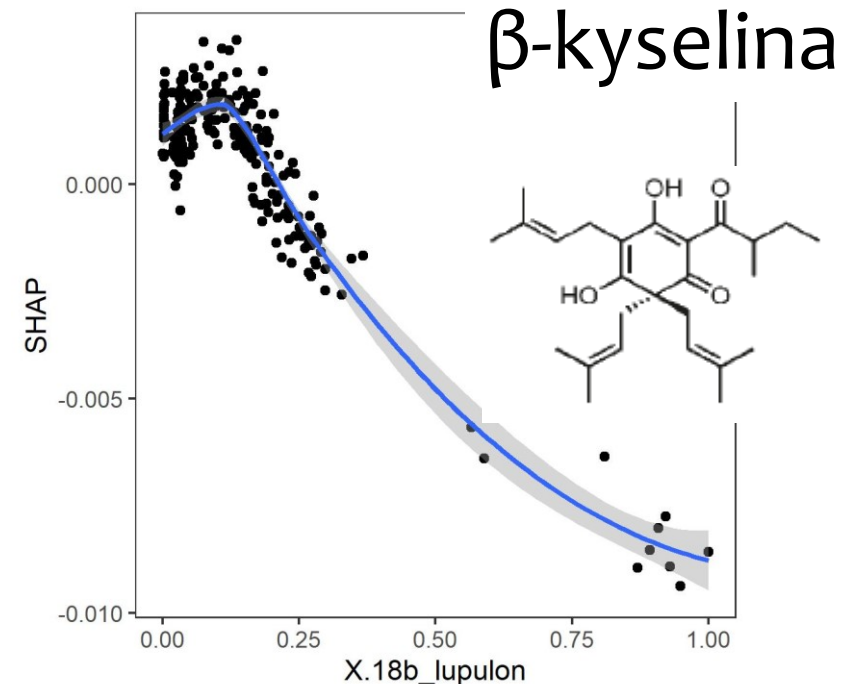
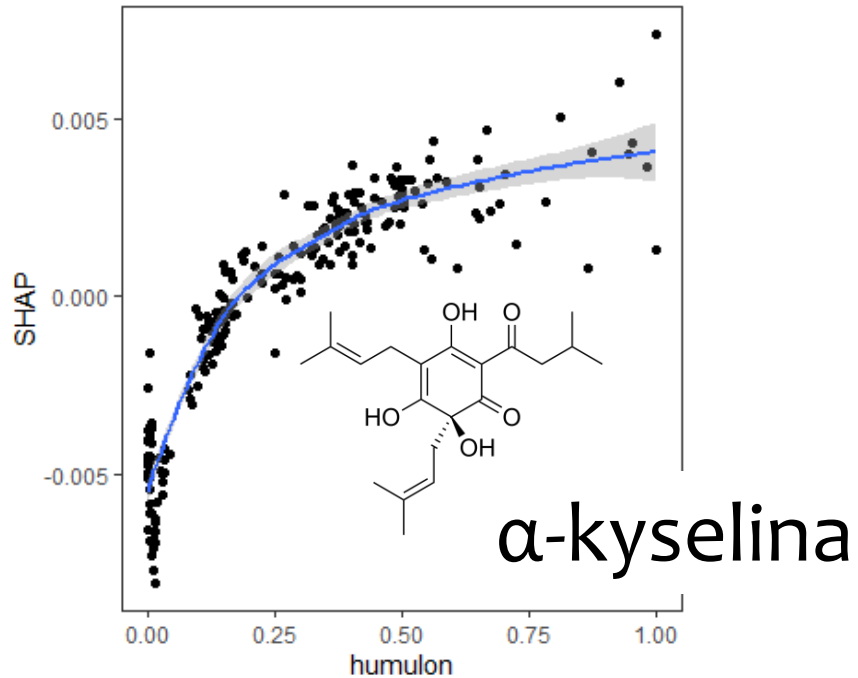


počet hasičů při zásahu

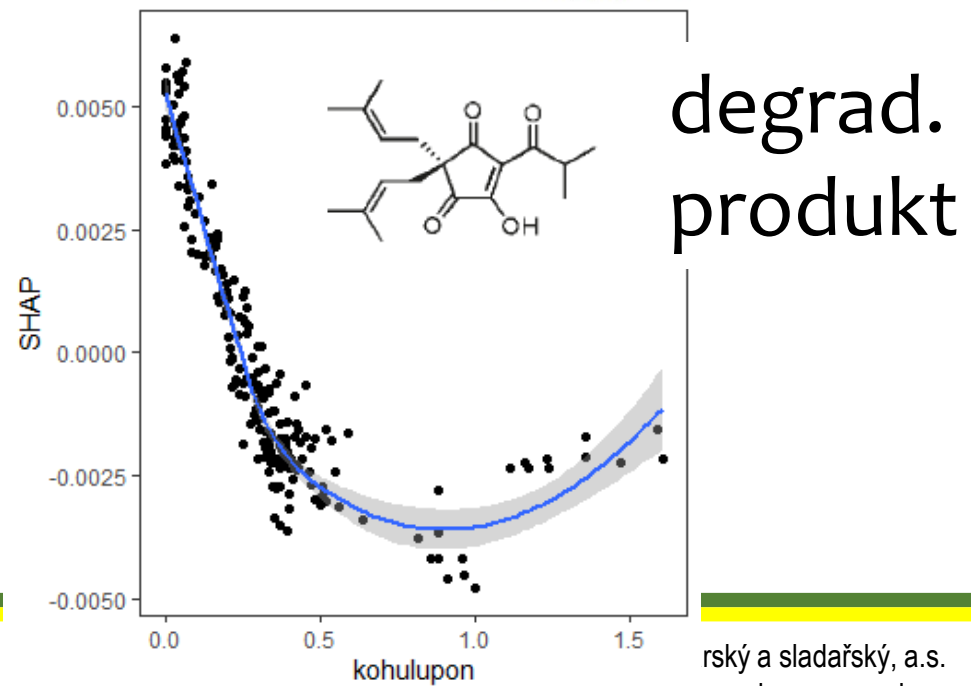
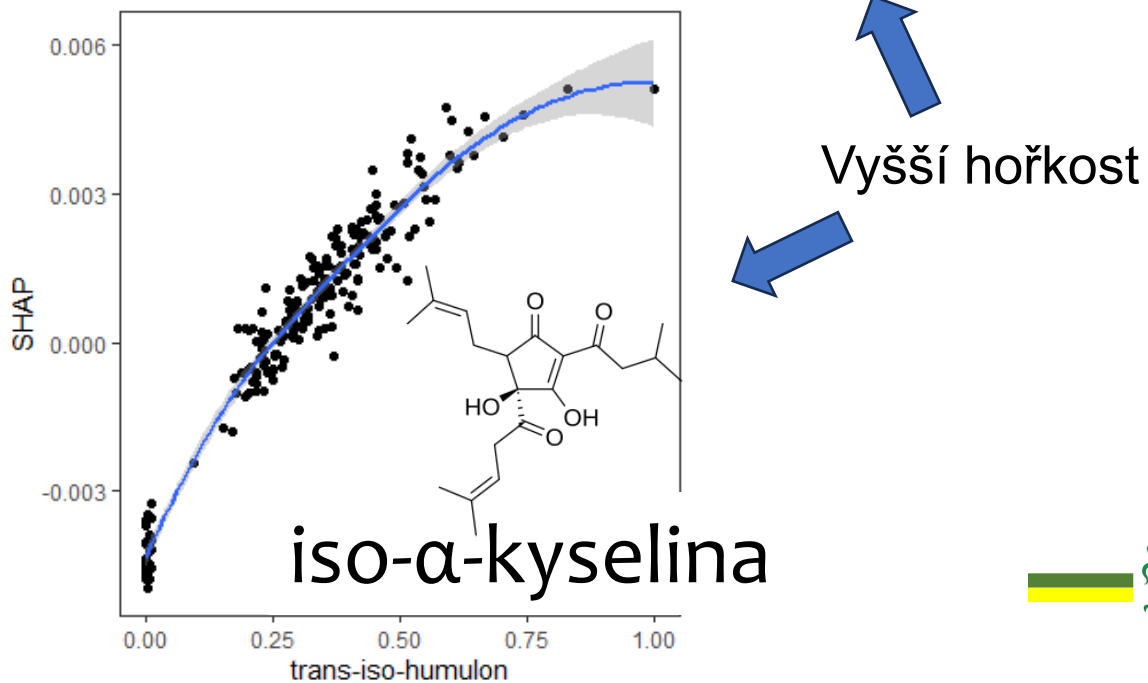


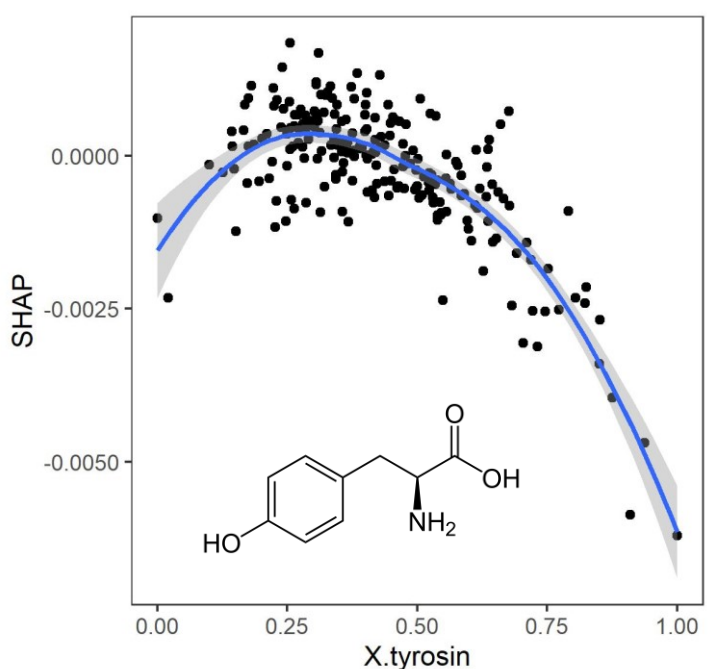
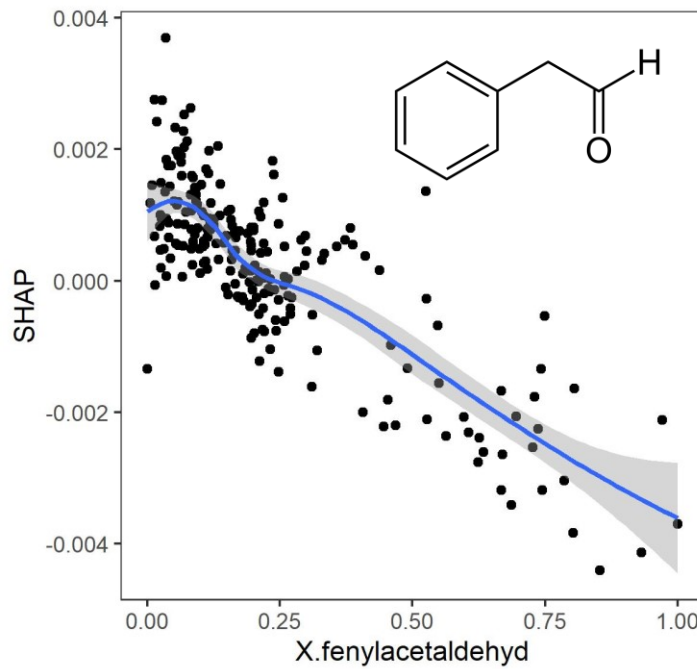
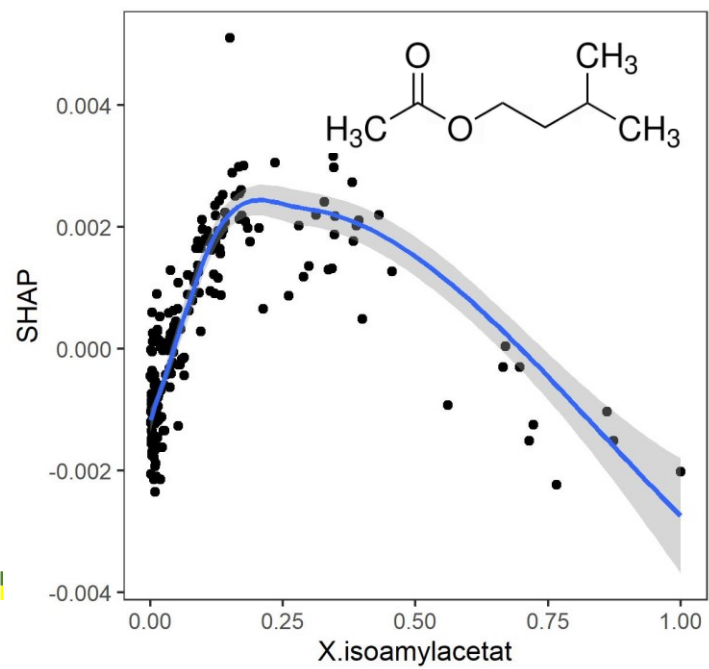
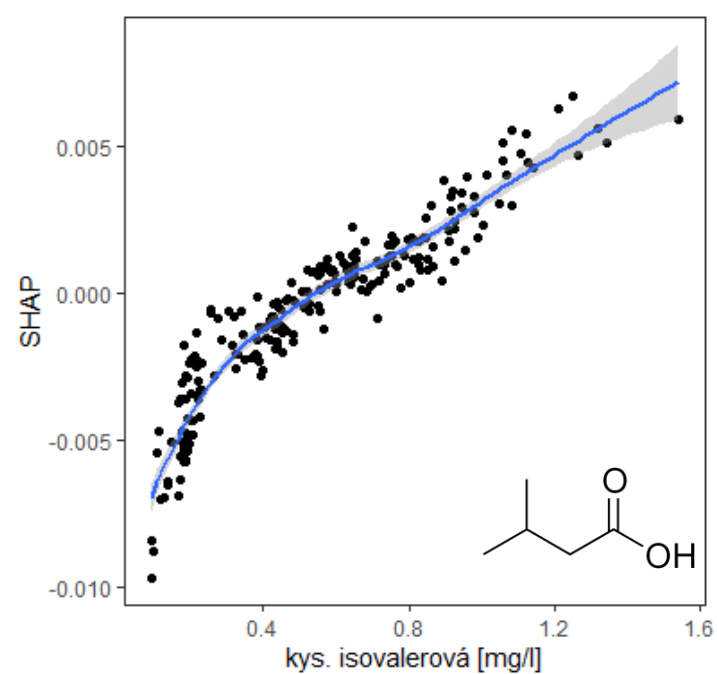
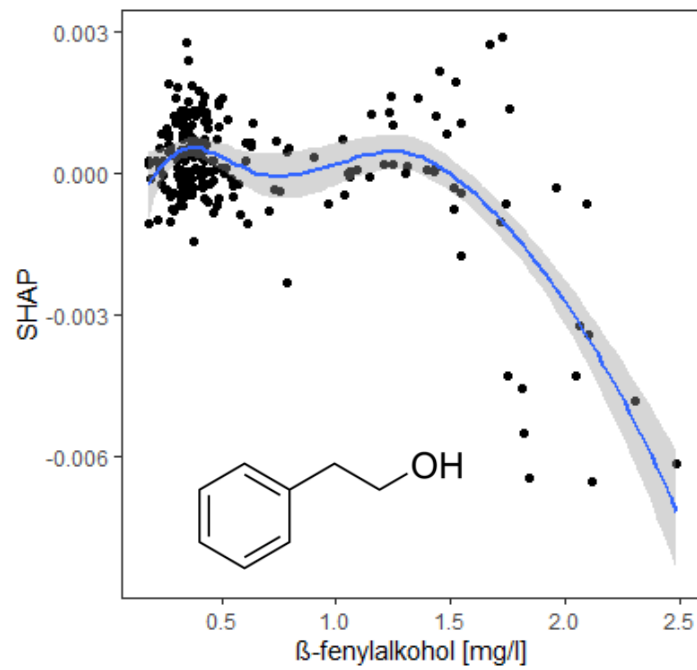
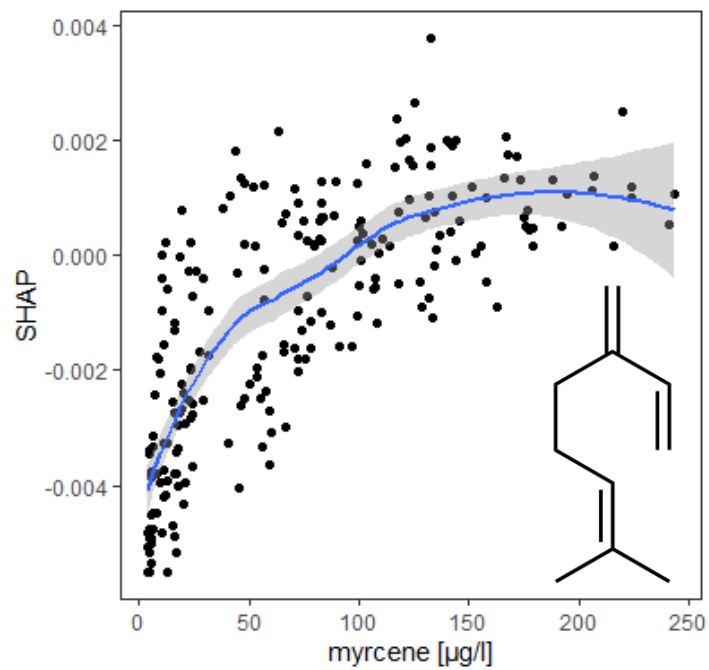
rozsah poškození

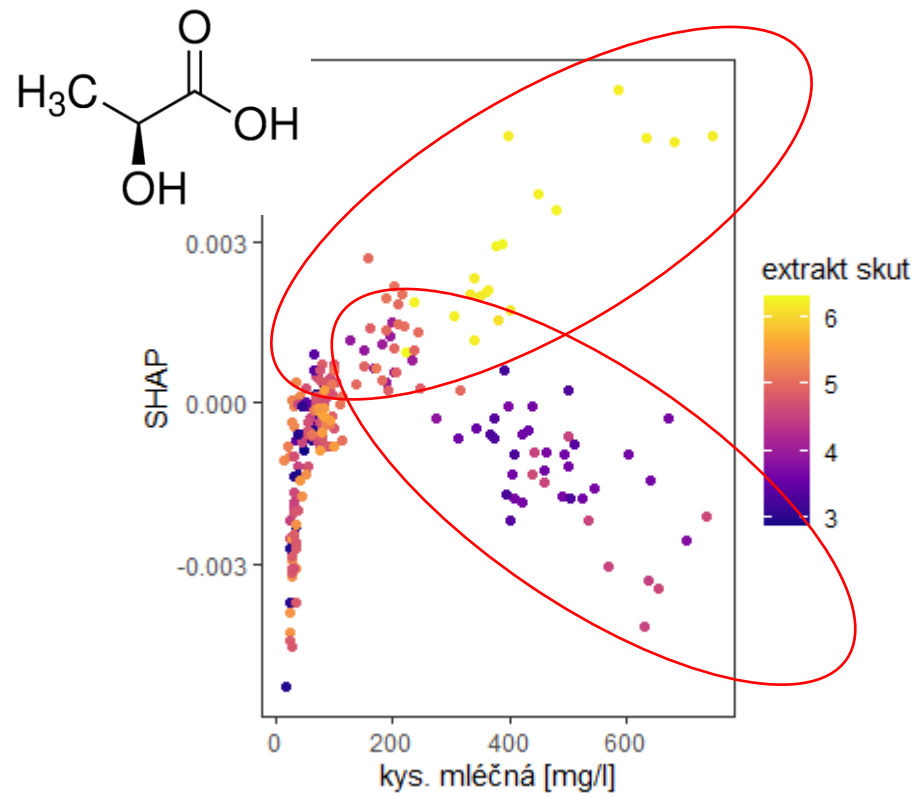
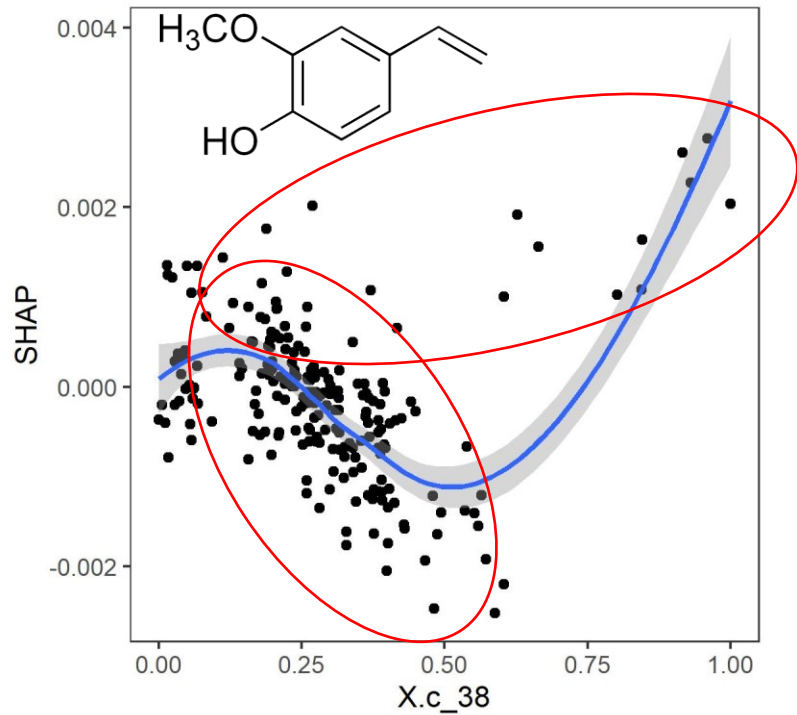




Drsná hořkost







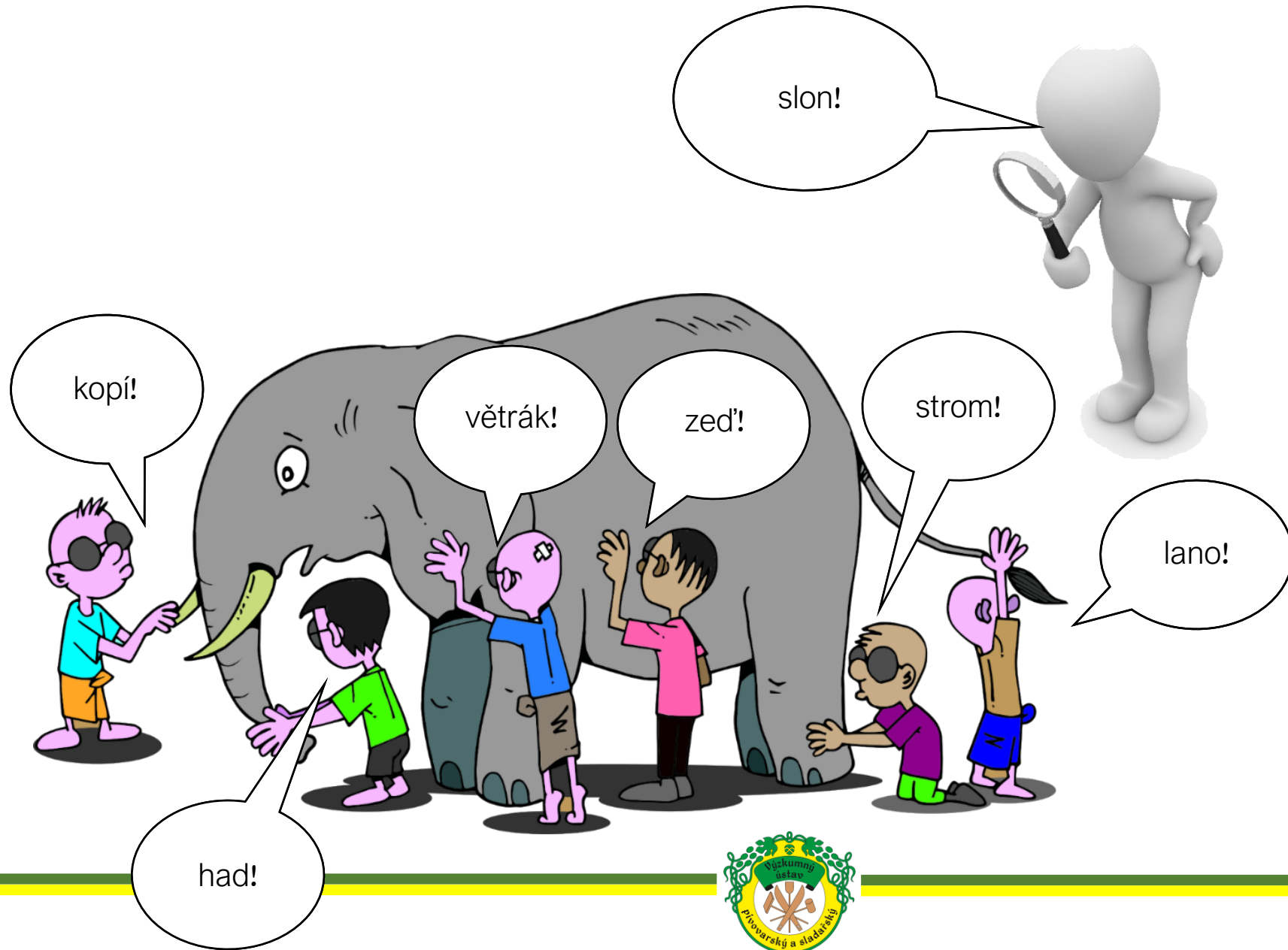
Test:

Přídavek kys. mléčné – zakulacení + dodání kyselosti -> osvěžující charakter

Při nízkém extraktu až moc kyselá (extrakt nemaskuje) + typická chuť kys. mléčné.



Důležitá je vždy souhra více parametrů, ne izolovaně jednotlivé parametry – **holistický přístup**.



Příklad aplikace

Senzorický charakter českého ležáku

Které látky tvoří tento charakter?



Senzorický charakter českého ležáku – jak definovat?



Senzorický charakter českého ležáku – jak definovat?

Praktická ukázka ve formě ochutnávky



Chemické analýzy v obdobném rozsahu jako v předchozím případě.

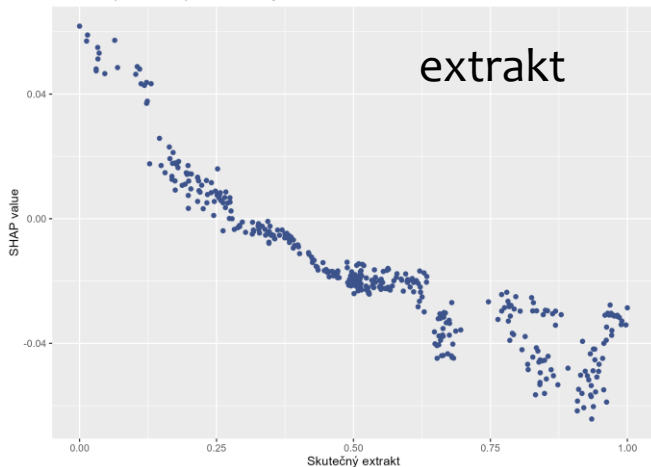
Senzorické hodnocení (odborní senzoričtí hodnotící - 12) – 2x

- hodnocení českého charakteru piva
 - subjektivní shoda celkového sensorického charakteru daného piva s osobní představou českého ležáku
 - stupnice 1 – 5 (1 – naprostá shoda; 5 – naprostá neshoda)

Studováno v porovnání se zahraničními ležáky.



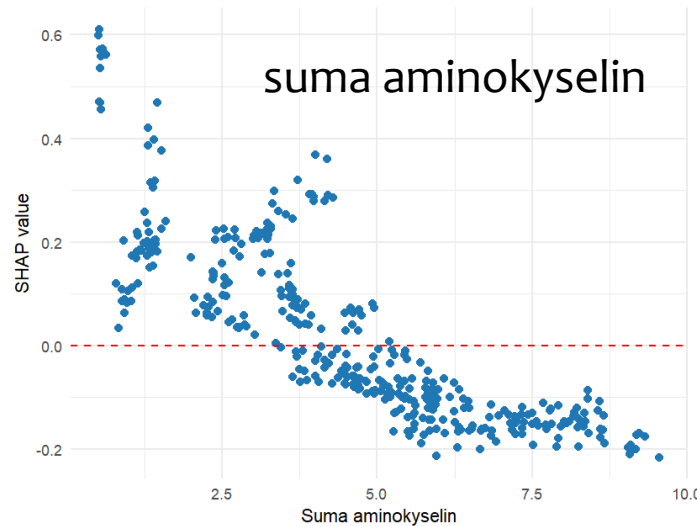
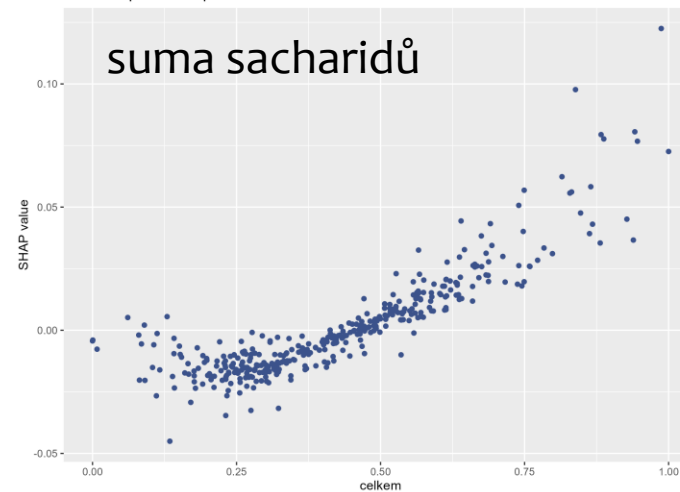
SHAP dependence plot: Skutečný extrakt



Extrakt je jeden z důležitých parametrů

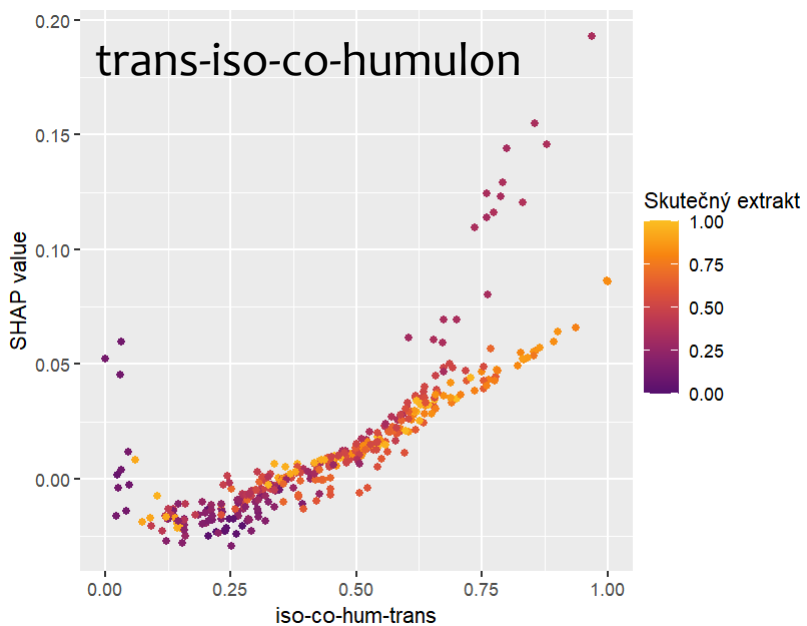
Není to ale o sladkosti -> je to o plnosti

SHAP dependence plot: celkem

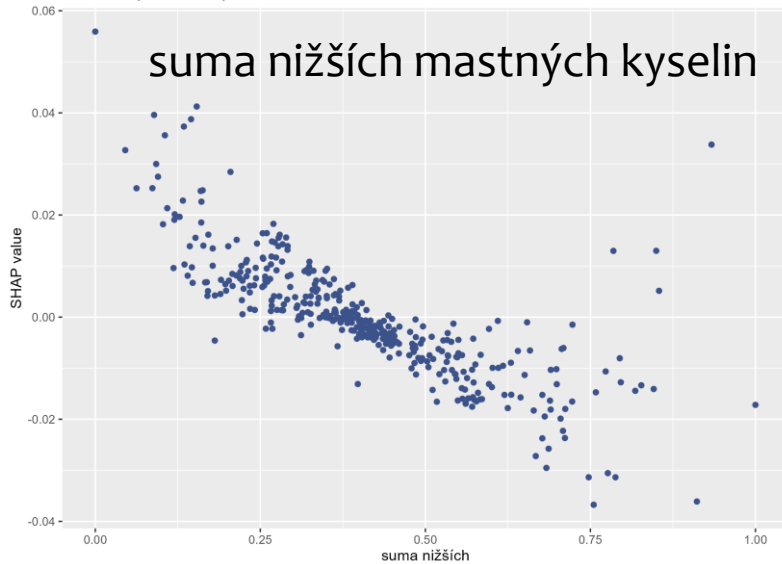


Není to o hořkosti ...

... ale prázdné pivo s vysokou hořkostí nepůsobí českým charakterem



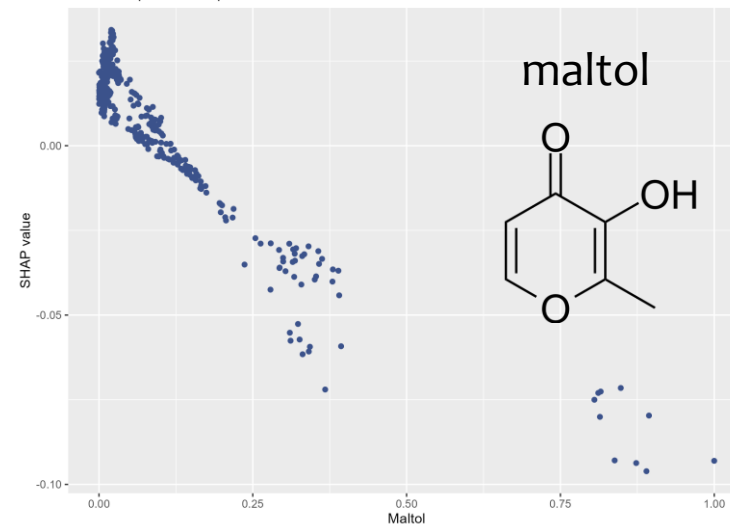
SHAP dependence plot: suma nižších



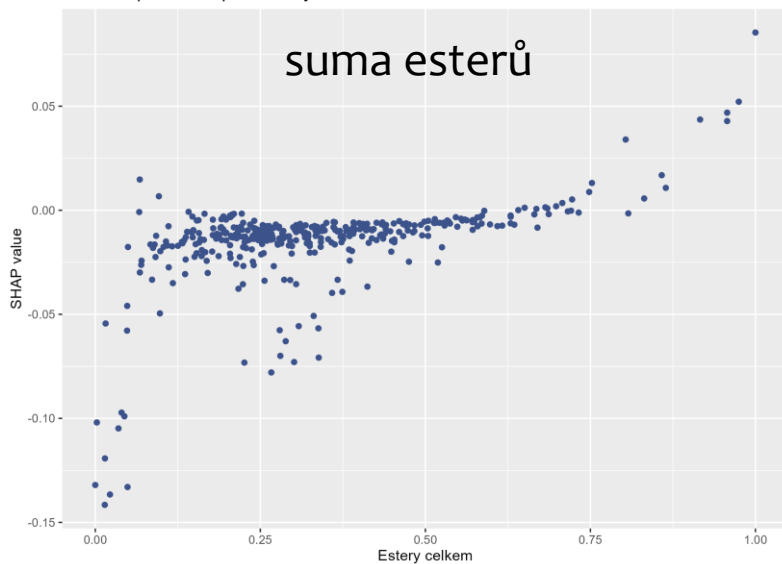
„pivní chuť“

Není to ale patrné z korelačních grafů
-> důležitost pokročilejších způsobů zpracování dat

SHAP dependence plot: Maltol

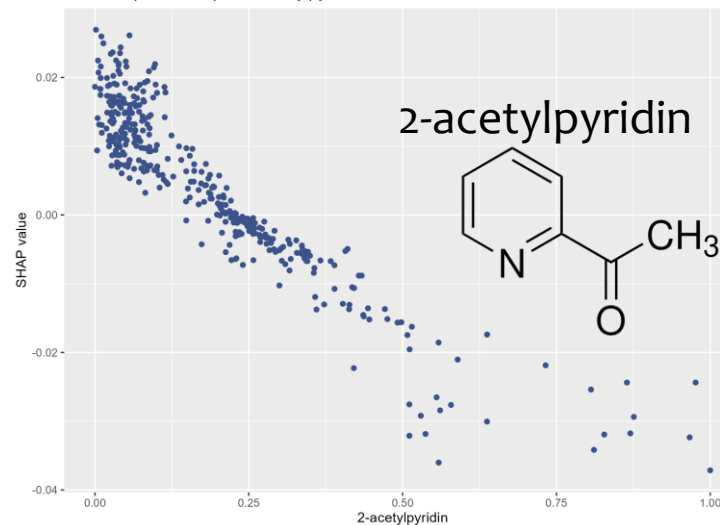


SHAP dependence plot: Estery celkem



nízké esterové aroma

SHAP dependence plot: 2-acetylpyridin



sladové aroma



Poděkování



Pilsner Urquell



BERNARD
Pivo



Svijany
český rodinný pivovar
- 1664 -

HEINEKEN
ČESKÁ REPUBLIKA

Staropramen
EST. IN PRAGUE

KRUŠOVICE
KŘÁPKOVÝ PIVOVAR

Platan

Budweiser
Budvar

HOLBA®
RYZÍ PIVO Z HOR

ZAL 1872
ZUBR

Litovel
KŘÁPKOVÉ PIVO

PRIMATOR



Institucionální podpora MZe RO1923

