



Modelos picantes:

Análise ampla dos parâmetros do ketchup

Autores: Soh H. W. R., Yim Q. W. B., Ho S. H. S.

🌐 profileprint.ai

📷 [@profileprint.ai](https://www.instagram.com/profileprint.ai)

📌 [profileprint](https://www.linkedin.com/company/profileprint)

ENDEREÇO

37 Jalan Pemimpin
#06-15 Mapex
Singapore 577177

CONTATO

info@profileprint.ai
+65 8769 0918

Conversando sobre a qualidade do ketchup

O ketchup, um dos molhos mais apreciados no mundo, tem um legado culinário de longa data, cuja origem remonta a um molho chinês à base de peixe fermentado, conhecido como kê-chiap¹. Essa versão embrionária do ketchup foi adaptada ao entrar nos portos britânicos no século XVIII². À medida que o condimento se espalhava pelo Império Britânico, ele evoluiu significativamente, incorporando ingredientes como cogumelos e nozes. A primeira receita de ketchup à base de tomate surgiu no início do século XIX, graças a James Mease, um agricultor norte-americano. Esse acontecimento foi um marco crucial na transformação do Ketchup no molho doce e picante que conhecemos hoje^{3,4}. No final do século XIX, Henry J. Heinz revolucionou a produção de condimento, enfatizando os tomates maduros e adicionando açúcar e vinagre, solidificando seu status como um elemento básico da culinária estadunidense.

A análise da qualidade do ketchup é essencial não apenas para garantir a segurança do consumidor, mas também para assegurar a consistência e a qualidade do produto. Vários métodos analíticos são empregados para avaliar os principais parâmetros de qualidade, como pH, acidez, viscosidade e atributos sensoriais^{5,6}. Essas análises ajudam os fabricantes a atender aos padrões de segurança e às expectativas dos consumidores em relação à textura e ao sabor. Técnicas instrumentais como medições reológicas e avaliações sensoriais agregam dados objetivos que podem orientar os processos de produção.

Apesar da importância da análise de qualidade, o uso de técnicas como a espectroscopia de infravermelho próximo visível (visNIR) na análise do ketchup ainda é limitado. Esses métodos oferecem meios rápidos e não destrutivos para avaliar a composição e os atributos de qualidade, sendo mais consistentes do que os métodos manuais, como o uso de consistômetros para medições reológicas. Neste trabalho, demonstramos o uso do analisador “Orca” da ProfilePrint, que captura as impressões digitais do ketchup comercialmente disponível.

¹ [The History of Ketchup](#)

² [The Evolution of Ketchup](#)

³ [James Mease](#)

⁴ <https://radwag.com/pdf2/en/ketchup.pdf>

⁵ [Physico-Chemical Analysis of Various Samples of Tomato Ketchup](#)

⁶ <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10942912.2013.853186>

Medidas picantes

Ketchup e o escaneamento de suas impressões digitais

Foi adquirido um total de 20 variedades de ketchup em supermercados locais de Cingapura e plataformas de e-commerce, representando diversas marcas, receitas e origens. Os detalhes são mostrados na tabela abaixo, com parâmetros nutricionais em termos de 100g de ketchup:

ID	Marca	Rótulo	Preço por peso (S\$/Kg)	Local de fabricação	Valor energético (Kcal)	Carboidratos (g)	Proteínas (g)	Sódio (mg)	Dias até o vencimento
1	Hellmann's	Tomato Ketchup Gluten Free	24.25	EUA	86	19.0	1.3	1800	172
2	Rudolf's	Bio Ketchup	16.02	Letônia	90	19.5	1.6	1700	726
3	Farmland	Tomato Ketchup	3.82	Malásia	128	26.3	1.5	1990	375
4	Supervalu	Tomato Ketchup 50% Less Sugar and Salt	5.12	Irlanda	61	13.0	1.4	700	25
5	Hunt's	100% All Natural Tomato Ketchup	7.94	EUA	118	29.4	0.0	2059	206
6	Heinz	Tomato Ketchup Organic Certified	14.99	EUA	118	29.4	0.0	2794	340
7	Life	Tomato Ketchup	10.20	Malásia	121	28.0	1.0	1760	494
8	Ottogi	Tomato Ketchup	7.00	Coréia do Sul	120	29.0	1.0	2639	389
9	Ottogi	1/2 Ketchup	9.29	Coréia do Sul	80	18.0	1.9	1200	147
10	Sing Long	Tomato Sauce	12.14	Cingapura	90	20.6	1.6	1360	664

ID	Marca	Rótulo	Preço por peso (R\$/Kg)	Local de fabri- cação	Valor en- ergético (Kcal)	Car- boidra- tos (g)	Proteínas (g)	Sódio (mg)	Dias até o vencimen- to
11	Kagome	Tomato Ketchup	22.90	Japão	118	27.9	1.6	3500	400
12	Chung Hwa	Tomato Sauce	9.79	Cin- gapura	48	11.9	0.0	1560	326
13	De Nigris Balsamic Sauce	Gourmet Italian Ketchup	20.00	Itália	133	33.3	0.0	2500	479
14	FairPrice	Tomato Ketchup	3.13	Malásia	102	24.0	1.2	1338	500
15	Heinz	Tomato Ketchup No Sugar Added	13.25	EUA	63	6.3	0.0	2969	303
16	Heinz	Tomato Ketchup	9.84	México	118	29.4	0.0	3529	279
17	Kirei Del Monte	Premium Quality Japanese Ketchup	16.00	Japão	111	26.9	2.0	3200	294
18	Maggi	Tomato Sauce	5.53	Malásia	118	28.0	1.0	1850	325
19	Otafuku	Ketchup Sauce for Baby 1+ Year	15.00	Japão	133	33.3	1.7	3333	263
20	True Made Foods	Ketchup with Extra Veggies No Sugar Added	27.39	EUA	63	12.5	0.0	2031	21

As amostras abrangeram uma ampla variedade de composições nutricionais, com teores de carboidratos variando de 6,3 a 33,3 g por 100 g e de sal variando de 700 a 3.529 mg por 100 g. O prazo de validade variou de 21 a 726 dias no momento da análise.



Amostras de Ketchup escaneados no Orca

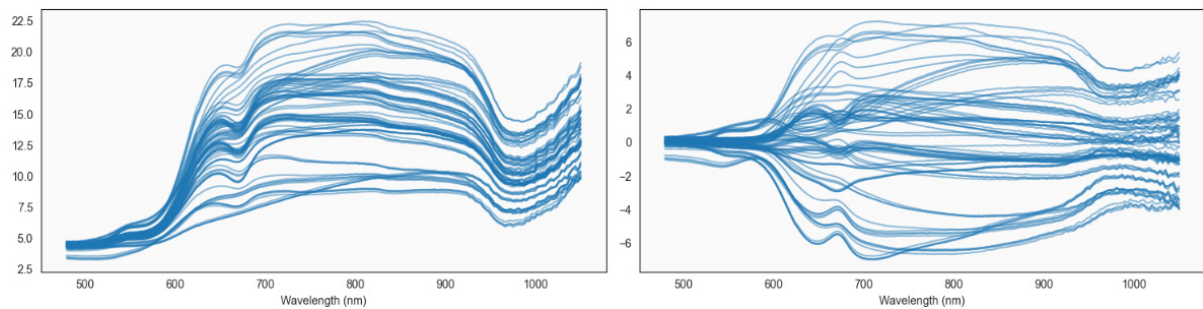
O escaneamento do ketchup foi realizado no analisador ProfilePrint “Orca” versão 5.0. Ele coleta sinais por meio de princípios de refletância difusa na faixa de 400 a 1700 nm. No caso de líquidos, semilíquidos e substâncias possivelmente translúcidas ou transparentes, usamos um prato de transflectância prateado para favorecer a coleta de sinais mais fortes.

Para padronizar o escaneamento do ketchup, enchemos os pratos de amostra com 7,7 a 8,3 g do molho e os nivelamos para apresentar uma superfície lisa e plana ao analisador, conforme mostrado na figura a seguir.

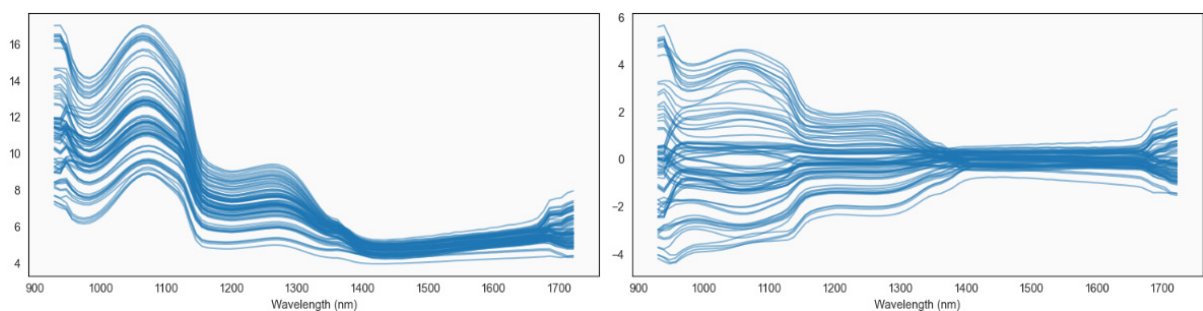


3 ketchups diferentes, cada um com 8 g e nivelados com nosso raspador de pratos

Cada ketchup foi considerado um lote de produto, e foram feitas quatro amostragens separadas, totalizando quatro amostras por lote. Abaixo, são mostrados os espectros VISNIR e NIR-II do ketchup. Os espectros VISNIR parecem mais variados do que a faixa NIR-II, com alguns ketchups apresentando padrões muito diferentes na região de 600-800 nm. Particularmente, houve forte absorção de sinais entre 400 e 550 nm, o que corresponde à extremidade azul dos espectros visíveis e explica a cor vermelha do ketchup. Os ketchups também absorveram fortemente na faixa de 1400-1500 nm, devido à absorção dos raios NIR pela água.



Espectros VISNIR do ketchup (esquerda) e após a centralização média (direita)



Espectros NIR-II do ketchup (esquerda) e após a centralização média (direita)

Medindo a consistência do Ketchup

A consistência dos molhos é normalmente medida pelo uso de um consistômetro, que mede a distância que uma quantidade fixa de molho fluiria ao ser liberada de uma câmara. Como o ketchup geralmente é tixotrópico e mais viscoso do que a maioria dos condimentos e molhos, inclinamos o consistômetro num ângulo adequado para criar uma faixa maior de leituras.



Um Consistômetro Bostwick

O aparelho foi ajustado para uma inclinação de $16,5^\circ$, especificamente calibrado para a alta viscosidade típica do ketchup. Ao encher a câmara até a borda, a barragem com mola era liberada e o ketchup fluía por 30 segundos. O grau de escoamento do ketchup foi medido na “frente” e na “traseira” da área de escoamento, conforme ilustrado na imagem a seguir, e calculada a média. Foram feitas triplicatas e uma média simples da leitura mencionada acima foi calculada e usada para modelagem.



Medição da parte “frontal” e “traseira” do ketchup

Os resultados das medições do consistômetro encontram-se tabulados a seguir:

ID	Marca	Rótulo	Leitura (cm)
1	Hellmann's	Tomato Ketchup Gluten Free	10.42
2	Rudolf's	Bio Ketchup	10.00
3	Farmland	Tomato Ketchup	13.00
4	Supervalu	Tomato Ketchup 50% Less Sugar and Salt	17.00
5	Hunt's	100% All Natural Tomato Ketchup	5.08
6	Heinz	Tomato Ketchup Organic Certified	7.08
7	Life	Tomato Ketchup	9.42
8	Ottogi	Tomato Ketchup	6.50
9	Ottogi	1/2 Ketchup	6.00
10	Sing Long	Tomato Ketchup	18.50
11	Kagome	Tomato Ketchup	9.83
12	Chung Hwa	Tomato Sauce	12.83
13	De Nigris Balsamic Sauce	Gourmet Italian Ketchup	5.33
14	FairPrice	Tomato Ketchup	12.33
15	Heinz	Tomato Ketchup No Sugar Added	7.83
16	Heinz	Tomato Ketchup	9.92
17	Kirei Del Monte	Premium Quality Japanese Ketchup	11.00
18	Maggi	Tomato Sauce	11.67
19	Otafuku	Ketchup Sauce for Baby 1+ Year	11.00
20	True Made Foods	Ketchup with Extra Veggies No Sugar Added	5.33

No geral, observamos que as leituras do consistômetro variaram de 5,08 cm a 18,50 cm para o ketchup de tomate Hunt's e o molho de tomate Sing Long, respectivamente.

Modelos picantes

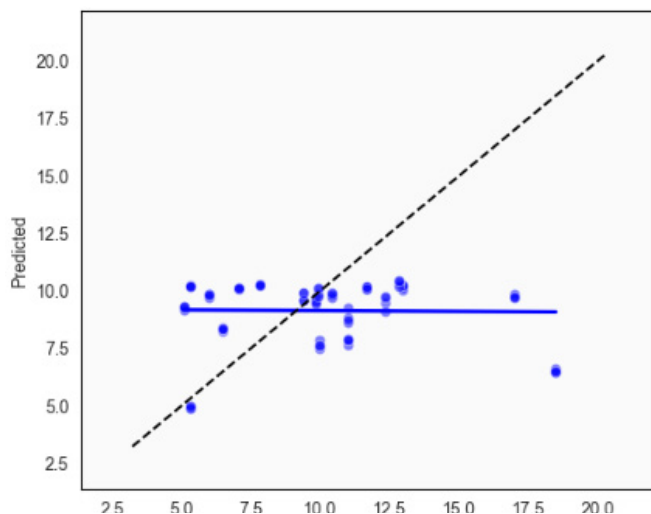
Como havia apenas 20 lotes únicos de ketchup, decidimos não separar uma parte dos dados para teste. Em vez disso, usamos a validação cruzada tripla para estimar o desempenho de retenção e ajustar o hiperparâmetro. A validação cruzada tripla consiste em dividir o conjunto de dados em três partes iguais. Em cada iteração, treinamos nossos modelos em duas partes e os testamos na parte restante, garantindo que todas as três partes tivessem a chance de ser avaliadas. Depois de concluir esse processo, selecionamos o melhor canal com hiperparâmetros otimizados e o treinamos novamente no conjunto de dados completo para criar nosso modelo final.

Abaixo, relatamos as métricas de validação cruzada, com previsões feitas no nível da amostra, resultando em quatro pontos por ketchup, conforme representado nas curvas previstas versus reais.

Como não foi designado um conjunto de teste de retenção, recomendamos cautela ao interpretar os dados além das amostras de ketchup que temos aqui. No entanto, considerar a adequação desses modelos ao conjunto de dados fornece informações valiosas sobre a capacidade da tecnologia de modelar esses parâmetros de forma eficaz.

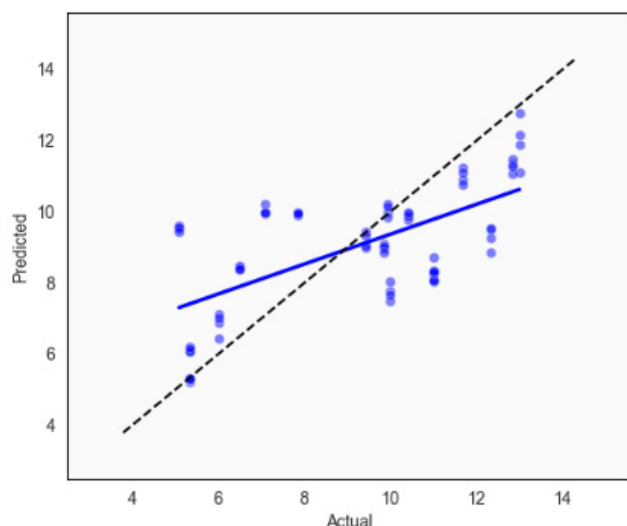
Consistência

Primeiramente, tentou-se um modelo de regressão com as leituras do consistômetro de todos os 20 frascos de ketchup em relação às suas respectivas impressões digitais, mas o modelo pareceu ser fortemente afetado pelos dois tipos de ketchup com consistência muito baixa (Supervalu e Sing Long). Nesse caso, o erro médio absoluto (MAE) foi de 2,92 cm.



Regressão da consistência de todos os 20 ketchups. MAE = 2,92 cm

A remoção dos dois ketchups de baixa consistência resultou em um modelo muito melhor, conforme mostrado abaixo, em que o MAE foi de 1,60 cm. Para uma faixa de valores reais de leitura do consistômetro variando de 5,33 cm a 13,00 cm, o erro foi de 20%. Acreditamos que esse valor está dentro da tolerância utilizável para que o modelo seja usado para verificar a qualidade de lote para lote em termos de consistência. Um modelo treinado com apenas um tipo de ketchup com diferentes consistências devido a variações de lote teria maior exatidão e precisão. No entanto, um número maior de tipos de ketchup pode aprimorar ainda mais esse modelo, permitindo que ele descubra quais partes do espectro se correlacionam melhor com as leituras do consistômetro.



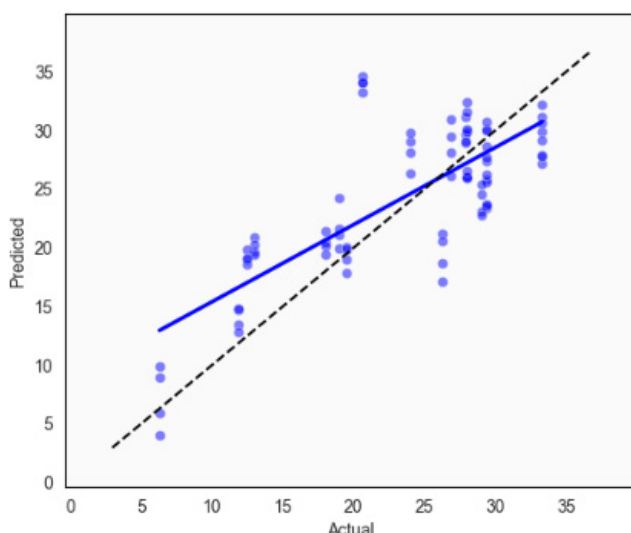
Regressão da consistência de 18 ketchups variando de 5,33 cm a 13,00 cm nas leituras do consistômetro. MAE = 1,60 cm

É importante ressaltar que o modelo demonstrou a capacidade da tecnologia de extrair sinais das impressões digitais do ketchup correlacionados com sua consistência e, por extensão, com a viscosidade. A inspeção dos ingredientes revelou a presença de amido ou outros ingredientes em alguns ketchups, mas não foi possível estabelecer uma relação clara entre a lista de ingredientes e a consistência. Assim, acreditamos que as impressões digitais capturaram um meio complexo de carboidratos e outras substâncias presumivelmente relacionadas à consistência, o que permitiu o treinamento bem-sucedido do modelo.

Conteúdo de Carboidratos, Proteínas e Sódio

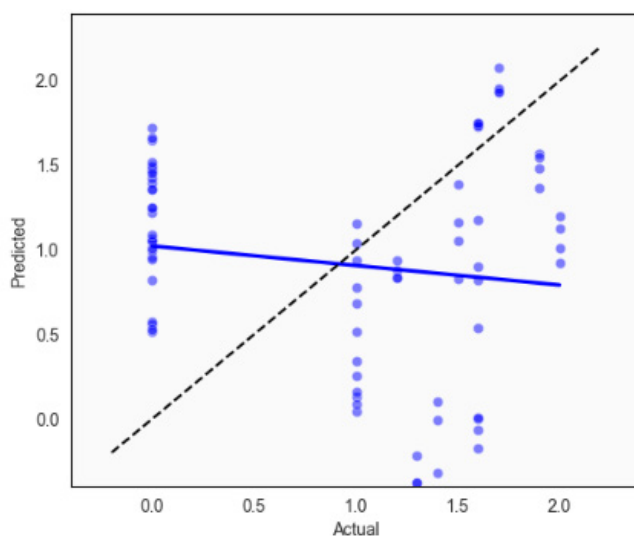
Em seguida, tentamos regressar os parâmetros nutricionais dos ketchups às suas impressões digitais, ou seja, o teor de carboidratos, proteínas e sal. O teor de carboidratos está intimamente relacionado ao Brix do ketchup e é um importante parâmetro de qualidade, assim como o teor de sal.

A previsão do teor de carboidratos foi possível com um MAE de 3,94 g, em uma faixa de 6,3 g a 33,3 g, o que representa um erro de 14,6% nessa faixa. A maioria dos ketchups com teor muito baixo de carboidratos eram aqueles que afirmavam não haver adição de açúcar. Ironicamente, um dos ketchups com maior teor de carboidratos e açúcar era destinado a crianças. Com exceção do ketchup Sing Long, as previsões de teor de carboidratos dos outros ketchups se aproximaram decentemente da diagonal.



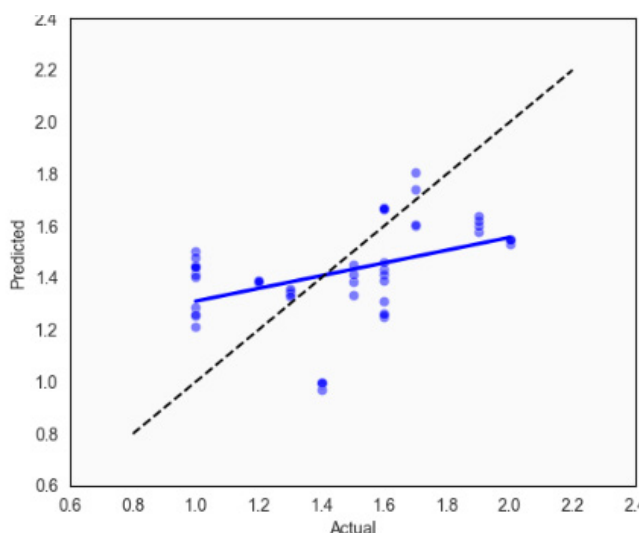
Regressão do teor de carboidratos de todos os ketchups. MAE = 3,94g

A modelagem do teor de proteína foi complicada porque os ketchups não têm um teor significativo de proteína e, devido ao pequeno tamanho da porção declarado por muitos fabricantes, o teor de proteína é frequentemente arredondado para 0 g. Isso foi comprovado pela significativa melhora no modelo de regressão após a remoção dos ketchups nos quais a proteína é declarada no rótulo como 0 g. Isso reforça ainda mais a necessidade de que os rótulos sejam precisos e coletados com cuidado.



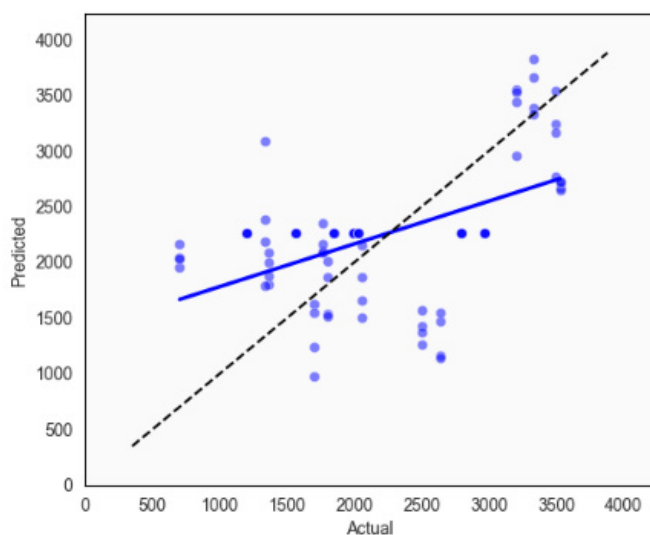
Regressão do teor de proteína de todos os ketchups. MAE = 0,89g

Um total de 7 ketchups foi removido do segundo modelo, resultando em um modelo com MAE de 0,25 g. Aqui, notamos a capacidade do Orca de detectar pequenas quantidades de substâncias, como a proteína. Observa-se também que o modelo conseguiu compreender a estimativa do teor de proteína, embora os valores informados nos rótulos nutricionais para proteína possam ser bem diferentes do teor real da proteína presente no material analisado.



Regressão do teor de proteína dos ketchups com o teor de proteína não-0. MAE = 0,25g

Embora o sódio em si não tenha nenhum pico de absorção na região do NIR, ele afeta os picos de absorção da água, o que permite correlacionar seu conteúdo às impressões digitais⁷. Um modelo foi criado com o teor de sal de todos os ketchups e resultou em um modelo com um MAE de 612 mg, correspondendo a cerca de 22% da faixa de valores de sal. O modelo teve um bom desempenho na previsão de garrafas de ketchup com alto teor de sal, bem como aquelas com teor de sal entre 1500 e 2000 mg, mas falhou em ketchups com teor de sal de 2500 mg. Em uma inspeção, descobrimos que um dos ketchups nessa faixa era o De Nigris Balsamic Gourmet Italian Ketchup, que tinha uma cor relativamente mais escura do que todos os outros. Esse fato pode ter afetado negativamente o modelo.



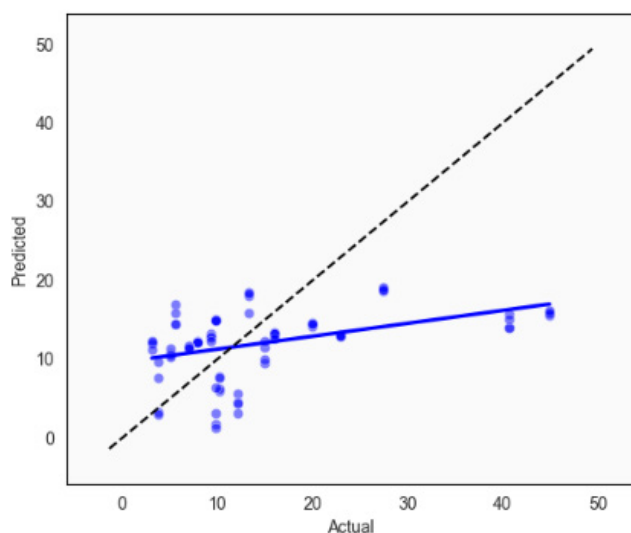
Regressão do teor de sal dos ketchups. MAE = 612 mg

⁷ <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2014.08.049>

Preço

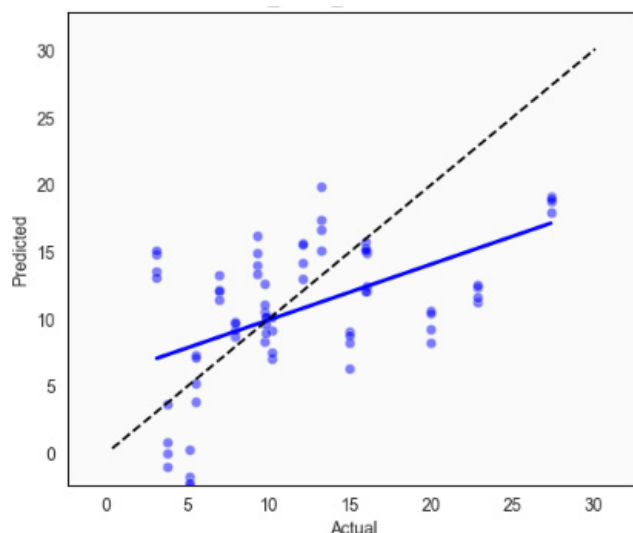
À medida que os experimentos com o consistômetro eram realizados, nos questionávamos se poderia haver uma correlação negativa entre preço e consistência. Em outras palavras, quanto mais caro o ketchup, menor a sua leitura no consistômetro. Curiosamente, uma análise de correlação mostrou que o coeficiente de correlação entre o preço e a leitura do consistômetro foi de 0,27, indicando uma correlação fraca, de modo que, quanto mais caro o ketchup, menos viscoso ele era.

Em seguida, passamos a modelar o preço diretamente em relação às impressões digitais, o que levou ao modelo abaixo, com um MAE de S\$ 7,77 por kg de ketchup para uma faixa de preços entre S\$ 3,13 e S\$ 27,39 por kg de ketchup. A análise detalhada da curva prevista versus a curva real indicou que os dois pontos de dados mais altos provavelmente estavam prejudicando a capacidade do modelo de capturar a tendência, portanto, eles foram removidos e o modelo foi treinado novamente.



Regressão do preço em S\$ por kg de ketchup de todos os ketchups. MAE = S\$7,77 por kg

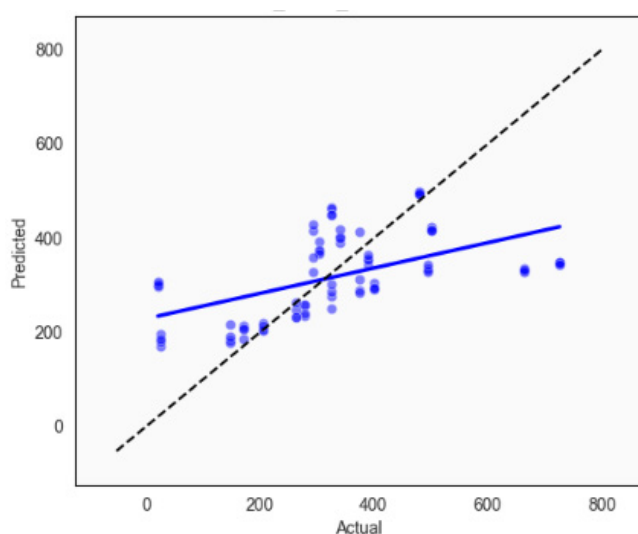
De fato, o modelo resultante teve um MAE muito menor, de S\$ 4,71 por quilo. A capacidade de correlacionar as impressões digitais dos ketchups ao preço pode não ter muita aplicabilidade prática, mas demonstrou que havia sinais indefinidos e possivelmente complexos nas impressões digitais dos ketchups que indicavam a qualidade e/ou a complexidade dos ingredientes, que determinavam o preço.



Regressão do preço em S\$ por kg de ketchup sem Hellmann's e Otafuku. MAE = S\$ 4,71 por kg

Data de validade

Os 20 ketchups do acervo apresentavam uma grande variedade de datas de validade. Após convertê-las em “dias até o vencimento”, contamos a partir do dia do escaneamento, modelamos as impressões digitais em relação aos dias até o vencimento e produzimos um modelo com um MAE de 108 dias, representando cerca de 15% do intervalo, de 21 a 726 dias. Embora houvesse sinais de que o modelo ainda estava subajustado nos extremos inferior e superior, isso foi incrivelmente intrigante, pois não conseguimos encontrar uma explicação para o fato de esse modelo ser possível. Algumas sugestões apresentadas estavam relacionadas à presença de produtos de degradação do conteúdo de tomate ou, possivelmente, à perda de voláteis, embora essa última fosse improvável, pois as garrafas estavam devidamente lacradas quando foram compradas.



Regressão dos dias até a expiração de todos os ketchups. MAE = 108 dias

Como alternativa, pensamos se os dias até o vencimento poderiam estar correlacionados a qualquer uma das variáveis acima modeladas. Nesse caso, o desempenho do modelo poderia ser explicado, pois ele poderia estar modelando uma variável bem correlacionada com os dias até o vencimento.

	S\$/KG	Carboidratos(g)	Proteínas (g)	Sódio (mg)	Dias até o vencimento
S\$/KG	1				
Carbohydrates (g)	-0.09	1			
Protein (g)	-0.11	0.10	1		
Salt (mg)	0.40	0.29	0.37	1	
Days to Expiry	-0.12	0.28	0.19	-0.06	1

Com base na matriz de correlação acima, os dias até a expiração apresentaram apenas uma correlação positiva fraca com os carboidratos e nenhuma com as outras três variáveis. É possível que o modelo esteja captando padrões nas impressões digitais correlacionados à degradação dos carboidratos, embora não tenhamos certeza disso.

Apesar disso, a capacidade de modelar os dias até a expiração fornece mais evidências de que a tecnologia é capaz de modelar parâmetros interessantes mesmo sem uma explicação clara. Isso amplia sua versatilidade na avaliação de molhos, sem a necessidade de depender de análises específicas para alcançar o mesmo objetivo. Em retrospecto, o modelo poderia ter sido melhor se também tivéssemos o dia exato da fabricação, o que nos permitiria modelar a idade do ketchup em vez dos dias até o vencimento.

| Um gostinho de futuro

O estudo demonstra o potencial da tecnologia de impressão digital para a avaliação rápida e multiparâmetro da qualidade de ketchups comerciais, utilizando o analisador Orca da ProfilePrint. A pesquisa desenvolveu com sucesso modelos preditivos para vários parâmetros-chave de qualidade a partir de um único conjunto de varreduras, apresentando um desempenho particularmente forte na previsão da consistência e do teor de carboidratos. Notavelmente, a tecnologia também estimou inesperadamente a vida útil do produto, sugerindo seu potencial para aplicações que vão além do controle de qualidade tradicional.

A tecnologia mostra-se promissora como uma ferramenta de triagem eficiente, reduzindo a necessidade de avaliações tradicionais e demoradas de qualidade. Entretanto, há limitações que precisam ser mais exploradas. Por exemplo, a precisão do modelo poderia ser aprimorada com amostras maiores, já que este estudo examinou apenas 20 tipos de ketchup.

Ao aproveitar a análise holística, essa abordagem prevê parâmetros de qualidade sem a necessidade de identificar componentes específicos responsáveis por eles. Embora essa metodologia possa não ser adequada para todas as aplicações, ela é particularmente eficaz quando a IA atua como assistente, permitindo uma triagem mais rápida e delegando a tomada de decisão final aos humanos. Por exemplo, o modelo de consistômetro pode ser usado para avaliar rapidamente os lotes, permitindo que os operadores se concentrem naqueles que exigem análise adicional. Essa abordagem colaborativa aumenta a eficiência e, ao mesmo tempo, garante que o julgamento humano permaneça central nas principais decisões, melhorando, em última análise, a confiabilidade geral do sistema de avaliação da qualidade.