

APLICAÇÃO DE MACHINE LEARNING NA AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DO PROPIONATO DE CÁLCIO EM PÃES

Data de submissão: 09/08/2024

Data de aceite: 01/10/2024

Márcia A, Gularte

Professora, Departamento de Ciência e Tecnologia Agroindustrial/Universidade Federal de Pelotas

Layla D. Macedo

Doutoranda, Departamento de Ciência e Tecnologia Agroindustrial/Universidade Federal de Pelotas

Bianca P, Ávila

Pós-Doutoranda, Departamento de Ciência e Tecnologia Agroindustrial/UFPel

Aline M. Pereira

Doutoranda, Departamento de Ciência e Tecnologia Agroindustrial/Universidade Federal de Pelotas

Roberta Bascke

Doutoranda, Departamento de Ciência e Tecnologia Agroindustrial/Universidade Federal de Pelotas

sem propionato de cálcio, ao longo de 21 dias. Parâmetros de textura, como dureza, elasticidade e gomosidade, foram medidos, e a análise sensorial foi realizada utilizando a escala Just-About-Right (JAR). Os dados foram processados por meio de modelos Random Forest, Regressão Logística e SVM, com valores SHAP aplicados para interpretar o impacto das variáveis nas previsões. Os resultados mostram, que o propionato prolonga a vida útil do pão porém afeta significativamente sua textura. O modelo Random Forest alcançou o melhor equilíbrio entre precisão e recall, demonstrando eficácia na determinação da presença de conservantes. Esses achados sugerem que a combinação da análise sensorial com técnicas de aprendizado de máquina pode ser uma abordagem valiosa na avaliação da qualidade dos alimentos.

PALAVRAS-CHAVE: Alimentos, aprendizado de máquinas, shelf life, sensorial, JAR

RESUMO: Este estudo explora a influência do propionato de cálcio nas propriedades sensoriais e físicas do pão, além de avaliar o uso de modelos de aprendizado de máquina para determinar essa influência. Foram preparadas e analisadas duas formulações de pão, uma com e outra

ABSTRACT: This study explores the influence of calcium propionate on the sensory and physical properties of bread, as well as the use of machine learning models to determine this influence. Two bread formulations, one with and one without

calcium propionate, were prepared and analyzed over a 21-day period. Texture parameters such as hardness, elasticity, and gumminess were measured, and sensory analysis was conducted using the Just-About-Right (JAR) scale. The data were processed using Random Forest, Logistic Regression, and SVM models, with SHAP values applied to interpret the impact of different variables on the predictions. The results show that calcium propionate prolongs the shelf life of bread but significantly affects its texture. The Random Forest model achieved the best balance between precision and recall, demonstrating its effectiveness in determining the presence of preservatives. These findings suggest that combining sensory analysis with machine learning techniques can be a powerful approach in food quality assessment.

INTRODUÇÃO

Os pães são produtos obtidos a partir da farinha de trigo e/ou outras farinhas, adicionados de líquido, resultantes de processos de fermentação ou não, e cocção, podendo conter outros ingredientes, desde que não descaracterizem os produtos (Brasil, 2005). Eles são uma fonte de nutrientes essenciais, incluindo carboidratos, fibras, vitaminas e minerais, e apresentam diversos formatos e formas. Considerado um dos alimentos mais consumidos no mundo, o consumo médio é de 70 kg (41–303 kg)/ano/capita (Dong, 2021). De acordo com a Associação Brasileira das Indústrias de Biscoitos, Massas Alimentícias, Pães e Bolos Industrializados (ABIMAPI), em 2023 houve um crescimento de 12% no consumo de pães em comparação com 2022, resultando em um faturamento de R\$ 125,22 bilhões no Brasil (ABIMAPI, 2024). O pão é uma importante fonte de energia, um reservatório significativo de proteínas, carboidratos complexos (principalmente amido), fibras alimentares, vitaminas (especialmente do complexo B) e minerais, o que o define como um alimento básico e essencial na dieta (Guerrini et al., 2020).

O consumo de pão é amplamente recomendado em todas as diretrizes alimentares, e tanto o pão quanto os produtos à base de cereais formam a base da pirâmide alimentar. No entanto, a característica de “frescor” do pão, que está intimamente ligada à sua qualidade geral, se mantém por um curto período de tempo (Rosell, 2015). Devido às demandas dos consumidores por produtos de qualidade duradoura, os aditivos alimentares, amplamente utilizados na panificação, foram desenvolvidos para melhorar a conservação (Figueiredo; Freitas, 2018). Toda substância adicionada intencionalmente aos alimentos para intensificar, conservar ou modificar suas propriedades, sem provocar alterações nutricionais, é chamada de aditivo (Brasil, 2000).

Apesar da industrialização da produção de pão, os desafios relacionados à sua perecibilidade persistem. O pão tem uma vida útil curta de 4 a 10 dias sem mofo, influenciada por condições de armazenamento e tratamento, além da alta atividade de água, que geralmente é em torno de 0,95 Aw (Cauvain, 2012). Para a utilização de conservantes específicos, é fundamental analisar diversos fatores, como pH, composição, presença de outros inibidores microbiológicos, atividade de água e nível inicial de contaminação

(Carnicel et al., 2005). Por ser um produto bastante perecível, os pães já apresentam variações em suas características logo após serem retirados do forno. Assim, as condições de conservação, estocagem e distribuição estão diretamente ligadas à qualidade final do produto e ao seu tempo de validade (Pereira et al., 2002).

Entre os conservantes, o propionato de cálcio é amplamente utilizado nas indústrias de panificação, pois melhora a eficiência do fermento na liberação de CO₂ e apresenta alta eficácia contra mofos, com ação inibitória predominantemente fungistática e pouco fungicida (Jay, 2005). Diante desse cenário, o objetivo neste estudo foi utilizar técnicas de machine learning para determinar a influência de conservantes em pães nos parâmetros sensoriais e físicos.

MATERIAIS E MÉTODOS

Duas formulações distintas foram utilizadas na elaboração dos pães. O Pão A foi preparado com a adição de propionato de cálcio, utilizando os seguintes ingredientes: 60% de farinha, 32,58% de água, 4,63% de açúcar, 1,44% de fermento biológico, 1,04% de sal e 0,31% de propionato de cálcio. O Pão B, por sua vez, utilizou a mesma formulação, mas sem a adição de propionato de cálcio.

O processo de elaboração dos pães iniciou-se com a adição dos ingredientes secos em uma masseira rápida de 6 kg (G.paniz), misturando-os em baixa velocidade por 20 segundos para homogeneização. Em seguida, a água foi adicionada, e a mistura foi batida novamente por 2 minutos, antes da adição do fermento. O batimento finalizou quando a massa atingiu o “ponto de véu”, após aproximadamente 6 minutos. A massa foi então dividida em 6 porções de 600 gramas cada, que foram colocadas em formas de 22 x 10 x 9 cm. As formas foram colocadas em uma estufa a uma temperatura entre 30 e 35 °C por 1 hora e 5 minutos para a fermentação final. O assamento foi realizado a 150 °C durante 31 minutos.

Para a análise da vida útil, os pães foram armazenados em sacos de polietileno (PE) com 0,04 mm de espessura, fechados com auxílio de amarrilho, durante 21 dias. As coletas foram realizadas nos dias 0, 5, 13 e 21. A análise de textura instrumental (TPA) foi conduzida utilizando um texturômetro (TXT2i, Stable Micro Systems), com interface acoplada ao computador. As curvas de textura foram obtidas em tempo real através do programa Texture Expert for Windows, analisando os parâmetros de dureza, elasticidade e gomosidade.

A análise sensorial foi realizada utilizando a escala JAR (Just-About-Right), classificando os atributos de textura seca e sabor característico. Os dados coletados foram analisados utilizando modelos de regressão logística, floresta aleatória e SVM (machine learning) em linguagem de programação Python. Para interpretar os resultados, foram utilizados os SHAP values (SHapley Additive exPlanations), que auxiliam na compreensão

da contribuição de cada variável de entrada para a previsão do modelo, proporcionando uma medida consistente da importância das características e suas interações.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Tabela 1 estão apresentados os resultados de textura (dureza, elasticidade e gomosidade) dos pães de forma com (pão A) e sem (pão B) propionato de cálcio, durante as coletas de vida útil.

	Tempo (dias)	Dureza (N)	Elasticidade (mm)	Gomosidade (N.s ⁻¹)
Pão A com propionato de cálcio	0	1644,37* ^d	0,944* ^a	694,15 ^d
	5	2508,02 ^c	0,943* ^{ab}	1263,43 ^c
	13	4557,31 ^b	0,912 ^b	1725,67 ^b
	21	5289,63 ^a	0,911 ^b	2669,90 ^a
Pão B sem propionato de cálcio	0	1376,35 ^b	0,936 ^a	1089,47* ^b
	5	3135,24* ^a	0,884 ^b	1957,87* ^a
	13	4325,55 ^a	0,823 ^b	2998,46 ^a
	21	-	-	-

Médias aritméticas simples (n=3). *diferem entre as amostras com e sem propionato, em cada tempo de coleta. Diferentes letras minúsculas na coluna diferem entre si, pelo teste de Tukey ($p \leq 0,05$) para cada amostra durante a vida útil. T0 – coleta dia zero, T5 – coleta dia 5, T13 – coleta dia 13 e T21 – coleta dia 21.

Tabela 1 – Textura dos pães de forma com e sem propionato

Comparando as amostras A e B, em cada tempo da vida útil, todas apresentaram diferença significativa. No tempo zero, o uso do propionato de cálcio proporcionou um aumento na dureza e elasticidade, porém, uma diminuição na gomosidade. Já no tempo 5, o propionato de cálcio proporcionou uma diminuição na dureza e gomosidade e aumento na elasticidade. Na coleta do dia 13, os pães sem propionato de cálcio (B) já apresentaram mofo e, assim, foram interrompidas as análises e finalizado o teste de vida útil para essa amostra.

Tanto para o pão A, quanto para o B, a dureza aumentou durante a vida útil, fato já esperado, pois o aumento da dureza em pães está diretamente associado à perda de umidade, à evaporação da água após a cocção, retrogradação do amido e à desnaturação das proteínas (Esteller et al., 2004). Já para elasticidade, no pão A foram observadas poucas alterações, as mais evidentes foram do tempo 5 para o tempo 13, porém no pão B, houve uma diminuição da elasticidade com o passar dos dias. O mesmo comportamento foi visto por Esteller e Lannes (2005), que associaram a diminuição da elasticidade com as interações moleculares dos componentes, principalmente pontes de hidrogênio, dissulfeto e ligações cruzadas com a participação de íons metálicos e a mobilidade da água na massa. Por fim, para a gomosidade, os dois pães apresentaram o mesmo comportamento,

aumento da gomosidade durante a vida útil. Altos valores de gomosidade, mastigabilidade e dureza fornecem característica de produto velho, dessa forma, tornam-se mais atrativos produtos com baixos valores desses parâmetros.

Na tabela 2 estão apresentados os resultados de três modelos de machine learning na detecção da influência da adição de conservante em pães.

Modelo	Precisão	Recall	F1- Score	Acurácia
Floresta Aleatória	0,84	0,96	0,90	48
Regressão Logística	0,94	0,61	0,74	48
SVM	0,72	0,93	0,81	48

Tabela 2 – Resultados dos modelos de machine learning

O modelo de Floresta Aleatória obteve uma precisão de 0,84, um recall de 0,96 e um F1-Score de 0,90, destacando-se pelo alto recall, que indica sua eficácia em mostrar a influência dos conservantes quando presentes, juntamente com uma precisão razoável e um bom equilíbrio entre precisão e recall,

No gráfico representativo do modelo de Floresta Aleatória (Figura 1), observou-se que “Dureza” e “Elasticidade” apresentaram valores SHAP significativos, indicando que essas características têm um impacto considerável nas previsões do modelo, “Sabor característico” e “Textura seca” também influenciam, mas em menor grau. O desempenho deste modelo se mostra interessante, especialmente considerando a importância das características dureza e elasticidade influenciados pelo uso de conservantes.

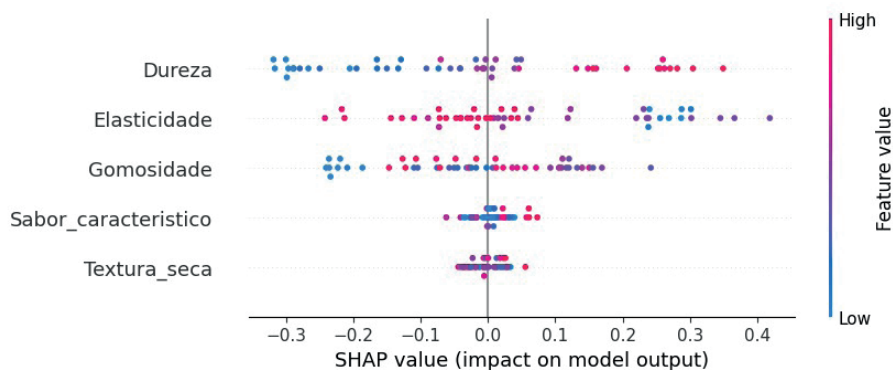


Figura 1. Gráfico Shap value representativo dos resultados utilizando o modelo Floresta aleatória.

Os pontos no gráfico representam os valores SHAP para cada observação do conjunto de dados, com cores indicando o valor da característica: azul para valores baixos e vermelho para valores altos. Observa-se que altas durezas (pontos vermelhos) tendem a aumentar a predição do modelo, sugerindo a provável presença de conservantes. Em contrapartida, valores altos de gomosidade (pontos vermelhos) pode ser um indicador de

ausência de conservantes. Os atributos sabor característico, textura seca e elasticidade mostraram variações menores e menos impacto na construção do modelo, com valores tendendo a se concentrar próximos ao zero.

O modelo de Regressão Logística apresentou a maior precisão (0,94), mas com um recall mais baixo (0,61), resultando em um F1-Score de 0,74 e a mesma precisão de 48. Embora seja altamente preciso na previsão da presença de conservantes, ele tende a não detectar alguns casos em que os conservantes estão presentes. O gráfico do modelo de Regressão Logística (Figura 2) indica que «Dureza» e «Gomosidade» são as características com os valores SHAP mais altos, evidenciando seu impacto significativo no modelo, “Sabor característico” e “Elasticidade” mostraram impactos menores.

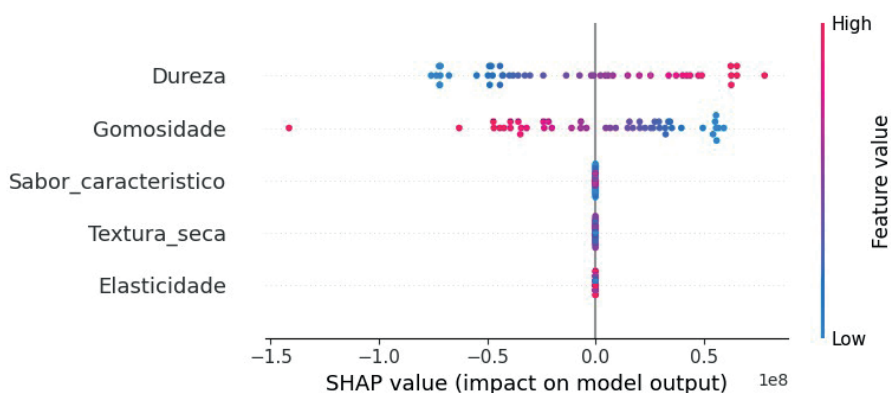


Figura 2. Gráfico Shap value representativo dos resultados utilizando o modelo Regressão Logística.

A disposição dos valores SHAP é semelhante ao gráfico do modelo de Floresta Aleatória, mas com uma faixa menor. A dureza continua a ser um fator importante, com valores altos correlacionados a uma presença de conservantes. A gomosidade mantém a tendência de que valores altos diminuam a predição, a elasticidade, textura seca e sabor característico novamente demonstraram menor influência na predição.

O modelo SVM obteve uma precisão de 0,72, um recall de 0,93 e um F1-Score de 0,81, sendo a precisão mais baixa entre os três modelos, mas ainda apresentando um bom equilíbrio entre precisão e recall, O gráfico do modelo SVM (Figura 3) reafirma que «Dureza» e «Gomosidade» são características com maior impacto nos valores SHAP, “Elasticidade” e “Textura seca” também são relevantes, mas com menor impacto.

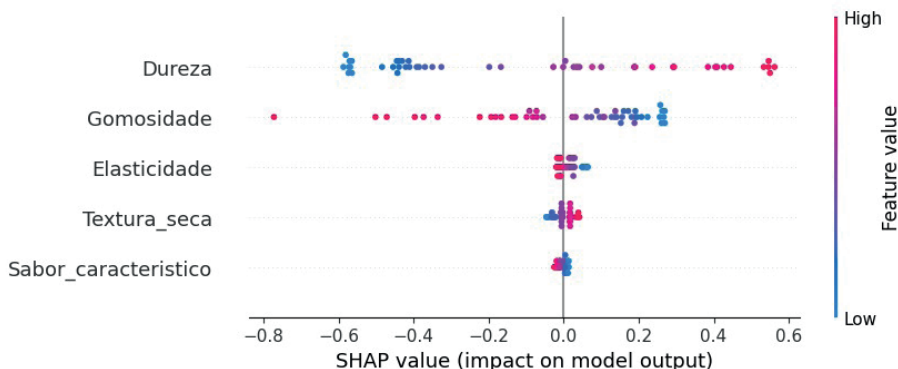


Figura 3. Gráfico Shap value representativo dos resultados utilizando o modelo SVM.

A Figura 3 confirma as tendências observadas nos gráficos anteriores, mostrando que valores altos de dureza (pontos vermelhos) consistentemente aumentam a predição de conservantes. A elasticidade começa a mostrar uma leve influência negativa na predição, embora menor que a dureza e gomosidade, valores altos de gomosidade continuam a diminuir a predição, enquanto sabor característico e textura seca permanecem com baixa variação e impacto no modelo.

Os três modelos apresentam diferentes balanços entre precisão e recall, refletindo como as características influenciam suas previsões. Conforme os valores SHAP, o modelo de Floresta Aleatória, com alto recall e bom F1-Score, parece ser o mais equilibrado, com dureza e elasticidade como principais contribuintes. A Regressão Logística, com maior precisão, depende fortemente de dureza e gomosidade, mas não detecta todos os casos, o que é indicado pelo menor recall. O SVM, com bom recall, também destaca dureza e gomosidade, mas apresenta menor precisão, sugerindo uma maior propensão a falsos positivos.

A análise dos gráficos de SHAP revela que dureza e gomosidade são os atributos de textura mais influentes na predição da presença de conservantes em pães. A alta dureza está associada a uma maior probabilidade de presença de conservantes, enquanto a alta gomosidade tende a indicar ausência de conservantes. Os atributos elasticidade, sabor característico e textura seca têm menor impacto na construção dos modelos, sugerindo que não são características que influenciam na qualidade de pães com a presença ou ausência de conservantes. Esses resultados podem orientar a seleção de características mais relevantes para futuros modelos de machine learning focados na detecção de conservantes em produtos alimentícios e os parâmetros físico-químicos ou sensoriais influenciados pela sua adição.

CONCLUSÃO

Com os resultados obtidos, concluímos que a aplicação de propionato de cálcio nos pães não apenas prolonga a vida útil do produto, mas também influencia nas suas características sensoriais, como dureza e elasticidade. Além disso, a análise de machine learning, especialmente através do modelo de Floresta Aleatória, mostrou-se eficaz na detecção da influência da presença de conservantes, na dureza e gomosidade sendo parâmetros significativos nas previsões. Portanto, os dados confirmam que o uso de conservantes pode melhorar a conservação do pão, atendendo às demandas do consumidor por produtos de qualidade e segurança alimentar, no entanto, podem influenciar em parâmetros importantes para o consumidor como a textura. O estudo também indica que a combinação de técnicas sensoriais e algoritmos de machine learning pode ser uma ferramenta valiosa para ser aplicada na indústria alimentícia.

REFERÊNCIAS

ABIMAPI - Associação Brasileira da Indústria de Panificação, Indicadores da Panificação e Confeitaria Brasileira em 2020, Disponível em: [\[CrossRef\]](#), Acesso em: 07 ago, 2024,

BRASIL, Agência Nacional de Vigilância Sanitária, Resolução nº, 90, de 18 de outubro de 2000, Aprova o Regulamento Técnico para Fixação de Identidade e Qualidade de Pão, Diário Oficial da União: seção 1, Brasília, DF, p, 29, 20 out, 2000, [\[CrossRef\]](#)

BRASIL, Resolução de Diretoria Colegiada - RDC no 263, de 22 de setembro de 2005, Aprova o Regulamento Técnico para produtos de Cereais, Amidos, Farinhas e Farelos, Diário Oficial da União: seção 1, Brasília, DF, p, 368, 23 set, 2005.[\[CrossRef\]](#)

CARNICEL, F, A.; PERESI, J, T, M.; COELHO, A, R.; GONÇALVES, T, M, V.; HOFFMANN, F, L, Avaliação da ação antimicrobiana in vitro de propionato de cálcio sobre leveduras isoladas de ricota, Higiene Alimentar, São Paulo, v,19, p, 76-81, mar, 2005.[\[CrossRef\]](#)

Cauvain SP, editor, Breadmaking: improving quality, Elsevier; 2012 Apr 25.[\[CrossRef\]](#)

Dong, Y., & Karboune, S, A review of bread qualities and current strategies for bread bioprotection: Flavor, sensory, rheological, and textural attributes, Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, v, 20, n, 2, p, 1937-1981, 2021.[\[CrossRef\]](#)

ESTELLER, M, S.; AMARAL, R, L.; LANNES, S, C, S, Effect of sugar and fat replacers and the texture of braked goods, Journal of Texture Studies, USA, v, 35, n, 4, p, 383-393, 2004, [\[CrossRef\]](#)

ESTELLER, M, S.; LANNES, S, C, da S, Parâmetros complementares para fixação de identidade e qualidade de produtos panificados, Ciência e Tecnologia de Alimentos, v, 25, n, 4, p, 802-806, 2005, [\[CrossRef\]](#)

FIGUEIREDO, P.; FREITAS, A, C. Conservação dos alimentos, Lisboa: Editora da Universidade Nova de Lisboa, 2000, 201 p

Jay, James M, Microbiologia de alimentos, Vol, 6, Porto Alegre: Artmed, 2005,

Guerrini, L., Napoli, M., Mancini, M., Masella, P., Cappelli, A., Parenti, A., & Orlandini, S, Wheat grain composition, dough rheology and bread quality as affected by nitrogen and sulfur fertilization and seeding density, *Agronomy*, 2020 Feb 5;10(2):233, **[CrossRef]**

Smith, J, P., Daifas, D, P., El-Khoury, W., Koukoutsis, J., & El-Khoury, A, Shelf life and safety concerns of bakery products—a review, *Critical reviews in food science and nutrition*, v, 44, n, 1, p, 19-55, 2004, **[CrossRef]**

Rosell CM, Bajerska J, El Sheikha AF, editors, *Bread and its fortification: nutrition and health benefits*, CRC Press; 2015 Sep 22, **[CrossRef]**