Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"
Pós-Graduação em Estística e Experimentação Agropecuária

VIII ENCONTRO DOS ALUNOS

SELEÇÃO DE FORMULAÇÕES DE BEBIDAS PREBIÓTICAS

via Modelos Logitos Cumulativos Mistos

Janaina Marques e Melo

janainamem@usp.br

Idemauro Antonio Rodrigues de Lara (LCE/ESAQ/SP) Sílvia Maria de Freitas (DEX/UFC)

Piracicaba - SP, 21 novembro de 2018

ÍNDICE



Introdução

Definição do Problema Objetivo

Desenvolvimento

Análise Sensorial Análise de Correspondência Simples - ACS Modelos Logitos Cumulativos

Material e Método

Resultados Experimentais

Conclusão

Trabalho Futuro

Referências



- Na área de Ciência e Tecnologia de Alimentos são desenvolvidos novos produtos.
- ▶ Produto é avaliador por meio de uma análise sensorial.
 - É considerada uma análise subjetiva, uma vez que depende do julgamento de humanos por meio dos órgãos do sentido.
- ► Na análise sensorial, os atributos sensoriais são variáveis qualitativas (politómicas ordinais).



Objetivo

Fazer uma análise estatística exploratória e confirmatória para verificar associações entre formulações de bebidas e o atributo sensorial de impressão global.

- ► Análise de Correspondência;
- ► Modelos Logitos Cumulativos Misto.

Análise Sensorial





Análise Sensorial





Análise Sensorial





Análise Sensorial





Análise Sensorial





Análise Sensorial





Análise Sensorial



Análise Sensorial é uma ciência que utiliza os sentidos humanos (visão, olfato, paladar, tato, e audição), para avaliar as características ou atributos de um produto.

Equipes sensoriais nas indústrias;



Análise Sensorial



- Equipes sensoriais nas indústrias;
- Análise do efeito da embalagem;



Análise Sensorial



- Equipes sensoriais nas indústrias;
- ► Análise do efeito da embalagem;
- ▶ Monitoramento;



Análise Sensorial



- Equipes sensoriais nas indústrias;
- Análise do efeito da embalagem;
- Monitoramento;
- ▶ Melhoramento;



Análise Sensorial



- Equipes sensoriais nas indústrias;
- Análise do efeito da embalagem;
- Monitoramento;
- ▶ Melhoramento;
- Lançamento de novos produtos no mercado.



Análise de Correspondência Simples





Análise de Correspondência

permite visualizar graficamente o grau de associação entre duas variáveis, por meio de tabelas de contingência de dupla e múltipla entradas.

Tabela 1: Tabela de contingência

| ., ., | | Va | ariáve | l colur | na | | |
|----------------|-----------------|-----------------|--------|----------|-----|----------|----------|
| Variável linha | 1 | 2 | | j | | С | Totais |
| 1 | n ₁₁ | n ₁₂ | | n_{1j} | | n_{1c} | n_{1+} |
| 2 | n_{21} | n_{22} | | n_{2j} | | n_{2c} | n_{2+} |
| : | : | : | ٠., | : | ٠., | : | : |
| i | n_{i1} | n_{i2} | | n_{ij} | | n_{ic} | n_{i+} |
| : | ÷ | ÷ | ٠., | : | ٠., | : | : |
| r | n_{r1} | n_{r2} | | n_{rj} | | n_{rc} | n_{r+} |
| Totais | n_{+1} | n_{+2} | | n_{+j} | | n_{+c} | n |



A variável resposta é qualitativa politómica ordinal com c categorias, Y, e x o vetor de covariáveis que definem as seguintes quantidades,

em que θ_i é a probabilidade acumulada na j-ésima categoria.

Desenvolvimento Modelos Logitos Cumulativos



Os logitos das probabilidades acumuladas são definidos como

$$g(\mathbf{x}) = \mathsf{logito}[\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})] = \mathsf{ln}\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \mathsf{ln}\left[\frac{\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}{1 - \mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}\right],$$

em que, x é um vetor de valores de p covariáveis e $j = 1, 2, \dots, c-1$.



Os logitos das probabilidades acumuladas são definidos como

$$g(\mathbf{x}) = \mathsf{logito}[\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})] = \mathsf{ln}\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \mathsf{ln}\left[\frac{\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}{1 - \mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}\right],$$

em que, x é um vetor de valores de p covariáveis e $j = 1, 2, \dots, c-1$.

Os modelos logitos cumulativos são subdivididos em três:



Os logitos das probabilidades acumuladas são definidos como

$$g(\mathbf{x}) = \operatorname{logito}[\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})] = \operatorname{ln}\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \operatorname{ln}\left[\frac{\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}{1 - \mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}\right],$$

em que, x é um vetor de valores de p covariáveis e $j = 1, 2, \dots, c-1$.

Os modelos logitos cumulativos são subdivididos em três:

a) com chances não proporcionais,

7

Os logitos das probabilidades acumuladas são definidos como

$$g(\mathbf{x}) = \operatorname{logito}[\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})] = \operatorname{ln}\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \operatorname{ln}\left[\frac{\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}{1 - \mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x})}\right],$$

em que, x é um vetor de valores de p covariáveis e $j = 1, 2, \dots, c-1$.

Os modelos logitos cumulativos são subdivididos em três:

- a) com chances não proporcionais,
- b) com chances proporcionais e

7

Os logitos das probabilidades acumuladas são definidos como

$$g(\mathbf{x}) = \operatorname{logito}[\mathbb{P}(Y \leq j \mid \mathbf{x})] = \operatorname{ln}\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \operatorname{ln}\left[\frac{\mathbb{P}(Y \leq j \mid \mathbf{x})}{1 - \mathbb{P}(Y \leq j \mid \mathbf{x})}\right],$$

em que, x é um vetor de valores de p covariáveis e $j = 1, 2, \dots, c-1$.

Os modelos logitos cumulativos são subdivididos em três:

- a) com chances não proporcionais,
- b) com chances proporcionais e
- c) com chances proporcionais parciais.

Modelos Logitos Cumulativos com Chances Proporcionais Misto



Modelo

$$g(\mathbf{x}) = \text{logito}[\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x}, \mathbf{u})] = \ln\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \alpha_j + \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \mathbf{u}^\top \mathbf{z}$$

Modelos Logitos Cumulativos com Chances Proporcionais Misto



Modelo

$$g(\mathbf{x}) = \text{logito}[\mathbb{P}(Y \le j \mid \mathbf{x}, \mathbf{u})] = \ln\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \alpha_j + \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \mathbf{u}^\top \mathbf{z}$$

Probabilidade cumulada

$$\theta_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \frac{\exp\left(\alpha_j + \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \mathbf{u}^\top \mathbf{z}\right)}{1 + \exp\left(\alpha_j + \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \mathbf{u}^\top \mathbf{z}\right)}$$

Modelos Logitos Cumulativos com Chances Proporcionais Misto



Modelo

$$g(\mathbf{x}) = \text{logito}[\mathbb{P}(\mathbf{Y} \le j \mid \mathbf{x}, \mathbf{u})] = \ln\left[\frac{\theta_j(\mathbf{x})}{1 - \theta_j(\mathbf{x})}\right] = \alpha_j + \boldsymbol{\beta}^{\top} \mathbf{x} + \mathbf{u}^{\top} \mathbf{z}$$

Probabilidade cumulada

$$\theta_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \frac{\exp\left(\alpha_j + \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \mathbf{u}^\top \mathbf{z}\right)}{1 + \exp\left(\alpha_j + \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{x} + \mathbf{u}^\top \mathbf{z}\right)}$$

Estimação dos parâmetros

$$L = \prod_{i=1}^{n} \left\{ \prod_{j=1}^{c} [\pi_j(\mathbf{x}_i)]^{y_{ij}} \right\} = \prod_{i=1}^{n} \left\{ \prod_{j=1}^{c} [\theta_j(\mathbf{x}_i) - \theta_{j-1}(\mathbf{x}_i)]^{y_{ij}} \right\},$$

Material e Método

Informações sobre o banco de dados



Os dados provêm de um estudo desenvolvido pela Universidade Federal do Ceará.

Objetivo

Desenvolver bebidas prebióticas à base de amêndoa da castanha de caju adicionada ao suco de uva.

Foi avaliada a aceitação do atributo sensorial de impressão global.

Utilizou-se, uma escala hedônica estruturada mista de 9 pontos.

Material e Método

Desenvolvimento das formulações de bebidas

As formulações foram feitas por meio de um fatorial 2² de um delineamento composto central rotacional, com 5 repetições no ponto central.

Tabela 2: Formulações de bebidas (valores reais e codificados)

| | Valor | es reais | Valores codificados | | |
|----------------------|--------------------|----------|---------------------|--------|--|
| Formulação de bebida | Suco (%) Açúcar (% | | Suco | Açúcar | |
| F ₁ | 20 | 4 | -1 | -1 | |
| F_2 | 20 | 8 | -1 | +1 | |
| F_3 | 40 | 4 | +1 | -1 | |
| F_4 | 40 | 8 | +1 | +1 | |
| F ₅ | 16 | 6 | -1,41 | 0 | |
| F ₆ | 44 | 6 | +1,41 | 0 | |
| F ₇ | 30 | 3 | 0 | -1,41 | |
| F ₈ | 30 | 9 | 0 | +1,41 | |
| F ₉ (PC) | 30 | 6 | 0 | 0 | |
| F ₁₀ (PC) | 30 | 6 | 0 | 0 | |
| F ₁₁ (PC) | 30 | 6 | 0 | 0 | |
| F_{12} (PC) | 30 | 6 | 0 | 0 | |
| F ₁₃ (PC) | 30 | 6 | 0 | 0 | |

PC: Ponto central



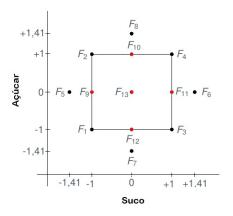


Figura 1: Formulação de bebida por meio do composto central

Material e Método Cenário da pesquisa



A avaliação da aceitação do atributo sensorial das formulações de bebidas (F_1 à F_{13}), foram realizadas em diferentes sessões.

Material e Método

Cenário da pesquisa



A avaliação da aceitação do atributo sensorial das formulações de bebidas (F_1 à F_{13}), foram realizadas em diferentes sessões.

Participaram 130 julgadores não treinados, de ambos os sexos e de diferentes faixas etárias.

Material e Método Cenário da pesquisa



A avaliação da aceitação do atributo sensorial das formulações de bebidas (F_1 à F_{13}), foram realizadas em diferentes sessões.

Participaram 130 julgadores não treinados, de ambos os sexos e de diferentes faixas etárias.

As amostras foram servidas de forma monádica sequencial, seguindo um delineamento de blocos incompletos balanceados.

Material e Método Cenário da pesquisa



A avaliação da aceitação do atributo sensorial das formulações de bebidas (F_1 à F_{13}), foram realizadas em diferentes sessões.

Participaram 130 julgadores não treinados, de ambos os sexos e de diferentes faixas etárias.

As amostras foram servidas de forma monádica sequencial, seguindo um delineamento de blocos incompletos balanceados.

Cada provador avaliou 4 das 13 formulações de bebidas propostas.

Material e Método Croqui do delineamento em estudo





Figura 2: Croqui do delineamento em BIB com 130 provadores e 13 formulações de bebidas

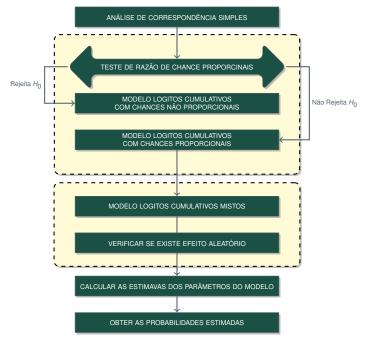


Figura 3: Fluxograma da análise estatística

Resultados Experimentais

Análise Exploratória



Tabela 3: Frequências observadas de formulação de bebida com impressão global

| Formulação | Impressão Global | | | | | | | | Total | |
|-----------------|------------------|----|----|----|----|----|-----|----|-------|-------|
| de bebida | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | lotai |
| F ₁ | 2 | 8 | 4 | 8 | 6 | 8 | 2 | 1 | 1 | 40 |
| F_2 | 1 | 2 | 4 | 10 | 5 | 5 | 6 | 5 | 2 | 40 |
| F_3 | 2 | 2 | 1 | 7 | 3 | 8 | 9 | 6 | 2 | 40 |
| F_4 | 1 | 3 | 2 | 2 | 6 | 12 | 7 | 6 | 1 | 40 |
| F_5 | 5 | 4 | 3 | 8 | 4 | 4 | 9 | 3 | 0 | 40 |
| F_6 | 3 | 1 | 4 | 5 | 3 | 9 | 7 | 3 | 5 | 40 |
| F_7 | 2 | 10 | 4 | 10 | 7 | 3 | 1 | 3 | 0 | 40 |
| F ₈ | 2 | 4 | 4 | 5 | 4 | 9 | 7 | 2 | 3 | 40 |
| F ₉ | 0 | 1 | 3 | 10 | 4 | 5 | 13 | 3 | 1 | 40 |
| F ₁₀ | 0 | 0 | 3 | 10 | 5 | 8 | 9 | 3 | 2 | 40 |
| F ₁₁ | 0 | 3 | 1 | 5 | 4 | 11 | 8 | 3 | 5 | 40 |
| F ₁₂ | 0 | 1 | 3 | 6 | 5 | 6 | 15 | 4 | 0 | 40 |
| F ₁₃ | 2 | 2 | 1 | 6 | 3 | 9 | 7 | 7 | 3 | 40 |
| Total | 20 | 41 | 37 | 92 | 59 | 97 | 100 | 49 | 25 | 520 |

Resultados Experimentais Análise de Correspondência Simples - ACS

16

Tabela 4: Inércias (autovalores) de formulação de bebida com impressão global

| Dimensão | Valor | % | Acumulada (%) |
|----------|-------|-------|---------------|
| 1 | 0,11 | 44,56 | 44,56 |
| 2 | 0,05 | 22,36 | 66,92 |
| 3 | 0,03 | 11,80 | 78,72 |
| 4 | 0,03 | 10,04 | 88,76 |
| 5 | 0,02 | 6,51 | 95,27 |
| 6 | 0,01 | 3,05 | 98,32 |
| 7 | 0,00 | 1,40 | 99,72 |
| 8 | 0,00 | 0,28 | 100,00 |
| Total | 0,25 | | |
| | | | |



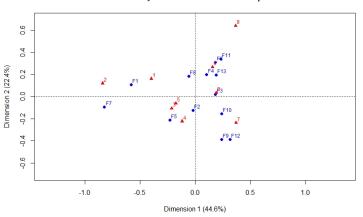


Figura 4: Análise de correspondência simples de formulação de bebida versos atributo sensorial de impressão global



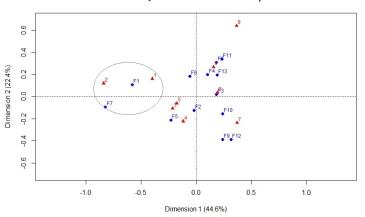


Figura 4: Análise de correspondência simples de formulação de bebida versos atributo sensorial de impressão global



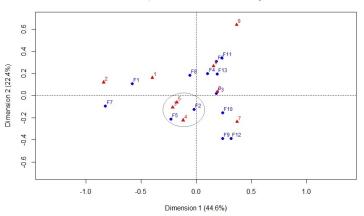


Figura 4: Análise de correspondência simples de formulação de bebida versos atributo sensorial de impressão global



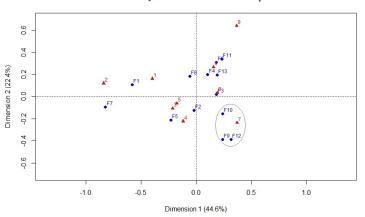


Figura 4: Análise de correspondência simples de formulação de bebida versos atributo sensorial de impressão global



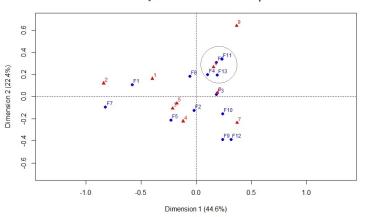


Figura 4: Análise de correspondência simples de formulação de bebida versos atributo sensorial de impressão global



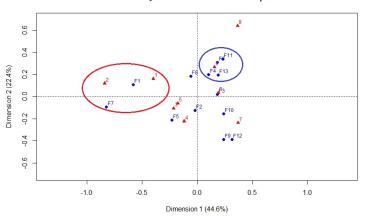


Figura 4: Análise de correspondência simples de formulação de bebida versos atributo sensorial de impressão global

Teste de Verossimilhança para razão de chances proporcionais



As hipóteses para o teste de razão de chances proporcionais são

 $\begin{cases} H_0: \beta_j = \beta, \text{ ou seja}, \text{ utiliza se o MLC com chances proporcionais,} \\ H_1: \beta_j \neq \beta, \text{ ou seja, utiliza se o MLC com chances não proporcionais.} \end{cases}$

O p-valor para o teste de razão de chances proporcionais foi de 0,57.







Verificando a existência de efeito aleatório



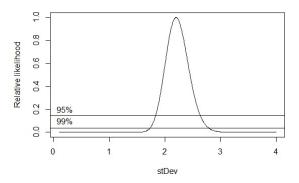


Figura 5: Verossimilhança perfilada de $\hat{\sigma}_u$

A estimativa $\hat{\sigma}_u$ foi 2,20 e que os intervalos de 95% de confiança para $\hat{\sigma}_u$ (1,84 e 2,64) não contém o valor zero, indicando a existência de efeito aleatório.

Modelo Logitos Cumulativos com Chances Proporcionais Mistos



Modelo logitos cumulativos com chances proporcionais mistos é dado por

$$g(\mathbf{x}) = \operatorname{logito}(\mathbb{P}(Y_i \leq j)) = \operatorname{ln}\left[\frac{\mathbb{P}(Y \leq j \mid \mathbf{x})}{\mathbb{P}(Y > j \mid \mathbf{x})}\right] = \alpha_j + \beta(Bebida_i) + \mathbf{u}(Provador_k),$$

em que,

 α_j o intercepto no j-ésimo logito da impressão global,

 $\boldsymbol{\beta}=(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_{13})$ parâmetros de regressão associado as bebidas,

 \boldsymbol{u} é o efeito aleatório de provador, com $\boldsymbol{u} \sim N(0, \sigma_u^2)$.

Estimativas dos Parâmetros

Tabela 5: Estimativas dos parâmetros, erros padrões e estatística do teste

| Parâmetro | Estimativa | Erro padrão | Z_{cal} | p-valor | |
|--------------|------------|-------------|-----------|---------|--|
| Interceptos | | | | | |
| α_2 | -3,544 | 0,468 | -7,567 | < 0,001 | |
| α_3 | -1,712 | 0,402 | -4,264 | < 0,001 | |
| α_4 | -0,756 | 0,392 | -1,928 | 0,053 | |
| α_5 | 0,815 | 0,391 | 2,085 | 0,037 | |
| α_6 | 1,641 | 0,396 | 4,147 | < 0,001 | |
| α_7 | 3,009 | 0,415 | 7,259 | < 0,001 | |
| α_8 | 4,793 | 0,451 | 10,630 | < 0,001 | |
| α 9 | 6,537 | 0,514 | 12,722 | < 0,001 | |
| Covariável | | | | | |
| β_2 | 1,091 | 0,451 | 2,421 | 0,015 | |
| β_3 | 1,689 | 0,460 | 3,669 | < 0,001 | |
| β_4 | 2,855 | 0,483 | 5,917 | < 0,001 | |
| β_5 | 0,715 | 0,459 | 1,557 | 0,119 | |
| eta_6 | 2,881 | 0,484 | 5,954 | < 0,001 | |
| β_7 | 0,382 | 0,462 | 0,827 | 0,408 | |
| β_8 | 2,046 | 0,469 | 4,366 | < 0,001 | |
| β_9 | 2,264 | 0,460 | 4,924 | < 0,001 | |
| β_{10} | 1,924 | 0,456 | 4,224 | < 0,001 | |
| β_{11} | 2,102 | 0,457 | 4,604 | < 0,001 | |
| β_{12} | 2,374 | 0,466 | 5,100 | < 0,001 | |
| eta_{13} | 2,534 | 0,472 | 5,365 | < 0,001 | |

Resultados Experimentais Probabilidades Estimadas



Tabela 6: Probabilidades estimadas de formulação de bebida com impressão global

| | | | | Impr | assãn G | lohal | | | | |
|-----------------------|------------------------------|-------|-------|-------|---------|-------|-------|-------|-----------------------|-----------|
| Formulação | ormulação Impressão Global | | | | | | | | $\mathbb{P}(Y_i > 6)$ | |
| de bebida | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | (.,, > 0) |
| F ₁ | 0,028 | 0,125 | 0,167 | 0,374 | 0,144 | 0,115 | 0,039 | 0,007 | 0,001 | 0,162 |
| F_2 | 0,010 | 0,047 | 0,079 | 0,295 | 0,203 | 0,238 | 0,104 | 0,020 | 0,004 | 0,366 |
| F_3 | 0,005 | 0,026 | 0,048 | 0,215 | 0,194 | 0,301 | 0,168 | 0,035 | 0,008 | 0,512 |
| F_4 | 0,002 | 0,008 | 0,016 | 0,089 | 0,114 | 0,309 | 0,336 | 0,101 | 0,025 | 0,771 |
| <i>F</i> ₅ | 0,014 | 0,068 | 0,107 | 0,339 | 0,191 | 0,192 | 0,075 | 0,014 | 0,000 | 0,281 |
| F_6 | 0,002 | 0,007 | 0,016 | 0,087 | 0,112 | 0,308 | 0,339 | 0,104 | 0,025 | 0,776 |
| F ₇ | 0,019 | 0,091 | 0,134 | 0,365 | 0,172 | 0,154 | 0,055 | 0,010 | 0,000 | 0,219 |
| F_8 | 0,004 | 0,019 | 0,034 | 0,169 | 0,174 | 0,324 | 0,216 | 0,049 | 0,011 | 0,600 |
| F_9 | 0,000 | 0,016 | 0,029 | 0,145 | 0,159 | 0,329 | 0,248 | 0,060 | 0,014 | 0,651 |
| F ₁₀ | 0,000 | 0,000 | 0,038 | 0,184 | 0,182 | 0,318 | 0,199 | 0,044 | 0,010 | 0,571 |
| F ₁₁ | 0,000 | 0,019 | 0,034 | 0,163 | 0,170 | 0,326 | 0,224 | 0,052 | 0,012 | 0,614 |
| F ₁₂ | 0,000 | 0,014 | 0,025 | 0,132 | 0,151 | 0,329 | 0,265 | 0,066 | 0,000 | 0,660 |
| F ₁₃ | 0,002 | 0,012 | 0,022 | 0,116 | 0,138 | 0,326 | 0,289 | 0,077 | 0,018 | 0,710 |



Esse trabalho mostrou uma breve abordagem estatística para análise de dados categorizados ordinais.



Esse trabalho mostrou uma breve abordagem estatística para análise de dados categorizados ordinais.

Com uma aplicação aos modelos logitos cumulativos mistos.



Esse trabalho mostrou uma breve abordagem estatística para análise de dados categorizados ordinais.

Com uma aplicação aos modelos logitos cumulativos mistos.

Esses modelos são recomendados para o ajuste de dados na área análise sensorial.



Esse trabalho mostrou uma breve abordagem estatística para análise de dados categorizados ordinais.

Com uma aplicação aos modelos logitos cumulativos mistos.

Esses modelos são recomendados para o ajuste de dados na área análise sensorial.

Esta análise é feita antes do produto ser comercializado, evitando prejuízos e desperdícios.



Esse trabalho mostrou uma breve abordagem estatística para análise de dados categorizados ordinais.

Com uma aplicação aos modelos logitos cumulativos mistos.

Esses modelos são recomendados para o ajuste de dados na área análise sensorial.

Esta análise é feita antes do produto ser comercializado, evitando prejuízos e desperdícios.

Por meio do modelo foi possível inferir que as formulações de bebidas F_4 , F_6 e F_{13} foram as mais apreciado pelos julgadores.

Trabalho Futuro



▶ Propor um modelo para análise conjunta de todos os atributos (técnica multivariada) e

Trabalho Futuro



- ► Propor um modelo para análise conjunta de todos os atributos (técnica multivariada) e
- Apresentar estratégias para análise de resíduos e diagnósticos.

Referências



- [1] Bento, R. de A.; Andrade, S. A. C.; Silva, A. M. A. D. Análise sensorial de alimentos. 2013.
- [2] Agresti, A. Analysis of ordinal categorical data. John Wiley & Sons vol. 656, 2010.
- [3] Rebouças, M. C. Bebida prebiótica à base de amêndoa. Tese. Universidade Federal do Ceará. 2016.

