

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALFENAS

MARCOS VILELA GARCIA

**MODELO MULTINOMIAL, INFERÊNCIA MULTIMODELO E VALIDAÇÃO
CRUZADA: UMA APLICAÇÃO.**

Alfenas – MG

2022

MARCOS VILELA GARCIA

**MODELO MULTINOMIAL, INFERÊNCIA MULTIMODELO E VALIDAÇÃO
CRUZADA: UMA APLICAÇÃO.**

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Estatística Aplicada e Biometria pela Universidade Federal de Alfenas. Área de concentração: Modelagem Estatística.

Orientador: Prof. Dr. Davi Butturi-Gomes.

Coorientador: Prof. Dr. Eric Batista Ferreira

Alfenas – MG

2022

Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal de Alfenas
Biblioteca Central

Garcia, Marcos Vilela.

Modelo multinomial, inferência multimodelo e validação cruzada: uma aplicação / Marcos Vilela Garcia. - Alfenas, MG, 2022.

52 f. : il. -

Orientador(a): Davi Butturi Gomes.

Dissertação (Mestrado em Estatística Aplicada e Biometria) -
Universidade Federal de Alfenas, Alfenas, MG, 2022.

Bibliografia.

1. Análise de dados categóricos. 2. Análise Sensorial. 3. Razão de chances proporcionais. 4. Método holdout. 5. Regressão logística. I. Gomes, Davi Butturi, orient. II. Título.

MARCOS VILELA GARCIA

MODELO MULTINOMIAL, INFERÊNCIA MULTIMODELO E VALIDAÇÃO CRUZADA: UMA APLICAÇÃO

A Banca examinadora abaixo-assinada aprova a Dissertação apresentada como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Estatística Aplicada e Biometria pela Universidade Federal de Alfenas. Área de concentração: Estatística Aplicada e Biometria.

Aprovada em: 12 de maio de 2022.

Prof. Dr. Davi Butturi Gomes

Instituição: Universidade Federal de São João del-Rei - UFSJ

Profa. Dra. Izabela Regina Cardoso de Oliveira

Instituição: Universidade Federal de Lavras - UFLA

Profa. Dra. Andréa Cristiane dos Santos Delfino

Instituição: Universidade Federal de São João del-Rei - UFSJ

Prof. Dr. Eric Batista Ferreira

Instituição: Universidade Federal de Alfenas - UNIFAL-MG



Documento assinado eletronicamente por **Eric Batista Ferreira, Presidente**, em 12/05/2022, às 16:20, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Davi Butturi Gomes, Usuário Externo**, em 12/05/2022, às 17:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Andréa Cristiane dos Santos Delfino, Usuário Externo**, em 12/05/2022, às 19:05, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Izabela Regina Cardoso de Oliveira, Usuário Externo**, em 13/05/2022, às 08:43, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.unifal-mg.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0727875** e o código CRC **6D337EE4**.

À minha mãe Eunice Vilela Garcia e ao meu
filho Felipe de Sales Garcia, as mais puras
demonstrações de amor.

AGRADECIMENTOS

Começo agradecendo à Renata Ribeiro pelo primeiro contato com a secretária do curso e também uma das melhores pessoas que conheci na Unifal, Martha Priscila Azevedo.

Ao professor que mais inspirou a gente a ser professor, Fabrício Goecking Avelar. À professora Natália, que mesmo com a matéria mais difícil, conduzia com um sorriso e motivação e também aos professores, ao Eric, por me ajudar a superar o medo das matérias difíceis, Luiz Alberto Beijo e Juliana pela paciência. Ao professor que além de me mostrar o melhor caminho para a ciência e derrubar medos de assuntos complexos, me ensinou que sempre podemos evoluir para a melhora, meu orientador Davi Butturi Gomes.

Agradeço ao meu tio Francisco de Assis Vilela, aos meus irmãos Márcio, Hélio, Élcio, Rosana, João Paulo, Janaína, Marcelo, Francis. Aos cunhados Silvéria, Ana Paula, Idelma e Sidney (Coquinho). Às minhas sobrinhas Luana, Thamiris, Maria Laura, Maria Clara, Maria Cecília por toda parceria e cumplicidade. Também aos afilhados: Bárbara, Rafael, Lucas e Amanda pelos sorrisos e boas energias.

Ao meu melhor amigo em Alfenas Vinícius Barbosa da Silveira, parceiro de IBGE, que sempre esteve comigo nas empreitadas, festas e no desafio de começar o mestrado. Também aos meus amigos que direta ou indiretamente estiveram comigo nessa caminhada: Adilson, Felype, Alfredo, Amanda, Júlio, Daniel, Leandro, Júlio César, Rodrigo, Levi, Marcel, Lorryne, Michel, Eliane (Lili), Glayton (Pepino), Luis Otávio, Diego (Terê), João Paulo (padrinho), Ricardo Patrick. Aos amigos do IBGE: Camilla, Jean, Thiago, Lara, Claudiana e Jéter. À banda Sbyghnafree e amigos pela trilha sonora que embalam esses momentos da minha vida.

Aos amigos da melhor escola estadual de Alfenas, Dr. Napoleão Salles. Todas as pessoas Colégio Pontual (colaboradores e alunos). Aos meus alunos e ex-alunos que me permitiram além de ensinar, aprender com eles ao mesmo tempo.

À minha noiva Mírian de Sales Oliveira e às nossas crianças Felipe e Helena que são o motivo de eu não desistir, mesmo nos dias mais sombrios e pela nova forma de amor que descobrir com esses três.

Ao meu pai (in memoriam) que me ensinou ter foco no trabalho mesmo nos dias mais difíceis.

À minha mãe que incentiva e ir para o doutorado porque ela quer um filho doutor e também por ser a pessoa que mais me apoiou na vida: na escola, nos cursos, na música, nos esportes, na igreja, na paternidade, na graduação, na pós-graduação, no trabalho,...

Agradeço a todos que contribuíram, direta ou indiretamente, para realização deste trabalho.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

“É um erro grave formular teorias antes de conhecer os fatos. Sem querer, começamos a mudar os fatos para que se adaptem às teorias, em vez de formular teorias que se ajustem aos fatos.”

(Sherlock Holmes, 2010- Warner Bros. Pictures)

Modelo multinomial, inferência multimodelo e validação cruzada: uma aplicação.

RESUMO

A constante busca por melhoria da qualidade dos produtos alimentícios exige meios e ferramentas cada vez mais sofisticados. Neste contexto, os sentidos humanos assumem papel estratégico para avaliar e prever a aceitação de um produto no mercado. O papel da Sensometria aqui envolve a aplicação de modelos matemáticos e estatísticos que tratam de todos os aspectos da geração e análise de dados, desde o delineamento de experimentos para investigar percepções e preferências, até ferramentas específicas para analisar e modelar os dados resultantes desses métodos dando ferramentas importantes com aplicações no desenvolvimento de produtos, garantia de qualidade, pesquisa de mercado e comportamento do consumidor. Este estudo busca, por meio de uma abordagem estatística, propor uma modelagem mais específica para conjunto de dados sensométricos de um caso particular da escala Likert, a escala hedônica, que por ser variável afetiva (reflete a aceitação ou preferência), o que nos permite atribuir aos dados distribuição multinomial, uma abordagem também com poucos estudos em Sensometria. Buscamos também, avaliar a aceitação de barras de cereal às quais foram adicionadas diferentes quantidades de farinha seca de jabuticaba em um experimento em blocos casualizados. No experimento, cada consumidor (bloco) classificou em escala hedônica as variáveis aparência, aroma, sabor, textura e impressão global quanto ao seu grau de satisfação. Esses dados foram reduzidos em escalas hedônicas de menor pontuação para construir modelos de regressão mais simplificados (menos interceptos). Outro fator de relevância foi que as análises estatísticas da variável resposta (impressão global), supostamente multinomial, foram conduzidas no contexto dos Modelos Lineares Generalizados, que retira a pressuposição “forte” de distribuição normal para os dados e ao final foi adotado o critério de informação de Akaike (*AIC*) para seleção de modelos e, aqui onde destacamos ser inédito em Sensometria, utilizados os Pesos de Akaike para inferência multimodelo. Para comparar os desempenhos do “melhor” modelo e do processo inferencial multimodelo, foram calculadas medidas de desempenho obtidas por validação cruzada estratificada. Dos principais resultados, merece destaque que o uso da metodologia de Inferência Multimodelo apresentou nas 1000 (mil) simulações realizadas para validação cruzada, um número maior de acertos e um ganho percentual maior do que abordagem de modelo único, com uma precisão maior ao utilizar um percentual cada vez menor de dados de treinamento (ajuste para predição). Concluímos também, sempre que possível, para esse caso devemos utilizar da Inferência Multimodelo e que a inclusão do termo quadrático foi importante em dois dos quatro modelos mais substanciais na Inferência Multimodelo.

Palavras-chave: Análise de dados categóricos; Análise Sensorial; Razão de chances proporcionais; Método *holdout*; Regressão logística; Escala Hedônica.

Multinomial model, multimodel inference and cross validation: an application.

ABSTRACT

The constant search for improving the quality of food products requires increasingly sophisticated means and tools. In this context, the human senses assume a strategic role to evaluate and predict the acceptance of a product in the market. The role of Sensometry here involves the application of mathematical and statistical models that address all aspects of data generation and analysis, from the design of experiments to investigate perceptions and preferences, to specific tools to analyze and model the data resulting from these methods giving important tools with applications in product development, quality assurance, market research and consumer behavior. This study seeks, through a statistical approach, to propose a more specific modeling for a set of sensometric data of a particular case of the Likert scale, the hedonic scale, which, as it is an affective variable (reflects acceptance or preference), allows us to assigning a multinomial distribution to the data, an approach that has also been used in few studies in Sensometry. We also sought to evaluate the acceptance of cereal bars to which different amounts of dry jabuticaba flour were added in a randomized block experiment. In the experiment, each consumer (block) classified the appearance, aroma, flavor, texture and overall impression on a hedonic scale as to their degree of satisfaction. These data were reduced to lower-scoring hedonic scales to build more simplified regression models (fewer intercepts). Another relevant factor was that the statistical analyzes of the response variable (global impression), supposedly multinomial, were conducted in the context of Generalized Linear Models, which removes the “strong” assumption of normal distribution for the data and, in the end, the criterion of Akaike information (AIC) for model selection and, here, where we emphasize that it is unprecedented in Sensometry, we used Akaike Weights for multi-model inference. To compare the performances of the “best” model and the multi-model inferential process, performance measures obtained by stratified cross-validation were calculated. Of the main results, it is worth mentioning that the use of the Multimodel Inference methodology presented, in the 1000 (thousand) simulations carried out for cross validation, a greater number of hits and a greater percentage gain than the single model approach, with greater precision when using a decreasing percentage of training data (adjustment for prediction). We also concluded, whenever possible, that for this case we should use Multimodel Inference and that the inclusion of the quadratic term was important in two of the four most substantial models in Multimodel Inference.

Keywords: Categorical data analysis; Sensory analysis; Proportional odds; Holdout method; Logistic regression; Hedonic scale.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Disposição em escala Likert para os dados com as notas categorizadas em três níveis: 1 (notas de 1 a 3), 2 (notas de 4 a 6) e 3 (notas de 7 a 9) para as variáveis sensoriais.....	35
Figura 2 - Gráfico de barras para as categorias das notas 1 a 3, 4 a 6 e 7 a 9 das variáveis. por dados categorizados por três grupos de notas sendo cada grupo representado por 1 (notas de 1 a 3), 2 (notas de 4 a 6) e 3(notas de 7 a 9) atribuídos de acordo com as quantidades de FSJ (0, 7, 14, 21, 28 e 35g) para os 104 pres julgando (A) Aparência, (B) Aroma, (C) Sabor, (D) Textura (E) IGs.....	36
Figura 3 - Gráficos do modelo quadrático dos logitos da razão de chances.....	39
Figura 4 - Gráfico com os valores dos Pesos de Akaike (ω_i), sendo i de 1 a 128 modelos que compõem o multimodelo do conjunto completo de dados para inferência. Modelos seguem a ordem estabelecida pelo <i>Power Set</i> (conjunto potência).....	41
Figura A1 - Disposição em escala Likert para os dados com as notas de 1 a 9 para as variáveis sensoriais da FSJ.....	49
Figura A2 - Gráfico de barras dos dados por variável com Concentração FSJ (em gramas) x Número de Votos na categoria. Cada barra representa uma nota (de 1 a 9) atribuída de acordo com as quantidades de FSJ (0, 7, 14, 21, 28 e 35g) para os 104 pres julgando (A) Aparência, (B) Aroma, (C) Sabor, (D) Textura (E) IG.	50
Figura B1 - Gráficos das predições multimodelo dos logitos da razão de chances.....	51
Figura B2 - Gráficos das predições multimodelo considerando apenas modelos mais influentes dos logitos da razão de chances.....	52

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Diferenças de AIC e Nível de Suporte Empírico do i -ésimo modelo.....	24
Tabela 2 - Resultados em ordem crescente do AIC do modelo único para os modelos do IG como variável resposta e as demais como preditoras sendo Proveedor (pr), FSJ (fsj), FSJ ² (fsj ²), (pr), Aparência (ap), Aroma (ar), Sabor (as), Textura (te) e Impressão Global (ig). * Modelos que produziram NANs; ∞: modelos que não convergiram à série de dados	37
Tabela 3 - Resultados das estimativas dos parâmetros do modelo final selecionado para variável IG como resposta..	38
Tabela 4 - Estimativas multimodelo dos parâmetros, ponderadas por pesos de Akaike	40
Tabela 5 - Parâmetros dos quatro modelos mais influentes para inferência multimodelo. A ponderação pelos respectivos pesos está disposta na última linha da tabela	42
Tabela 6 - Frequências absolutas (do total de 1000 repetições). Os percentuais dados nas colunas se referem aos percentuais dos dados de ajuste.....	43
Tabela 7 - Resultados das taxas médias de acertos do Modelo Único (MUtx), de acertos do Multimodelo (MMtx) e do ganho percentual ao usar o multimodelo (MMg), de acordo os respectivos percentuais dos dados de ajuste.....	43

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
<i>A-Not-A</i>	A e Não A (Protocolo de discriminação)
AIC	<i>Akaike Information Criterion</i> (Critério de Informação de Akaike)
ANODEV	<i>Analysis of Deviance</i> (Análise dos desvios)
BIC Schwars)	<i>Bayesian Criterion Information</i> (Critério de Informação Bayesiano - Schwars)
EMV	Estimadores de Máxima Verossimilhança
f.d.p.	Função densidade de Probabilidade
f.p.	Função de probabilidade
f.g.m.	Função Geradora de Momentos
FSJ	Farinha Seca de Jaboticaba
GLMM Mistos)	<i>Generalized Linear Mixed Models</i> (Modelos Lineares Generalizados Mistos)
IG	Impressão Global dos provadores
KL	Distância de Kullback-Leibler
MLG	Modelos Lineares Generalizados
MM	Multimodelo
MU	Modelo Único
POLM Proporcionais)	<i>Proportional Odds Logit Model</i> (Modelo Logito de Chances Proporcionais)
TI	Teoria da Informação

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	REVISÃO DA LITERATURA	16
2.1	Propriedades probabilísticas básicas da distribuição Multinomial.....	16
2.2	Modelos Lineares Generalizados.....	17
2.3	Critérios de Informação e Inferência Multimodelo.....	22
2.4	Análise Sensorial e Sensometria.....	26
3	METODOLOGIA	29
3.1	Dados e Análise descritiva.....	29
3.2	Modelos Multinomiais.....	29
3.3	Validação Cruzada.....	32
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	34
4.1	Análise descritiva.....	34
4.2	Inferência baseada em modelo único.....	36
4.3	Inferência Multimodelo.....	40
4.4	Validação Cruzada.....	42
5	CONCLUSÃO	44
6	REFERÊNCIAS	45
	APÊNDICES	48

1 INTRODUÇÃO

Buscar a melhoria da qualidade dos produtos e sua adequação ao mercado consumidor é um constante desafio. Cada vez mais, a ciência tenta descobrir como os sentidos humanos percebem o mundo, explorando suas respostas avaliadas e investigadas. Essas respostas contribuem com a melhora da produção, logística, pesquisas de mercado, escolha do consumidor, entre outros.

A aplicação da estatística, matemática, ciências da computação aos estudos sensoriais, englobando ferramentas e técnicas para a aplicação pode ser tido como uma das definições de Sensometria que busca realizar análises nos comportamentos das respostas aos estímulos humanos: visão, olfato, tato, audição e sentimentos. Com essa finalidade, a condução de experimentos, análise e interpretação de resultados, dentro da Sensometria é conduzida em uma subárea em particular, a análise sensorial.

Os resultados obtidos no experimento dispõem-se em escala hedônica, que é um tipo particular de escala Likert para medir aceitação, que podem assumir uma distribuição multinomial. A distribuição multinomial é o componente aleatório natural para variáveis qualitativas, nominais ou ordinais, com número de categorias superior a duas, generalizando, nesse sentido, a distribuição binomial. Similarmente, a inferência para a distribuição multinomial pode ser realizada no contexto do modelo linear generalizado (MLG).

Considerados uma extensão dos Modelos Lineares clássicos, os MLGs possibilitam remover a restrição de distribuição normal para os dados e utilizar de quaisquer distribuições pertencentes à família exponencial, que inclui a distribuição multinomial como um caso particular multiparamétrico. Assim, definidos os três componentes de um MLG (componente aleatório, preditor linear e função de ligação), deve-se proceder com a estimação de parâmetros e seleção de modelos.

Existem diversas técnicas disponíveis para a seleção de modelos e, neste estudo, os critérios de informação (em particular, o AIC) constituem alvo de destaque, pois permitem, além da escolha do modelo mais parcimonioso, realizar inferência multimodelo por meio do uso dos Pesos de Akaike, que combinam de forma ponderada as predições oriundas de diversos modelos concorrentes, encaixados ou não, simultaneamente. Dada discussão de forma aprofundada desse assunto dos pontos de vista teórico e prático, neste estudo, na área de sensometria, destacamos o ineditismo do uso da técnica.

Independentemente do modelo adotado (ou do conjunto de modelos, no caso de inferência multimodelo), é interessante avaliar o desempenho preditivo por meio de técnicas

de validação cruzada. A validação cruzada consiste no uso de uma ou mais técnicas para avaliar como os valores de uma estatística (por exemplo, previsões baseadas em modelos) se comportam quando contrastadas a conjunto de dados reais, independentes daqueles utilizados para o cálculo da própria estatística. Assim, é possível calcular a precisão e a acurácia de um determinado modelo (ou conjunto de modelos). Aqui fizemos o uso de validação cruzada estratificada para proceder com as análises inferenciais e verificar acurácia e precisão dos modelos, dentro do nosso conjunto de dados para verificar qual é mais, menos ou de igual vantagem no uso, se a Inferência por Modelo Único ou a Inferência Multimodelo.

Tendo em vista a importância da sensometria na melhoria da qualidade dos produtos alimentícios, este estudo é estratégico para ampliar o uso de alguns métodos de análise de dados pouco utilizados na área, como os a modelagem com dados considerados multinomiais. Adicionalmente, este estudo tem o potencial para fornecer novas perspectivas, auxiliando na tomada de decisão e na previsão, por meio da utilização de ferramentas inferenciais multimodelo, avaliadas por validação cruzada, cuja aplicação é inédita em dados de Análise Sensorial.

Neste estudo, foi realizada a modelagem estatística de variáveis sensoriais, considerando os resultados obtidos num experimento em blocos casualizados conduzidos pela Prof. Dra. Flávia Della Lúcia, no qual foram observadas as avaliações de barras de cereal, expostas a diferentes tratamentos, por 104 provadores que atribuíram notas entre 1 e 9 de acordo com suas percepções.

O objetivo geral deste estudo foi ajustar os modelos multinomiais a um conjunto de dados da área de sensometria e comparar o desempenho da inferência multimodelo com a inferência baseada em modelo único, por meio de validação cruzada. Entre os objetivos específicos deste estudo destacamos:

- Realizar previsões das probabilidades de cada categoria da variável resposta (impressão global) de acordo com as covariáveis sob estudo utilizando tanto a abordagem usual, com base no melhor modelo, bem como pela abordagem multimodelo;
- Discutir sobre as vantagens e desvantagens do uso da abordagem multimodelo que é mais computacionalmente intensiva;
- Modelar de forma mais correta, independente de pressuposições fortes os dados sensoriais e mostrar métodos estatísticos subutilizados em Sensometria para fornecer novas vias de compreensão dos dados produzidos na área.

2 REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Propriedades probabilísticas básicas da distribuição multinomial

De acordo com Johnson (1996), o surgimento da distribuição Multinomial se deu por volta de 1708 por Montmort, em conexão com problemas clássicos na área de Probabilidade, envolvendo a pontuação de três jogadores de igual habilidade em um jogo de cartas, também utilizado em 1730 por de Moivre. A distribuição Multinomial é considerada uma generalização multivariada da distribuição binomial (Feller, 1957, 1968), que, segundo Johnson (1996), chamou atenção de numerosos pesquisadores teóricos e aplicados da área de distribuições multivariadas discretas. Para iniciar este estudo, será ilustrada uma situação onde o contexto dessa distribuição é pertinente.

Considere um experimento aleatório repetido m vezes de forma independente, que possui k resultados possíveis, mutuamente exclusivos e exaustivos. Suponha também que as probabilidades associadas a cada um dos k resultados sejam $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k$, de modo que $\pi_i > 0 \forall i = \{1, \dots, k\}$ e que $\sum_{i=1}^k \pi_i = 1$. Nesta situação, Agresti (2007) afirma que a distribuição das contagens nas diversas categorias é multinomial; assim, é válido dizer que o vetor aleatório \mathbf{Y} , que descreve as contagens nas categorias, tem uma distribuição multinomial com índice m e vetor de parâmetros $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k)'$ com a notação $\mathbf{Y} \sim \text{Mult}(m, \boldsymbol{\pi})$ e função de probabilidade (f.p.) dada por

$$f_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}; \boldsymbol{\pi}) = \frac{m!}{y_1! \dots y_k!} \pi_1^{y_1} \dots \pi_k^{y_k},$$

satisfazendo $\sum_{i=1}^k y_i = m$.

Está claro que, em diferentes ensaios que contam com mais de dois resultados categóricos possíveis, pode ser utilizada a distribuição multinomial. Outros exemplos podem ser: a situação de saúde de um motorista que sofreu um acidente de carro, registrada usando as categorias “não lesionado”, “lesão que não requer hospitalização”, “lesão que requer hospitalização” ou “fatalidade”; para a análise de peças de uma linha de produção de uma fábrica de parafusos, classificados como “sem defeito”, “defeito na espessura”, “defeito no tamanho” ou “defeito na forma”; para os resultados da classificação do grão do café quanto à peneiragem como “chato-grosso”, “médio”, “miúdo”; “moca graúdo”, “médio” e “miúdo”; “quebrado” e “minimal”, entre outros.

Valor Esperado. McCullagh e Nelder (1985) também afirmam que a distribuição Multinomial decorre de uma generalização da distribuição Binomial, cujo com valor esperado é $m\boldsymbol{\pi}$. Podemos obter a esperança de um vetor aleatório \mathbf{Y} qualquer como

$$E[\mathbf{Y}] = (E[Y_1] \quad E[Y_2] \quad \cdots \quad E[Y_k])'$$

e, para $\mathbf{Y} \sim \text{Mult}(m, \boldsymbol{\pi})$, temos que

$$\begin{aligned} E[\mathbf{Y}] &= (m\pi_1 \quad m\pi_2 \quad \cdots \quad m\pi_k)' \\ &= m\boldsymbol{\pi}. \end{aligned}$$

Matriz de covariâncias. Para um experimento multinomial, com m realizações independentes, k possíveis resultados e probabilidade $\pi_i > 0$ ($i = \{1, \dots, k\}$) do i -ésimo resultado, a esperança de cada entrada do vetor aleatório (esperanças marginais) é dada por $E[Y_i] = m\pi_i$ e as variâncias por $\text{Var}[Y_i] = m\pi_i(1 - \pi_i)$. A covariância entre duas variáveis aleatórias quaisquer do vetor \mathbf{Y} , seja Y_i e Y_j , é dada por $\text{Cov}[Y_i, Y_j] = E[Y_i Y_j] - E[Y_i]E[Y_j] = m(m - 1)\pi_i\pi_j - m^2\pi_i\pi_j = -m\pi_i\pi_j$. Assim, a matriz de covariâncias pode ser escrita como

$$\text{Var}[\mathbf{Y}] = m \begin{pmatrix} \pi_1(1 - \pi_1) & -\pi_1\pi_2 & -\pi_1\pi_3 & \cdots & -\pi_1\pi_k \\ -\pi_1\pi_2 & \pi_2(1 - \pi_2) & -\pi_2\pi_3 & \cdots & -\pi_2\pi_k \\ -\pi_1\pi_3 & -\pi_2\pi_3 & \pi_3(1 - \pi_3) & \cdots & -\pi_3\pi_k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\pi_1\pi_k & -\pi_2\pi_k & -\pi_3\pi_k & \cdots & \pi_k(1 - \pi_k) \end{pmatrix}.$$

Inferência para a distribuição Multinomial. Até o presente momento, foram abordadas características importantes da distribuição multinomial sob a ótica da Probabilidade. Por outro lado, do ponto de vista da Estatística, quando tudo que dispomos é de um conjunto de dados supostamente multinomial, precisamos realizar inferências sobre os parâmetros $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k$. A inferência na distribuição multinomial pode ser realizada dentro do contexto do modelo linear generalizado (MLG).

2.2 Modelos Lineares Generalizados

Os MLGs são uma extensão dos modelos clássicos de regressão e de análise de variância, que removem a suposição estrita de normalidade para distribuição da variável resposta. Assim, esses modelos possibilitam utilizar outras distribuições, as quais devem pertencer à família exponencial de distribuições.

Seja Y uma variável aleatória, cuja função de probabilidade (f.p.) ou função densidade de probabilidade (f.d.p.) depende de um único parâmetro θ . Seja a família $\mathcal{F} = \{f(y; \theta), \theta \in \mathbb{R}\}$ de f.p. ou f.d.p., poderemos dizer que a função é da família exponencial na forma canônica com parâmetro θ se

$$f(y; \theta) = \exp \left\{ \frac{1}{a(\varphi)} [y\theta - b(\theta)] + c(y, \varphi) \right\} I_{\mathcal{A}}(y),$$

em que $I_{\mathcal{A}}(y)$ é a indicadora de y no conjunto \mathcal{A} , que independe de θ ; φ é um parâmetro de dispersão supostamente conhecido; e as funções $a(\varphi)$, $b(\theta)$ e $c(y, \varphi)$ são conhecidas. Os Exemplos 1 e 2 ilustram, respectivamente, que as distribuições binomial e multinomial pertencem à família exponencial.

Exemplo 1 (Família Exponencial Canônica I). Escrever na forma canônica a f.p. de uma variável aleatória com distribuição binomial com índice m e probabilidade de sucesso π . Assim, para $Y \sim \text{Bin}(m, \pi)$, manipulamos sua função de probabilidade, obtendo

$$\begin{aligned} f(y, \pi) &= \binom{m}{y} \pi^y (1 - \pi)^{m-y} I_{\mathcal{A}}(y) \\ &= \exp \left\{ \log \binom{m}{y} + y \log \pi + (m - y) \log(1 - \pi) \right\} I_{\mathcal{A}}(y) \\ &= \exp \left\{ y \log \left(\frac{\pi}{1 - \pi} \right) + m \log(1 - \pi) + \log \binom{m}{y} \right\} I_{\mathcal{A}}(y), \end{aligned}$$

com $\mathcal{A} = \{0, 1, \dots, m\}$ independente de θ . Ao comparar com a expressão na forma canônica, encontramos $a(\varphi) = 1$; $\theta = \log \left(\frac{\pi}{1 - \pi} \right) \Rightarrow \pi = \frac{e^\theta}{1 + e^\theta}$; $b(\theta) = -m \log(1 - \pi) = m \log(1 + e^\theta)$ e $c(y, \varphi) = \log \binom{m}{y}$, que nos permite concluir que a distribuição binomial pertence à família exponencial de distribuições.

Exemplo 2 (Família Exponencial Canônica II). Seja o vetor aleatório $\mathbf{Y} \sim \text{Multi}(m, \boldsymbol{\pi})$. Vamos verificar que se trata de uma distribuição na família exponencial na forma canônica,

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{Y}}(\mathbf{y}; \boldsymbol{\pi}) &= \frac{m!}{y_1! \dots y_k!} \pi_1^{y_1} \pi_2^{y_2} \dots \pi_k^{y_k} \\ &= \exp \left\{ \log \left[\frac{m!}{y_1! \dots y_k!} \pi_1^{y_1} \pi_2^{y_2} \dots \pi_k^{y_k} \right] \right\} \\ &= \exp \left\{ \log \frac{m!}{y_1! \dots y_k!} + \log \pi_1^{y_1} + \log \pi_2^{y_2} + \dots + \log \pi_k^{y_k} \right\} \\ &= \exp \left\{ \log \frac{m!}{y_1! \dots y_k!} + y_1 \log \pi_1 + y_2 \log \pi_2 + \dots + y_k \log \pi_k \right\} \\ &= \exp \left\{ \log \frac{m!}{y_1! \dots y_k!} + y_1 \log \pi_1 + y_2 \log \pi_2 + \dots + \left(m - \sum_{i=1}^{k-1} y_i \right) \log \left(1 - \sum_{i=1}^{k-1} \pi_i \right) \right\} \\ &= \exp \left\{ \sum_{i=1}^{k-1} y_i \log \pi_i + \left(m - \sum_{i=1}^{k-1} y_i \right) \log \left(1 - \sum_{i=1}^{k-1} \pi_i \right) + \log \frac{m!}{y_1! \dots y_k!} \right\} \\ &= \exp \left\{ \sum_{i=1}^{k-1} y_i \log \left(\frac{\pi_i}{\pi_k} \right) + m \log(1 - \pi_k) + \log \frac{m!}{y_1! \dots y_k!} \right\}. \end{aligned}$$

Como $\sum_{i=1}^k \pi_i = 1$, a representação da família exponencial é obtida considerando o vetor $\boldsymbol{\theta} = (\log \frac{\pi_1}{\pi_k}, \log \frac{\pi_2}{\pi_k}, \dots, \log \frac{\pi_{k-1}}{\pi_k})'$ de dimensão $(k - 1)$. Portanto, $b(\boldsymbol{\theta}) = -m \log(1 - \pi_k)$, $\varphi = 1$ e $c(\mathbf{y}; \boldsymbol{\varphi}) = \exp \left\{ \log \frac{m!}{y_1! y_2! \dots y_k!} \right\}$. Logo, podemos concluir que a variável Multinomial pertence à família exponencial multiparamétrica.

Função Geradora de Momentos da Família Exponencial. Outra maneira de identificar a distribuição de uma variável aleatória é identificando a sua função geradora de momentos (f.g.m.), isto é, uma f.g.m. corresponde univocamente a uma única distribuição. No caso da família exponencial, McCullagh e Nelder (1989) obtiveram a f.g.m. geral

$$M_Y(t) = E[e^{tY}] = \exp\left\{\frac{1}{a(\varphi)}\{b[a(\varphi)t + \theta] - b(\theta)\}\right\},$$

que fornece média e variância respectivamente por $E[Y] = b'(\theta)$ e $\text{Var}[Y] = a(\varphi)b''(\theta)$.

Estatística Suficiente para distribuições da Família Exponencial. Seja Y_1, Y_2, \dots, Y_n , uma amostra aleatória de uma distribuição pertencente à família exponencial. Então, a f.p. ou f.d.p. conjunta é dada por:

$$\begin{aligned} f_Y(\mathbf{y}; \theta, \varphi) &= \prod_{i=1}^n f(y_i; \theta, \varphi) \\ &= \prod_{i=1}^n \exp\left\{\frac{1}{a(\varphi)}[y_i\theta - b(\theta)] + c(y_i; \varphi)\right\} \\ &= \exp\left\{\frac{1}{a(\varphi)}\left[\theta \sum_{i=1}^n y_i - nb(\theta)\right] + \sum_{i=1}^n c(y_i; \varphi)\right\}. \end{aligned}$$

Pelo teorema da fatoração de Neyman-Fisher, tem-se que $T = \sum_{i=1}^n Y_i$ é uma estatística suficiente para θ .

Definição do MLG. Segundo Demétrio (2002), podemos pensar em um modelo estatístico consistindo de duas partes distintas: (i) um componente sistemático, que é estabelecido durante o planejamento do experimento, resultando em modelos de regressão (linear simples, múltipla, não linear etc.), de análise de variância (delineamentos inteiramente casualizados, blocos casualizados, quadrados latinos com estrutura de tratamentos fatorial, parcelas subdivididas, entre outras) e de análise de covariância; (ii) um componente aleatório, que é estabelecido assim que são definidas as medidas a serem feitas, que podem ser contínuas ou discretas, exigindo o ajuste de distribuições diferentes.

No modelo linear clássico temos

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

em que \mathbf{Y} é um vetor coluna com n linhas da variável resposta; \mathbf{X} é a matriz experimental dimensões $n \times p$; $\boldsymbol{\beta}$ o vetor dos parâmetros de comprimento p ; $\boldsymbol{\varepsilon}$ é o componente aleatório satisfazendo $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(0, \sigma^2 \mathbf{I})$. Nelder e Wedderburn (1972) propuseram uma teoria unificadora dos MLGs como extensão dos modelos clássicos. Eles argumentaram que a maioria dos problemas estatísticos em diversas áreas da Ciência pode ser formulada, de uma maneira unificada, envolvendo uma variável resposta e variáveis explicativas.

Ao considerar a proposta de Nelder e Wedderburn (1972), precisamos ter em mente os três componentes básicos de um MLG: (i) Variável resposta, componente aleatório do

modelo, cuja distribuição deve pertencer à família exponencial; (ii) Preditor linear, que é o componente sistemático do modelo, que inclui a matriz do delineamento experimental e as variáveis explicativas; (iii) Função de ligação, que associa o valor esperado da variável resposta ao componente sistemático. Assim, podemos genericamente denotar um MLG por

$$g(\boldsymbol{\mu}) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

em que $g(\cdot)$ é a função de ligação, $\boldsymbol{\mu} = E[\mathbf{Y}]$ é o vetor de valores esperados do componente aleatório da variável resposta; $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$, é o componente sistemático; \mathbf{X} a matriz de dimensões $n \times p$ do modelo e $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p)'$ o vetor de parâmetros.

Estimação do vetor de parâmetros $\boldsymbol{\beta}$. O ajuste de um modelo linear generalizado é determinado pelo vetor de estimativas dos parâmetros $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. Em tese, existem resultados que só funcionam quando usamos o método da máxima verossimilhança como teorema de Wilk (origem ao teste da razão de verossimilhança e a análise de desvio) e o teste de Wald (testar a significância dos parâmetros em um modelo linear generalizado). Nenhum deles é possível se não usarmos a estimativa de máxima verossimilhança. O logaritmo da função de verossimilhança para um conjunto de observações independentes é dado pela soma das contribuições individuais (DEMÉTRIO, 2001, p. 28). Sendo y_1, y_2, \dots, y_n , as observações independentes e $l(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{y}) = \log L$ o logaritmo natural da função de verossimilhança L , temos

$$l = l(\boldsymbol{\theta}; \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n l(\theta_i; y_i) = \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{1}{a(\varphi)} [y_i \theta_i - b(\theta_i)] + c(y_i; \varphi) \right\}$$

em que $E[Y_i] = \mu_i$; $\eta_i = g(\mu_i) = \mathbf{x}_i^T \boldsymbol{\beta}$; e $\theta_i = \int V_i^{-1} d\mu_i = q(\mu_i)$.

No entendimento de Cox & Hinkley (1986), uma propriedade da família exponencial de distribuições é que seus elementos satisfazem a condições de regularidade (identificabilidade do modelo, existência, unicidade, consistência e à normalidade assintótica dos estimadores de máxima verossimilhança e distribuição assintótica das estatísticas de teste) para assegurar que o máximo global do logaritmo da função de verossimilhança $l(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})$ é dado unicamente pela solução do sistema de equações $\mathbf{U}_\theta = \frac{\partial l}{\partial \theta} = 0$ o que equivale a $\mathbf{U}_\beta = \frac{\partial l}{\partial \beta} = 0$. A função escore é dada por

$$U_j = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial \beta_j} l(\boldsymbol{\beta}; \mathbf{y}, \varphi) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{a(\varphi)} (y_i - \mu_i) \frac{1}{V(\mu_i)} \frac{d\mu_i}{d\eta_i} x_{ij}.$$

Ao resolver $\mathbf{U}_\beta = \frac{\partial l}{\partial \beta} = 0$ por Newton-Raphson, buscamos uma solução baseada na aproximação de Taylor; isto é,

$$\boldsymbol{\beta}^{\rho+1} = \boldsymbol{\beta}^{\rho} + (\mathbf{I}^{-1})^{\rho}(\mathbf{U})^{\rho}$$

em que ρ é o passo da iteração, $\boldsymbol{\beta}$ o vetor dos parâmetros no processo de estimação, \mathbf{I} é a inversa negativa da matriz de derivadas parciais de 2ª ordem da função de verossimilhança e \mathbf{U} é o vetor escore. Substituindo a matriz de informação observada \mathbf{I} pela matriz de informação de Fisher

$$\boldsymbol{\beta}^{\rho+1} = \boldsymbol{\beta}^{\rho} + (\mathfrak{I}^{-1})^{\rho}(\mathbf{U})^{\rho},$$

em que \mathfrak{I} tem elementos dados por

$$\mathfrak{I}_{jk} = E \left[\frac{\partial^2 l}{\partial \beta_j \partial \beta_k} \right] = E \left[\frac{\partial l}{\partial \beta_j} \frac{\partial l}{\partial \beta_k} \right].$$

Fica claro que \mathfrak{I} é a matriz de covariâncias de \mathbf{U}_j . Multiplicando a equação do vetor de parâmetros no passo $\rho + 1$, por $\mathfrak{I}^{(\rho)}$ temos

$$\mathfrak{I}^{(\rho)} \boldsymbol{\beta}^{\rho+1} = \mathfrak{I}^{(\rho)} \boldsymbol{\beta}^{\rho} \mathbf{U}^{\rho},$$

com elemento típico

$$\begin{aligned} \mathfrak{I}_{jk} &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{[a_i(\varphi)]^2} E(Y - \mu_i)^2 \frac{1}{[V(\mu)]^2} \left(\frac{d\mu_i}{d\eta_i} \right)^2 x_{ij} x_{ik} = \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{[a_i(\varphi)]^2} a(\varphi) V(\mu_i) \frac{1}{[V(\mu_i)]^2} \left(\frac{d\mu_i}{d\eta_i} \right)^2 x_{ij} x_{ik} = \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{a_i(\varphi)} \frac{1}{V(\mu_i)} \left(\frac{d\mu_i}{d\eta_i} \right)^2 x_{ij} x_{ik}. \end{aligned}$$

Ao fazer $a_i(\varphi) = \frac{\varphi}{w_i}$, com $\varphi > 0$ constante, e w_i peso *a priori*, $W_i = \frac{w_i}{V(\mu_i)} \left(\frac{d\mu_i}{d\eta_i} \right)^2$, temos o resultado

$$\mathfrak{I} = \frac{1}{\varphi} \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X},$$

em que \mathbf{X} é a matriz do modelo e $\mathbf{W} = \text{diag}\{W_1, W_2, \dots, W_n\}$ é uma matriz diagonal. Ao iniciar o processo iterativo, é necessário especificar uma estimativa inicial $\boldsymbol{\beta}^0$ e sucessivamente alterá-la até que a convergência seja obtida e, portanto, $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{\beta}^{\rho+1}$. Então cada observação pode ser considerada como uma estimativa do seu valor médio: $\hat{\mu}_i = y_i$. Logo $\hat{\eta}_i = g(\hat{\mu}_i) = g(y_i)$. Sendo $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ como variável dependente e \mathbf{X} a nossa matriz do modelo, obtemos o vetor $\boldsymbol{\beta}^0$.

Assim, as estimativas são dadas por $\eta^{\rho} = \sum_{j=1}^{\rho} x_{ij} \beta_j^{(\rho)}$, $\mu_i^{\rho} = g^{-1}(\eta_i^{(\rho)})$ e a variável ajustada

$$z_i^{(\rho)} = \eta_i^{(\rho)} + (y_i - \mu_i^{(\rho)}) g'(\mu_i^{(\rho)}).$$

O Exemplo 3 apresenta um caso particular dos elementos para construção do algoritmo de estimação de um MLG.

Exemplo 3 (Regressão logística). Considere uma variável resposta com distribuição binomial, ou seja, $Y_i \sim \text{Bin}(m_i, \pi_i)$. Como a variável tem distribuição binomial, podemos escrever sua f.p. da seguinte forma

$$f(y_i, \pi_i) = \binom{m_i}{y_i} \pi_i^{y_i} (1 - \pi_i)^{m_i - y_i} I_A(y_i), \quad \pi \in [0, 1] \text{ e } A = \{0, 1, \dots, m_i\}$$

em que $\varphi = 1$ $a_i(\varphi) = 1$. Então temos que $E[Y_i] = b'(\theta_i) = m_i \pi_i$ e $\text{Var}[Y_i] = m_i \pi_i (1 - \pi_i) = \frac{1}{m_i} \mu(m_i - \mu_i)$. Adotando-se a função de ligação logística (canônica) e o preditor linear dado por uma regressão linear simples, isto é, $\eta_i = \ln\left(\frac{\mu_i}{m_i - \mu_i}\right) = \beta_0 + \beta_1 d_i$, então temos

$$\mu_i = g^{-1}(\eta_i) = \frac{e^{\eta_i}}{1 + e^{\eta_i}},$$

de forma que

$$\frac{d\eta_i}{d\mu_i} = \frac{m_i}{\mu_i(m_i - \mu_i)}.$$

A matriz do modelo é dada por

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & d_1 \\ 1 & d_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & d_n \end{bmatrix}$$

O vetor de parâmetros $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2)'$. Então teremos para o valor da variável dependente ajustada

$$z_i = \eta_i + (y_i - \mu_i) \frac{m_i}{\mu_i(m_i - \mu_i)}$$

e os pesos

$$W_i = V_i = \frac{1}{m_i} \mu_i(m_i - \mu_i).$$

Seleção de modelos. Ao buscar o modelo mais simples e razoável que descreva bem um conjunto de dados observados (“um melhor modelo”), no contexto dos MLGs, pode-se proceder com a análise de *deviance* (ANODEV), que é uma generalização da análise de variância para os MLGs. Resumidamente, a ANODEV visa obter o modelo com a menor *deviance* aceitável (segundo argumentos assintóticos da máxima verossimilhança), a partir da inclusão/exclusão sequencial de covariáveis, fatores ou interações no preditor dos modelos, cada um incluindo/excluindo mais termos do que os anteriores. Outra forma de seleção de modelos no contexto dos MLGs é empregar critérios de informação como o *AIC*, que permitem, inclusive, realizar inferência multimodelo.

2.3 Critérios de Informação e Inferência Multimodelo

Modelos que levam em conta a aleatoriedade nos dados são usados em experimentos científicos para fazer inferências relativas a parâmetros de interesse. Fisher (1922) discutiu três aspectos do problema geral da validação da inferência: (i) especificação do modelo; (ii)

estimação dos parâmetros do modelo; (iii) estimação da precisão, que envolve formular um conjunto de modelos candidatos e selecionar um deles. Por exemplo, ao considerarmos uma regressão linear múltipla (um caso particular do modelo linear clássico), em que uma variável independente y_i é uma função de r variáveis explanatórias x_{ij} ($j = 1, 2, \dots, r$), os resíduos ϵ_i de n observações são assumidos serem independentes e normalmente distribuídos com variância σ^2 e a estrutura do modelo expressa como $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_r x_{ir} + \epsilon_i$, com $i = 1, 2, \dots, n$, e tendo como valor esperado $E[y_i] = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_r x_{ir}$ e resíduos $\epsilon_i = y_i - E[y_i]$.

Neste contexto, a função de verossimilhança faz inferências para os parâmetros, entretanto a seleção de modelos trata de diferentes possíveis modelos ajustados: condicionados aos dados e à forma do modelo, encontramos os estimadores de máxima verossimilhança (EMVs) dos parâmetros do modelo ajustado e podemos também investigar a adequação de um modelo candidato aos dados, como examinar resíduos e medidas de ajuste, como R^2 , *deviance* ou testes de qualidade de ajuste (χ^2 , por exemplo). Dentro de um senso de parcimônia, uma consideração cuidadosa do número e da natureza das variáveis preditoras a serem usadas na análise será geralmente suficiente para definir os modelos candidatos, muito embora não haja modelos que representem exatamente a realidade completa.

AIC (Akaike Information Criterion). Para avaliar diferentes modelos candidatos, Akaike (1973) encontrou uma relação simples entre a distância de Kullback-Leibler (KL) e o logaritmo da função de verossimilhança maximizada. Essa relação leva a uma metodologia simples, eficaz e geral para a seleção de um modelo parcimonioso para a análise de dados. A perda de informação de KL entre o modelo “verdadeiro” $f(t)$ (verdade completa) e o modelo candidato $g(t; \tau)$ são definidas para funções contínuas como a integral que é geralmente multidimensional

$$I(f, g) = \int f(t) \log \frac{f(t)}{g(t; \tau)} dt,$$

em que $I(f, g)$ denota a informação perdida quando o modelo g é usado para aproximar f , isto é, $I(f, g)$ é a distância de g a f . Assim, Akaike (1973) propôs o uso da perda de informação de KL como base fundamental para a seleção de modelos e encontrou uma maneira de estimar as informações de KL. O Critério de Informação Akaike (AIC, na sigla em inglês) é dado por

$$AIC = -2 \log L(\hat{\beta}; \mathbf{y}) + 2p$$

em que $\log[L(\hat{\beta}|\mathbf{y})]$ é o valor numérico assumido pela função de verossimilhança maximizada em escala logarítmica, que, na prática, forneceu os valores das estimativas de máxima verossimilhança $\hat{\beta}$. Assim, calculamos o AIC para cada um dos modelos candidatos e selecionamos o modelo com o menor valor de AIC , que esse modelo deverá, teoricamente, ser mais próximo da realidade desconhecida (com menor perda da informação de KL). Existe também o critério de informação de Akaike de segunda ordem (AIC_c), que fornece um ajuste para o viés em pequenas amostras, dado por $AIC_c = -2 \log L(\hat{\theta}; \mathbf{y}) + 2p \left(\frac{2p(p-1)}{n-p-1} \right)$ ou, equivalentemente,

$$AIC_c = AIC + \frac{2p(p-1)}{n-p-1}.$$

É claro que existem mais critérios de Informação como WAIC (*Widely Applicable Information Criterion*), BIC (*Bayesian Information Criterion*) também conhecido como Critério Bayesiano de Schwarz, DIC (*Deviance Information Criterion*), entre tantos outros (BURNHAM e ANDERSON, 2002; BOZDOGAN, 1987). Entretanto, neste estudo, nos concentraremos em funções do AIC que são úteis na Inferência Multimodelo.

Diferenças de AIC (Δ). Todos os critérios de informação (AIC, AICc ou outros) estão em uma escala relativa à realidade desconhecida f , e para comparação de r modelos candidatos, precisam ser escalonados; por exemplo, por uma diferença simples; $\Delta_i = AIC_i - \min\{AIC\}$. Quanto maior Δ_i , menos aceitável será o i -ésimo modelo candidato no conjunto dos r modelos. Algumas regras básicas estão disponíveis na Tabela 1.

Tabela 1 – Diferenças de AIC e Nível de Suporte Empírico do i -ésimo modelo

Δ_i	Nível de Suporte Empírico do i -ésimo modelo
0 – 2	Substancial
4 – 7	Consideravelmente menos substancial
> 10	Essencialmente nenhum

Fonte: Adaptado de BURNHAM ;ANDERSON: 2002, p. 70.

Burnham e Anderson (2002) recomendam, para todos os modelos candidatos no conjunto, calcular rotineiramente Δ_i , pois os valores isolados de AIC não são diretamente úteis.

Pesos de Akaike (ω_i) e inferência multimodelo. Burnham e Anderson (2002) enfatizam que as abordagens da Teoria da Informação permitem que a inferência dos dados seja baseada

em mais de um modelo, a qual chamam de inferência multimodelo utilizados os pesos de Akaike. Uma melhor interpretação do nível de suporte empírico, fixados os dados e o conjunto de r modelos candidatos, pode ser obtida normalizando as diferenças Δ_i . Chamamos essa normalização “pesos de Akaike”,

$$\omega_i = \frac{\exp\left\{-\frac{1}{2}\Delta_i\right\}}{\sum_{j=1}^r \exp\left\{-\frac{1}{2}\Delta_j\right\}},$$

satisfazendo $\sum_{i=1}^r \omega_i = 1$. Se um modelo for adicionado ou eliminado, os valores de Δ_i deverão ser recalculados e, portanto, também os ω_i deverão ser recalculados para todos os modelos no novo conjunto. Um dado ω_i pode ser interpretado como a probabilidade de que o i -ésimo modelo tenha a menor perda de informação de KL. Desta forma, os pesos de Akaike podem ser utilizados para realizar inferências multimodelo ao serem incluídos para ponderar estimativas ou predições provenientes de diferentes modelos.

A partir dos ω_i podemos decidir em qual fração desse modelo irá compor meu conjunto para inferência multimodelo. Por exemplo, se tivermos $\omega_2 = 0,25$, significa que o segundo modelo tem 25% de chance de constituir a melhor aproximação da realidade entre o conjunto de modelos ajustados e, assim, ele terá peso de 0,25 na composição da predição final. Ao final, são escolhidos todos os ω_i para composição do modelo final e realizadas as inferências e predições.

Dos trabalhos envolvendo Inferência Multimodelo, podemos destacar Covarrubias *et al.* (2013), que, a partir de dados do tamanho de ostras marinhas em costões rochosos, predizeram a maturidade sexual por meio de modelos sigmoidais, estimando o tamanho médio para cada sexo por meio de diversos modelos. Eles observaram que os valores preditos corroboram com o relatado no *National Fishery Chart*, concluindo, assim, que a inferência multimodelo é um método útil para estimar o tamanho médio na maturidade sexual.

Bernardi (2020) propôs uma nova metodologia para Inferência Multimodelo, baseada na modificação do algoritmo *Adaptive Regression by Mixing*, e aplicou aos dados de inventário florestal para estimativa do volume de madeira, por meio de equações volumétricas e de afilamento do fuste. O algoritmo proposto, *Mixed Taper Equations*, foi capaz de realizar a reconstituição do volume das árvores com resultados por árvore mais acurados do que os modelos únicos.

Grueber *et al.* (2011) identificou uma série de obstáculos práticos como colinearidade entre os preditores, cálculo dos parâmetros médios do modelo utilizando Inferência Multimodelo baseada em Teoria da Informação (como os próprios pesos de Akaike) e quando

usar interceptos aleatórios ou inclinações. Eles trazem um estudo de uma das aplicações dos Modelos Lineares Generalizados Mistos (GLMMs) que incluem efeitos aleatórios no preditor e alternativas para lidar com dados cujas distribuições de probabilidade são não normais. Eles apontam algumas questões ainda pendentes, como: dadas as dificuldades apresentadas pela inclusão de fatores aleatórios, quais critérios da Teoria da Informação devem ser usados na comparação de modelos; ao determinar o corte para um conjunto de “melhores” modelos, de qual forma objetiva podemos definir um quantitativo para um número exagerado de modelos na Inferência Multimodelo; e, como devemos decidir quais modelos aninhados remover do conjunto de modelos selecionados. Por fim, os autores discutem também que comparações de modelos usando abordagens da Teoria da Informação requerem um conjunto sem dados faltantes, uma vez que essa ausência pode afetar severamente os resultados – isto, por sua vez, parece criar dificuldades nos procedimentos de validação cruzada no contexto da Inferência Multimodelo.

De forma geral, notamos que a Inferência Multimodelo é ainda atualmente subutilizada e guarda potencial de aplicação em diversas áreas do conhecimento, incluindo Análise Sensorial e Sensometria, que constituem o tema de investigação deste estudo.

2.4 Análise Sensorial e Sensometria

Com mais de 50 anos de atuação, a Sensometria tem atuação de forma a trazer a Estatística para lidar com o caráter subjetivo das sensações. É a ciência que reúne Estatística, Psicologia, Física, Fisiologia Humana e a Matemática (FERREIRA; OLIVEIRA, 2007). Dentro do campo da Sensometria, destacamos a Análise Sensorial.

A Análise Sensorial pode ser aplicada a diferentes objetivos, sendo um deles a determinação de normas e estabelecimento de critérios e referências de qualidade, pelos quais a matéria prima, os ingredientes e o produto final podem ser classificados e avaliados. O ser humano, com suas apreciações subjetivas, é e sempre será, o melhor “processador” para realizar análises sensoriais, pois é o único capaz de agregar conhecimentos técnicos e científicos a valores culturais e socioeconômicos, fundamentais para comercialização de produtos alimentares (TEIXEIRA, 2009).

A Associação Brasileira de Normas Técnicas (1993) entende que a análise sensorial é definida como disciplina científica utilizada para medição, memória, análise e interpretação das reações das características de alimentos e materiais e como estas são percebidas pelos sentidos da visão, olfato, gosto, tato e audição (Teixeira, 2009), sendo que testes, de diferentes

enfoques, são utilizados para se alcançar diferentes graus de respostas. Atualmente a procura do consumidor por alimentos diferentes, mais práticos, seguros e que apresentem qualidade é uma forte tendência de mercado e a análise sensorial apresenta-se como uma ciência competente para fornecer informações decisivas, as quais definem até que nível pode variar a qualidade de um produto sem que sua imagem seja prejudicada diante o mercado consumidor (OLIVEIRA; RODRIGUES, 2011).

Para Minim (2006), a análise sensorial consiste em três etapas básicas: i) Identificação dos atributos sensoriais; ii) escolha e aplicação do método para quantificar tais atributos; e iii) a seleção dos métodos estatísticos para análise e interpretação dos dados. Os métodos mencionados em i, ii, e iii compõem a Sensometria, que é uma área da estatística que objetiva mensurar os estímulos percebidos pelos sentidos humanos básicos e, dessa forma, lidar com o caráter subjetivo das sensações (DAEMS; DELVAUX, 1997; SINESIO; MONETA; SABA, 1992). Os experimentos em sensometria geralmente produzem uma variável resposta em Escala Likert que podemos utilizar para trabalhar usando modelos com as características das distribuições Multinomiais.

Trabalhos, como de Cunha *et al.* (2019), aplicam regressão logística ordinal cumulativa, em um delineamento transversal, para avaliar a opção de compra de estudantes universitários por alimentos orgânicos com relação aos atributos sensoriais utilizando escala Likert de 5 pontos. Eles tiveram como objetivo principal avaliar o desejo de compra dos participantes, associado às diferenças sensoriais percebidas em vegetais verdes folhosos, orgânicos e convencionais, por meio de três testes distintos – cego, informado e invertido. Primeiro, foi apresentado um questionário com 16 afirmações a 233 consumidores com uma resposta em escala Likert de cinco pontos. Posteriormente, foi realizada uma escala hedônica com 150 consumidores, sendo 50 em cada tipo de teste com vegetais de folhas verdes convencionais e orgânicas: alface (*Lactuca sativa L.*); couve (*Brassica oleracea L.*); chicória comum (*Cichorium intybus*); e endívia (*Cichorium endivia*). O aspecto visual, o sabor, a textura, o amargor e o gosto geral de todas as amostras foram avaliados em uma escala hedônica de nove pontos. Esta pesquisa mostrou que os universitários foram influenciados pelo rótulo orgânico, revelando sua percepção sensorial sobre os vegetais.

Melo (2021) tratou a abordagem dos modelos multinomiais em sua tese, compondo uma revisão dos modelos para dados categorizados ordinais com análise dos cinco atributos sensoriais: aroma, corpo, doçura, sabor e impressão global. Então, ela procedeu com dois tipos de abordagem: uma análise de correspondência e também ajustou modelos de chances proporcionais com efeito aleatório para provador. Na primeira, ele identificou que as

melhores formulações de bebidas foram compostas por 6% de açúcar e 44% de suco de uva. Na segunda, por meio de um modelo “multi” multivariado de efeito misto, todos os atributos foram analisados simultaneamente em um modelo único com métodos baseados na teoria da máxima verossimilhança, ela concluiu que a melhor formulação foi aquela composta por 6% de açúcar e 43% de suco de uva.

Um exemplo que também merece atenção é de Christenses *et al.* (2011), que fizeram um estudo com o protocolo de discriminação *A-Not-A*. Esta abordagem produz uma resposta tipicamente multinomial para a qual os autores adotaram uma análise baseada em tabelas contingência. A extensão do modelo também permite incorporar variáveis explicativas e ilustra como as diferenças do consumidor podem ser modeladas dentro da estrutura a fim de descrever o mapeamento de alguma escala contínua em categorias de resposta discretas, possivelmente ordenadas (*Thurstonian*). Este estudo foi direcionado aos consumidores de sopa em pacote conduzido pela iniciativa da empresa Unilever.

3 METODOLOGIA

3.1 Dados e Análise descritiva

Os dados utilizados neste estudo foram cedidos pela Prof. Dra. Flávia Della Lúcia e estão disponíveis em Marino (2017). A pesquisa foi realizada envolvendo atributos sensoriais de uma barra de cereal, à qual foi acrescentada farinha seca de jabuticaba (FSJ) em diferentes concentrações (0, 7, 14, 21, 28 e 35g) para, em seguida, verificar sua aceitabilidade, tendo como variável resposta a Impressão Global (IG) dos provadores.

A IG foi obtida por meio de escala hedônica de 9 pontos, sendo 1 (desgostei muitíssimo) a 9 (gostei muitíssimo). Este pode ser considerado um experimento em blocos casualizados, em que os provadores são os blocos e as diferentes concentrações de FSJ são os tratamentos. Os testes sensoriais foram realizados no Laboratório de Técnica Dietética e Composição de Alimentos da Universidade Federal de Alfenas-MG, utilizando cabines individuais por 104 consumidores potenciais do produto (maiores de 18 anos) que gostavam de barra de cereal, da fruta jabuticaba e que desejaram colaborar com o estudo.

Para Giolo (2017), há certas situações em que agrupar categorias se faz necessário devido à presença de categorias com frequências muito baixas ou nulas. Neste contexto, após uma análise preliminar (Apêndice A), também reduzimos a escala original de 9 pontos para uma nova escala hedônica com 3 pontos: categoria 1 “rejeição” (originalmente notas de 1 a 3), categoria 2 “indiferença” (originalmente notas de 4 a 6), e a categoria 3 “aceitação” (originalmente notas de 7 a 9). Vale ressaltar que, além da IG, outras variáveis medidas na mesma escala foram obtidas, e que compõem, parcial ou integralmente, a IG – a saber: aparência (propriedades visíveis como o aspecto, cor, transparência, entre outras); aroma (perceptível pelo órgão via retro nasal durante a degustação); sabor (percebido, principalmente, através dos sentidos do gosto e olfato, também influenciado pelos efeitos táteis e térmicos); e textura (definida como a força requerida para romper uma substância entre os dentes molares).

Para a análise descritiva dos dados, utilizamos gráficos em escala Likert para verificação do comportamento dos dados, gráficos de barras de cada variável para análise do comportamento de cada variável resposta para os escores dos valores.

3.2 Modelos multinomiais

De acordo com estudos da área (AGRESTI, 2002; AGRESTI, 2007; FARAWAY, 2004; TOMPSON 2009), quando as respostas categóricas são ordenadas, que emergem naturalmente de respostas em escala Likert, podemos utilizar modelos multinomiais logito com razões de probabilidades proporcionais (*proportional odds logit model* – POLM). Nesses modelos, podemos usar uma ideia similar, análoga à regressão logística (Exemplo 3): tomamos um preditor linear $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ e fazemos em cada $\eta_{ij} = \text{logit}[P(Y_i \leq j)]$, para $i = \{1, \dots, n\}$ o índice relativo à observação na amostra ou réplica, e $j = \{1, \dots, k\}$ o índice assumido pela categoria. Note que a ordenação das categorias é explicitada pela desigualdade na medida de probabilidade; assim, os logitos são obtidos pelas probabilidades cumulativas

$$\text{logit}[P(Y \leq j)] = \log \frac{P(Y \leq j)}{1 - P(Y \leq j)} = \log \frac{\pi_1 + \dots + \pi_j}{\pi_{j+1} + \dots + \pi_k}.$$

Além disso, como se tratam de modelos cuja razão de chances é proporcional, temos que a estimativa do vetor de parâmetros $\boldsymbol{\beta}$ será a mesma para todas as k classes, de forma que variações em \mathbf{X} produzirão o mesmo tamanho de efeito na probabilidade acumulada de quaisquer duas classes adjacentes. Existem outros modelos multinomiais ordinais, que utilizam outras funções de ligação (probit, por exemplo), que permitem razão de chances não proporcionais (ao custo de graus de liberdade e maior número de parâmetros) ou que levam em consideração o risco no lugar da razão de chances (AGRESTI, 2002; AGRESTI, 2007; FARAWAY, 2004; TOMPSON, 2009). Neste estudo, entretanto, nos ocuparemos apenas de POLMs em que a matriz experimental \mathbf{X} tem, a princípio, estrutura de um delineamento em blocos casualizados, dada por

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix}
 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & ap_{1,0} & ar_{1,0} & sb_{1,0} & tx_{1,0} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 7 & ap_{1,7} & ar_{1,7} & sb_{1,7} & tx_{1,7} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 14 & ap_{1,14} & ar_{1,14} & sb_{1,14} & tx_{1,14} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 21 & ap_{1,21} & ar_{1,21} & sb_{1,21} & tx_{1,21} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 28 & ap_{1,28} & ar_{1,28} & sb_{1,28} & tx_{1,28} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 35 & ap_{1,35} & ar_{1,35} & sb_{1,35} & tx_{1,35} \\
 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & ap_{2,0} & ar_{2,0} & sb_{2,0} & tx_{2,0} \\
 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 7 & ap_{2,7} & ar_{2,7} & sb_{2,7} & tx_{2,7} \\
 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 14 & ap_{2,14} & ar_{2,14} & sb_{2,17} & tx_{2,14} \\
 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 21 & ap_{2,21} & ar_{2,21} & sb_{2,21} & tx_{2,21} \\
 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 28 & ap_{2,28} & ar_{2,28} & sb_{2,28} & tx_{2,28} \\
 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 35 & ap_{2,35} & ar_{2,35} & sb_{2,35} & tx_{2,35} \\
 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & ap_{3,0} & ar_{3,0} & sb_{3,0} & tx_{3,0} \\
 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 7 & ap_{3,7} & ar_{3,0} & sb_{3,7} & tx_{3,7} \\
 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 14 & ap_{3,14} & ar_{3,14} & sb_{3,14} & tx_{3,14} \\
 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 21 & ap_{3,21} & ar_{3,21} & sb_{3,21} & tx_{3,21} \\
 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 28 & ap_{3,28} & ar_{3,28} & sb_{3,28} & tx_{3,28} \\
 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 35 & ap_{3,35} & ar_{3,35} & sb_{3,35} & tx_{3,35} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & ap_{4,0} & ar_{4,0} & sb_{4,0} & tx_{4,0} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & ap_{104,0} & ar_{104,0} & sb_{104,0} & tx_{104,0} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 7 & ap_{104,7} & ar_{104,7} & sb_{104,7} & tx_{104,7} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 14 & ap_{104,14} & ar_{104,14} & sb_{104,14} & tx_{104,14} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 21 & ap_{104,21} & ar_{104,21} & sb_{104,21} & tx_{104,21} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 28 & ap_{104,28} & ar_{104,28} & sb_{104,28} & tx_{104,28} \\
 1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 35 & ap_{104,35} & ar_{104,35} & sb_{104,35} & tx_{104,35}
 \end{bmatrix},$$

em que a primeira coluna está associada ao intercepto do modelo, as colunas 2 a 104 denotam os efeitos do participante (blocos), a 105ª coluna representa os tratamentos quantitativos fornecidos pelas diferentes concentrações de FSJ, e colunas nas posições 106 a 109 representam, respectivamente, os valores apontados pelos provadores das variáveis sensoriais (aparência, aroma, sabor e textura).

Os procedimentos de ajuste de modelos neste estudo foram divididos em duas etapas, uma com objetivo de realizar inferências com base em modelo único e outra com o objetivo de realizar inferência utilizando diversos modelos simultaneamente (multimodelo). Em ambas as etapas, utilizamos o conjunto completo de dados e ajustamos todos os possíveis modelos com base no conjunto potência das covariáveis presentes na matriz \mathbf{X} adicionada dos valores de FSJ ao quadrado, em abordagem semelhante à de Lima *et al.* (2022).

Na etapa 1, obtivemos os AICs dos modelos que apresentaram convergência e escolhemos a composição de preditores do modelo com menor valor de AIC. Já na etapa 2, ponderamos as estimativas obtidas por todos os modelos ajustados pelos respectivos pesos de

Akaike e procedemos, também, com a ponderação considerando apenas os modelos substancialmente influentes. Isto se justifica pelo fato de que existiram modelos que não convergiram, aqueles que geraram valores não numéricos, e alguns cujos pesos se aproximam de zero.

3.3 Validação cruzada

Segundo Friedman, *et al.* (2001), o método de validação cruzada é o mais amplamente usado para avaliar os erros de predição. Muito utilizada em aprendizado estatístico de máquinas, a validação cruzada tem o objetivo de testar a capacidade de previsão do modelo para novos dados, que não foram utilizados para estimar os parâmetros, com a finalidade verificar problemas como sobreajuste (*overfitting*) e de viés. Uma vez definido um modelo final (ou um conjunto de modelos finais) é importante então, obter sua precisão e acurácias práticas, isto é, o seu desempenho para um conjunto de dados inéditos (JAMES, *et al.* 2013; FRIEDMAN, *et al.* 2001).

As técnicas de validação cruzada usadas mais conhecidas são o *hold-out*, o *k-fold* e o *leave-one-out* (LOOCV). O método *hold-out* é possivelmente a técnica mais simples e é baseada na divisão do conjunto total de dados em dois subconjuntos disjuntos, um para estimação dos parâmetros, etapa de “treinamento”, e outro para validação, etapa de “teste”. Depois de particionados os conjuntos, realizamos a estimação dos parâmetros do(s) modelo(s) final(is) utilizando os dados da etapa de treinamento, procedemos com a predição dos dados da etapa de teste e, finalmente, calculamos o erro de predição.

No método *k-fold*, dividimos aleatoriamente o conjunto em k grupos de mesmo tamanho. A primeira dobra (*fold*) é tratada como um conjunto de validação e o método é reaplicado nas $k - 1$ dobras restantes. O erro quadrático médio é, então, calculado nas observações na dobra retida. Este procedimento é repetido k vezes; cada vez, um grupo diferente de observações é tratado como um conjunto da etapa de teste. Este processo resulta em k estimativas do erro quadrático médio do teste e a estimativa de *CV* é calculada pela média desses k valores (JAMES *et al.* 2013).

O método de validação cruzada *leave-one-out* (LOOCV) envolve divisão entre o conjunto de dados em duas partes. Entretanto, em vez de criar dois subconjuntos de tamanho comparável, uma única observação (x_1, y_1) é usada para o conjunto de validação e as observações restantes $\{(x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$ constituem o conjunto de treinamento. Podemos entender como método *leave-one-out*, um caso específico do *k-fold*, com $k = n$, onde n é

igual ao número total de observações. Isto, conseqüentemente, fornece n erros quadráticos; este método é indicado apenas quando existem poucas observações no conjunto de dados (JAMES *et al.* 2013).

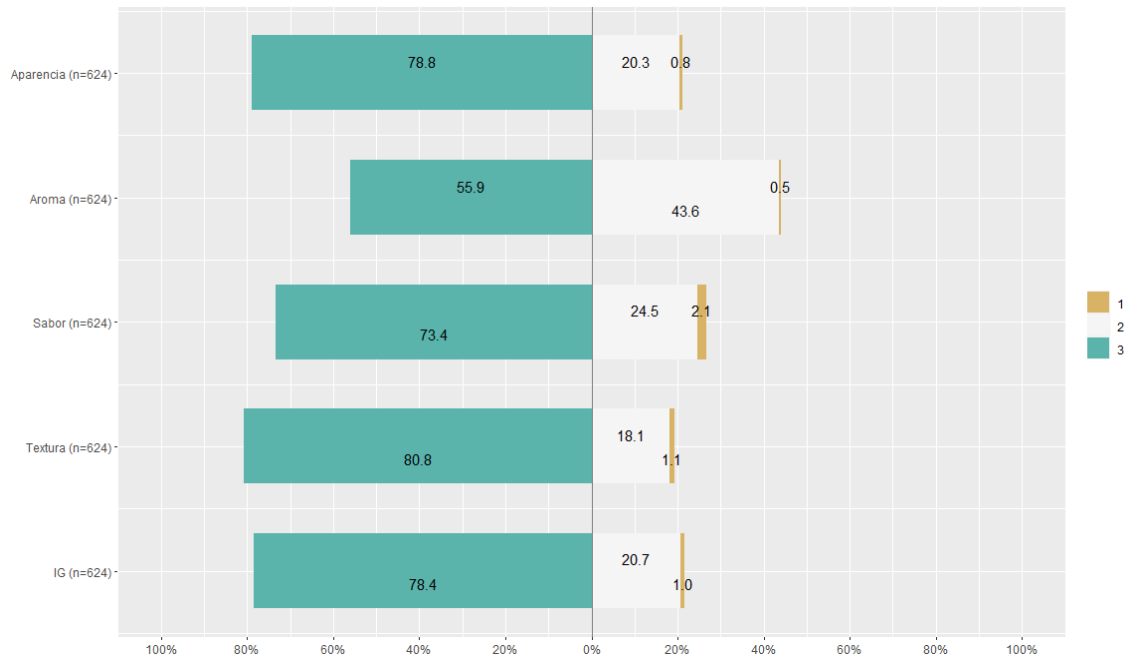
Neste estudo, adotamos uma técnica de *hold-out* adaptada, aplicando uma validação cruzada estratificada por provedor, ou seja, dentro do conjunto dos provedores, sorteamos uma fração dos dados para o ajuste de todos os possíveis modelos (veja Seção 3.2). As observações foram estratificadas de acordo com o fator de bloco “provedor”, utilizando para diferentes proporções para os dados de treino (ajuste do modelo), a saber, 30%, 50%, 70% e 90% do total de observações. Cada uma dessas proporções foi repetida mil vezes e, em cada repetição, calculamos os acertos das predições realizadas via modelo único (MU) e via multimodelo (MM) – isto é, cada acerto do modelo (predição do IG igual à categoria real do conjunto de dados restantes, não utilizados no processo de ajuste) foi atribuído o “1” e, a cada erro, foi atribuído “0”. A partir desses resultados, calculamos as médias dos acertos de cada tipo de abordagem (MU ou MM) e obtivemos as frequências dos casos em que as predições via MM foram melhores que via MU, piores ou apresentaram igual desempenho.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Análise descritiva

Inicialmente para análise em escala Likert, podemos observar na Figura 1 que a maior concentração de escores está na categoria 3, ou seja, do ponto de vista prático que a maioria dos provadores gostam da barra de cereal, mesmo em diferentes quantidades 0g, 7 gramas, 14 g, 21g, 28g e 35g de adição da FSJ. Aparência, textura e impressão global são as que mais detêm percentuais acima dos 78%, seguidas de Sabor com 73,4% e aroma com 55,9% (um fator importante para a melhora do produto).

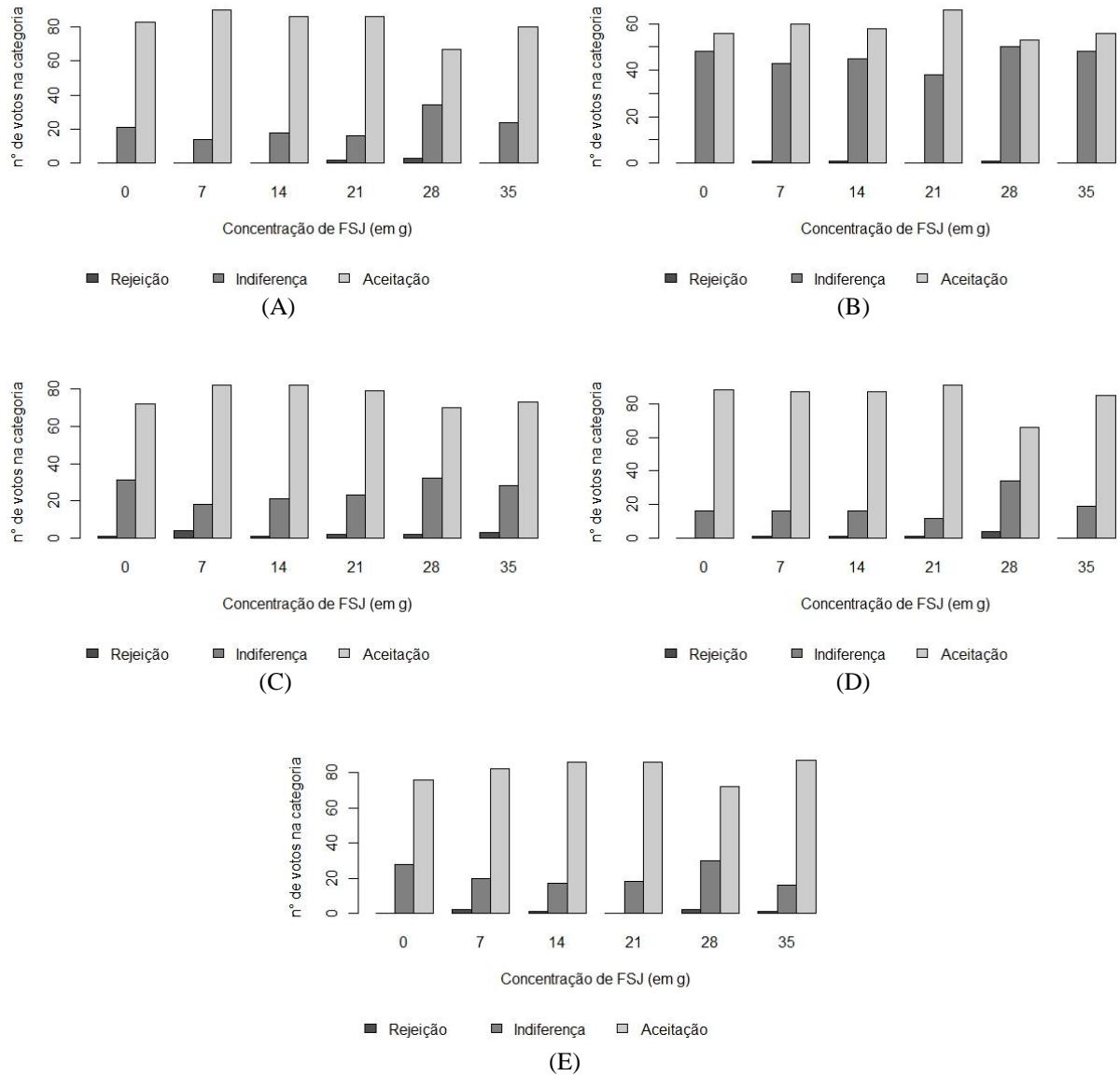
Figura 1 – Disposição em escala Likert para os dados com as notas categorizadas em três níveis: 1 (rejeição- notas de 1 a 3), 2 (indiferença - notas de 4 a 6) e 3 (aceitação -notas de 7 a 9) para as variáveis sensoriais.



Fonte: do autor.

Ao observarmos a Figura 2, podemos perceber que os consumidores tendem a gostar da barra de cereal, reafirmando a aceitação do produto. Na Figura 2A, houve consumidores que pontuaram “rejeição” (categoria 1) em se tratando da aparência das barras de cereal que continham 21 g e 28 g de FSJ. Isso sugere evidências de não aceitação do produto com essas concentrações ou que houve indiferença sobre a aparência com essas concentrações, que podem potencialmente interferir na decisão de compra pelos consumidores, uma vez que o aspecto visual (aparência) é determinante (DAVIS *et al.* 2017). Quanto ao aroma (Figura 2B), uma quantidade maior de votos em de indiferença (categoria 2) se comparadas com as demais variáveis com pontuações nítidas 0g, 28 g e 35 g de FSJ, porém a pontuação em 0g sugere que o aspecto pode não sofrer influências da concentração e sim ser um fator que causa indiferença entre os consumidores ou que as adições entre de 7 a 21g melhora o aroma do produto. No sabor (Figura 2C), notamos que foi a variável pontuou mais no sentido de não gostar dos consumidores nas concentrações 0g, 7g, 14g, 21g, 28g e 35g do que as demais. Nas Figuras 2A-E, a concentração 28 g foi a que mostrou consumidores que não gostaram em todas as variáveis, mostrando, assim, evidências, a serem confirmadas por métodos inferenciais, que essa concentração não promoveu boa aceitação das barras de cereal.

Figura 2 – Gráfico de barras para as categorias das notas 1 a 3, 4 a 6 e 7 a 9 das variáveis. por dados categorizados por três grupos de notas sendo cada grupo representado por 1 (notas de 1 a 3), 2 (notas de 4 a 6) e 3(notas de 7 a 9) atribuídos de acordo com as quantidades de FSJ (0, 7, 14, 21, 28 e 35g) para os 104 provedores julgando (A) Aparência, (B) Aroma, (C) Sabor, (D) Textura, (E) IG.



Fonte: do autor.

4.2 Inferência baseada em modelo único

Os valores na Tabela 2 apresentam os AICs de todos os modelos ajustados à variável IG. Houve modelos que não convergiram e notamos que alguns dos modelos, que apresentaram os menores valores de AIC, produziram valores não numéricos – isto limita os processos de estimação e predição. Assim, o modelo selecionado teve o preditor composto por Aparência+Aroma+Sabor+Textura+FSJ² com AIC = 331,0.

Tabela 2 – Resultados em ordem crescente do AIC do modelo único para os modelos do IG como variável resposta e as demais como predictoras.

Modelo	Preditor	AIC	Modelo	Preditor	AIC	Modelo	Preditor	AIC
95	ap+ar+sa+te+fsj ²	331,0	14	pr+ar+sa	436,9	4	pr+ap+fsj	624,1
63	ap+ar+sa+te+fsj	331,1	53	ar+te+fsj	440,4	36	pr+ap+fsj ²	624,6
127	ap+ar+as+te+fsj+fsj ²	332,9	85	pr+ap+te+ fsj ²	441,6	68	pr+ap+fsj+fsj ²	625,6
31	ap+ar+sa +te	336,2	117	ar+te+fsj+ fsj ²	441,9	100	ap+fsj	637,1
91	ap+sa+te+fsj ²	340,6	73	sa+ fsj ²	442,4	35	ap+fsj ²	637,7
59	ap+sa+te+fsj	340,7	41	sa+fsj	442,9	67	ap	637,8
123	ap+sa+te+fsj+fsj ²	342,5	21	ar+te	443,3	3	ap+fsj+ fsj ²	638,9
61	ar+sa+te+fsj	343,2	9	sa	443,7	99	pr	642,5
93	ar+sa+te+fsj ²	343,2	105	sa+fsj+ fsj ²	444,3	2	pr+fsj	644,0
125	ar+sa+te+fsj+fsj ²	345,1	74	pr+sa+ fsj ²	452,1	34	pr+ fsj ²	644,3
29	ar+sa+te	346,0	42	pr+sa+fsj	453,2	66	pr+fsj+ fsj ²	645,4
27	ap+sa+te	347,6	106	pr+sa+fsj+fsj ²	453,4	98	intercepto	704,9
57	sa+te +fsj	359,0	10	pr+sa	453,5	1	fsj	706,4
89	sa+te+ fsj ²	359,4	51	p+te+fsj	461,6	33	fsj ²	706,6
121	sa+te+fsj+ fsj ²	361,0	115	ap+te+fsj+fsj ²	463,2	65	fsj+fsj ²	708,0
25	sa+te	363,1	83	ap+te+ fsj ²	463,7	97	pr+ap+ar+fsj	2526,2
79	ap+ar+sa+ fsj ²	389,6	19	ap+te*	469,4	40	pr+ap+ar+ fsj ²	2660,2
47	ap+ar+sa+fsj	390,1	49	te+fsj	489,0	72	pr+ap+ar	2864,8
111	ap+ar+sa+fsj+ fsj ²	391,6	113	te+fsj+ fsj ²	490,1	8	pr+ap+sa	∞
15	ap+ar+sa	392,0	81	te+ fsj ²	490,9	12	pr+ap+ar+sa	∞
94	pr+ar+sa+te+ fsj ²	399,8	17	te*	493,9	16	pr+ap+te	∞
62	pr+ar+sa+te+fsj	401,0	54	pr+ar+te+fsj	498,9	20	pr+ap+ar+te	∞
126	pr+ar+sa+te+fsj+fsj ²	401,8	118	pr+ar+te+fsj+fsj ²	499,8	24	pr+ap+sa+ te	∞
90	pr+sa+te+ fsj ²	404,0	86	pr+ar+te+ fsj ²	501,0	28	pr+ap+ar+sa+te	∞
58	pr+sa+te+fsj	404,7	22	pr+ar+te	504,2	32	pr+ap+sa+fsj	∞
122	pr+sa+te+fsj+ fsj ²	406,0	50	pr+te+fsj	518,4	44	pr+ap+ar+sa+fsj	∞
30	pr+ar+as+te	407,0	114	pr+te+fsj+ fsj ²	518,8	48	pr+ap+te+fsj	∞
77	ar+sa+ fsj ²	408,8	82	pr+te+ fsj ²	520,5	52	pr+ap+ar+te+fsj	∞
13	ar+sa	409,2	18	pr+te	522,4	56	pr+ap+sa+te+fsj	∞
45	ar+sa +fsj	409,3	39	ap+ar+fsj	551,6	60	ap+ar+sa+te+fsj	∞
75	ap+sa+ fsj ²	410,4	7	ap+ar	551,7	64	pr+ap+sa+ fsj ²	∞
109	pr+sa+te	410,7	71	ap+ar+ fsj ²	552,1	76	pr+ap+ar+sa+fsj ²	∞
26	ar+sa+fsj+ fsj ²	410,7	103	ap+ar+fsj+ fsj ²	553,4	80	pr+ap+te+fsj ²	∞
43	ap+sa +fsj	411,1	104	pr+ap+ar+fsj+fsj ²	575,9	84	pr+ap+ar+te+ fsj ²	∞
107	ap+sa+fsj+ fsj ²	412,4	5	ar	578,5	88	pr+ap+sa+te+ fsj ²	∞
11	ap+sa	414,4	37	ar+fsj	579,7	92	pr+ap+ar+sa+te+fsj ²	∞
55	ap+ar+te+fsj	427,8	69	ar+ fsj ²	579,9	96	pr+ap+sa+fsj+ fsj ²	∞
87	ap+ar+te+ fsj ²	429,2	6	pr+ar	580,7	108	pr+ap+ar+sa+fsj+fsj ²	∞
119	ap+ar+te+fsj+ fsj ²	429,4	38	pr+ar+fsj	581,5	112	pr+ap+te+fsj fsj ²	∞
23	ap+ar+te	432,7	101	ar+fsj+ fsj ²	581,6	116	pr+ap+ar+te+fsj+fsj ²	∞
78	pr+ar+sa+ fsj ²	434,9	70	pr+ar+ fsj ²	582,1	120	pr+ap+sa+te+fsj+fsj ²	∞
46	pr+ar+sa +fsj	436,0	102	pr+ar+fsj+fsj ²	582,6	124	pr+ap+ar+sa+te+fsj+fsj ²	∞
110	pr+ar+sa+fsj+ fsj ²	436,4	4	pr+ap	623,7			

Fonte: do autor.

Legenda: Provador (pr), FSJ (fsj), FSJ² (fsj²), (pr), Aparência (ap), Aroma (ar), Sabor (as), Textura (te) e Impressão Global (ig). * Modelos que produziram NaNs; ∞: modelos que não convergiram à série de dados.

Dos valores na Tabela 3, encontramos os valores para Intercepto 1|2 que é a probabilidade para o logito de uma faixa de valores menor ou igual que 1 (isto é, $\text{logito}[Pr(Y \leq 1)]$), também de igual raciocínio para 2|3 (isto é, $\text{logito}[Pr(Y \leq 2)]$). Na Tabela 3 também estão disponíveis as estimativas dos parâmetros associados às variáveis predictoras do modelo (aparência, aroma, sabor, textura e FSJ²), seus respectivos erros-padrão e os valores da estatística Z para o Teste de Wald.

Tabela 3 – Resultados das estimativas dos parâmetros do modelo final selecionado para variável IG como resposta.

Parâmetro		Estimativa	Erro Padrão	Estatística Z
Intercepto para o nível 1 2	β_{01}	2,89	0,89	3,25
Intercepto para o nível 2 3	β_{02}	9,39	1,23	7,63
Efeito do segundo nível de aparência	β_{12}	1,38	0,45	3,04
Efeito do terceiro nível de aparência	β_{13}	2,63	0,45	5,80
Efeito do segundo nível de aroma	β_{22}	0,83	0,30	2,75
Efeito do terceiro nível de aroma	β_{23}	2,04	0,33	6,26
Efeito do segundo nível de sabor	β_{32}	1,19	0,80	1,48
Efeito do terceiro nível de sabor	β_{33}	4,14	0,82	5,03
Efeito do segundo nível de textura	β_{42}	2,10	1,03	2,03
Efeito do terceiro nível de textura	β_{43}	4,62	1,07	4,32
Efeito de FSJ^2	β_5	0,001	0,0003	2,66

Fonte: do autor.

Baseando-se nessas estimativas, é possível obter, por exemplo, a probabilidade estimada de que um IG apresente aceitação “indiferença” (categoria 2), dadas as observações de aparência na categoria 3, sabor na categoria 2, e aroma e textura ambas na categoria 1, e com concentração de FSJ de 14,5 g. Para tal, fazemos

$$P(Y = 2) = \frac{e^{\beta_{02} - [\beta_{13} + \beta_{32} + \beta_5 x^2]}}{1 + e^{\beta_{02} - [\beta_{13} + \beta_{32} + \beta_5 x^2]}} - \frac{e^{\beta_{01} - [\beta_{13} + \beta_{32} + \beta_5 x^2]}}{1 + e^{\beta_{01} - [\beta_{13} + \beta_{32} + \beta_5 x^2]}}$$

para calcular a probabilidade. Numericamente,

$$\hat{P}(Y = 2) = \frac{e^{9,39 - [2,63 + 1,19 + 0,001 \cdot 14,5^2]}}{1 + e^{9,39 - [2,63 + 1,19 + 0,001 \cdot 14,5^2]}} - \frac{e^{2,89 - [2,63 + 1,19 + 0,001 \cdot 14,5^2]}}{1 + e^{2,89 - [2,63 + 1,19 + 0,001 \cdot 14,5^2]}} = 0,7530;$$

então, temos 75,3% de chance estimada de que ocorra o evento.

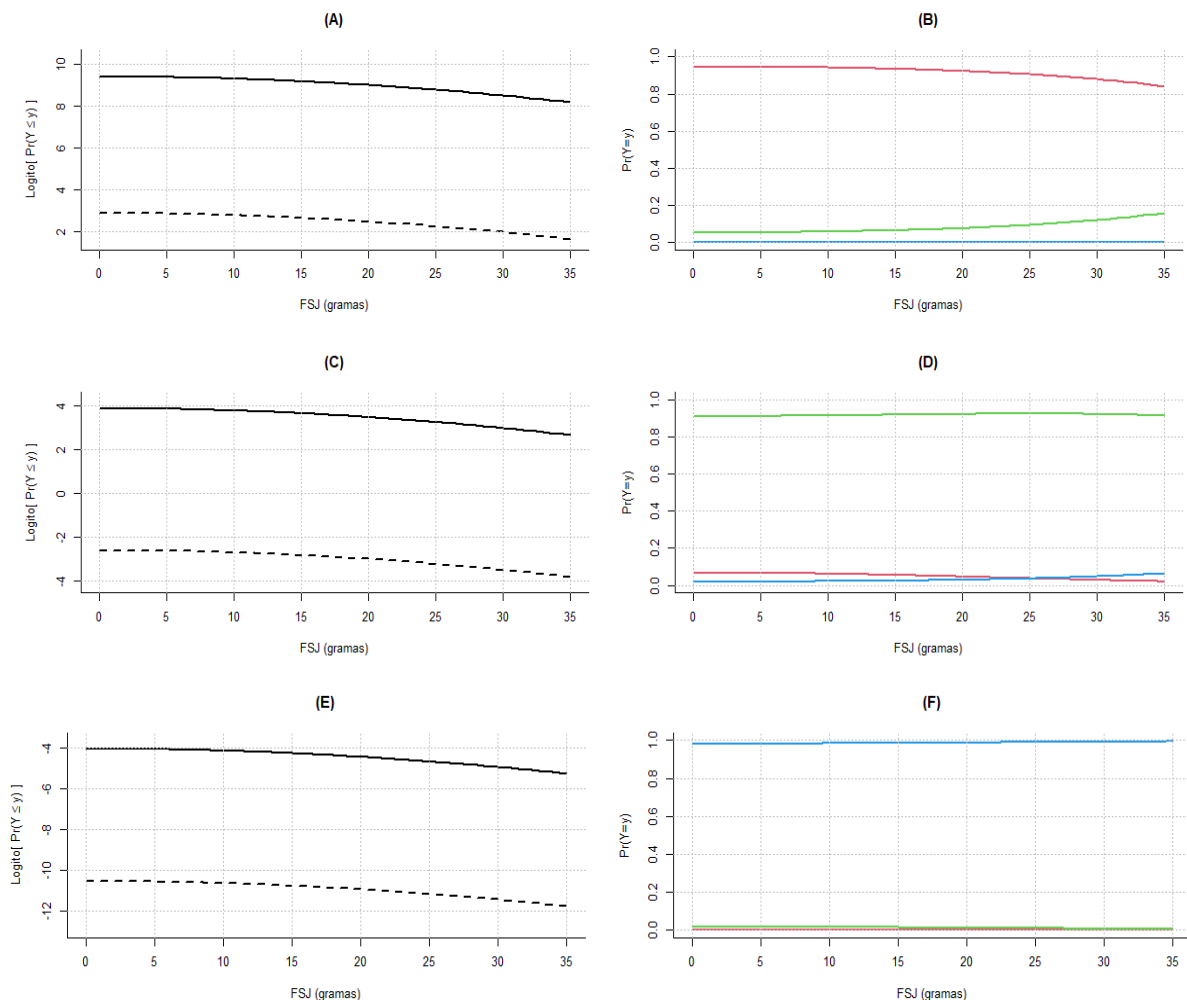
Os gráficos da Figura 3 evidenciam o ramo de parábola e seus respectivos sigmóides de três combinações das covariáveis em seus três níveis. Mantendo aparência, aroma, sabor e textura votados em “rejeição”, para uma concentração de 30 g de FSJ nas barras de cereal, por exemplo, verificamos na Figura 3A que o logaritmo da razão de chances para a impressão global para “rejeição” (linha tracejada) é de 2, fornecendo $e^2=7,39$ vezes mais chances de a nota de IG ser “rejeição” do que “indiferença” ou aceitação e percebemos para a mesma quantidade que o logito assume valores superiores a 8, que nos dá e^8 , que são 2981 vezes mais chances de a votação ser em “rejeição” em relação a “aceitação” (linha contínua).

Na Figura 3B, a linha superior (vermelha) mostra que, se todas as votações forem “rejeição” (1º nível) para as covariáveis, a probabilidade de a impressão global ser votada em rejeição é superior a 80% em todas as concentrações, enquanto as linhas dos sigmóides inferiores mostram que a probabilidade de a impressão global ser votada como “indiferença” ou “aceitação” são inferiores a 20%. Na Figura 3C, com as covariáveis todas fixadas em

“indiferença”, os logitos assumem valores negativos para “rejeição” e valores entre 2 e 4 para os que votariam no máximo em “indiferença”.

As probabilidades associadas a esses valores de logito estão disponíveis na Figura 3D e se aproximam de 0 para a votação em “rejeição” (linha em vermelho), à medida que aumentamos as concentrações de FSJ. Similarmente, as Figuras 3E e 3F apresentam as covariáveis fixadas em “aceitação”, implicando em probabilidades estimadas de que o IG assumira valor na categoria 3 próximas de 100%.

Figura 3 – Gráficos do modelo quadrático dos logitos da razão de chances.



Fonte: do autor.

Legenda: (linhas tracejadas: $y \leq 1$; linhas contínuas: $y \leq 2$) e probabilidades para o IG de acordo com as concentrações de FSJ (linhas vermelhas: “rejeição”; linhas verdes: “indiferença”; linhas azuis: “aceitação”). (A) logito para o IG mantendo-se todas as covariáveis no 1º nível, (B) probabilidades das três categorias de IG mantendo-se as covariáveis no 1º nível, (C) logito para o IG mantendo-se todas as covariáveis no 2º nível, (D) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as covariáveis no 2º nível, (E) logito para o IG mantendo-

se todas as covariáveis no 1º nível, (F) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as covariáveis no 3º nível.

Para essas três combinações dos fatores, podemos inferir que os preditores tendem a manter a impressão global na categoria em as componentes aparência, aroma, sabor e textura são votadas na maioria.

4.3 Inferência Multimodelo

Utilizando os valores de AIC para cada modelo na Tabela 2, foi possível ponderar os valores das estimativas dos parâmetros para inferência multimodelo (Tabela 4). Note que as estimativas associadas aos efeitos de provador não estão presentes na Tabela 4 por terem apresentado valores próximos de zero (variando entre $-3,36 \cdot 10^{-14}$ e $4,48 \cdot 10^{-14}$).

Tabela 4 – Estimativas multimodelo dos parâmetros, ponderadas por pesos de Akaike.

Parâmetro		Estimativa	Erro Padrão	Estatística Z
Intercepto para o nível 1 2	β_{01}	3,01	0,89	3,25
Intercepto para o nível 2 3	β_{02}	9,46	1,23	7,63
Efeito do segundo nível de aparência	β_{12}	1,39	0,45	3,04
Efeito do terceiro nível de aparência	β_{13}	2,61	0,45	5,80
Efeito do segundo nível de aroma	β_{22}	0,92	0,30	2,75
Efeito do terceiro nível de aroma	β_{23}	2,13	0,33	6,26
Efeito do segundo nível de sabor	β_{32}	1,19	0,80	1,48
Efeito do terceiro nível de sabor	β_{33}	4,12	0,82	5,03
Efeito do segundo nível de textura	β_{42}	2,03	1,03	2,03
Efeito do terceiro nível de textura	β_{43}	4,55	1,07	4,32
Efeito de FSJ	β_5	0,016	0,0003	2,66
Efeito de FSJ ²	β_6	0,0005	0,0003	2,66

Fonte: do autor.

Assim, de forma similar ao problema apresentado na Seção 4.2, podemos obter a probabilidade multimodelo estimada de que um IG apresente aceitação “indiferença” (categoria 2), dadas as observações de aparência na categoria 3, sabor na categoria 2, e aroma e textura ambas na categoria 1, e com concentração de FSJ de 14,5 g. Utilizando as estimativas ponderadas por pesos de Akaike, obtemos

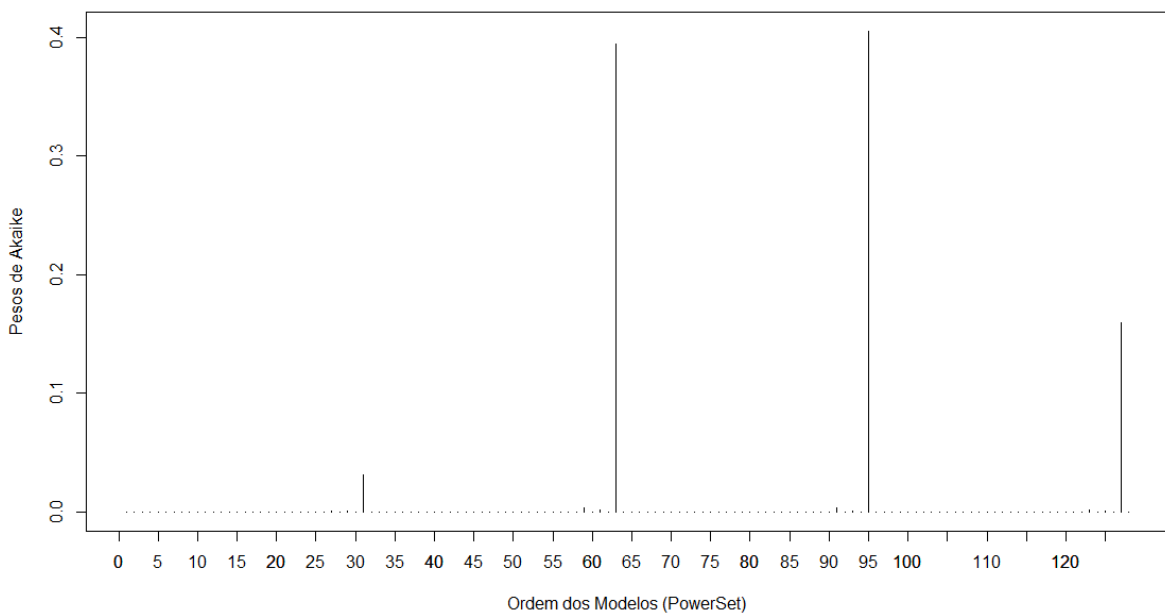
$$\hat{P}(Y = 2) = \frac{e^{9,46 - [2,61 + 1,19 + 0,016 \cdot 14,5 + 0,0005 \cdot 14,5^2]}}{1 + e^{9,46 - [2,61 + 1,19 + 0,016 \cdot 14,5 + 0,0005 \cdot 14,5^2]}} - \frac{e^{3,01 - [2,61 + 1,19 + 0,016 \cdot 14,5 + 0,0005 \cdot 14,5^2]}}{1 + e^{3,01 - [2,61 + 1,19 + 0,016 \cdot 14,5 + 0,0005 \cdot 14,5^2]}} = 0,7504$$

então, temos 75,04% de chance de que IG assuma “indiferença” sob essas condições. Percebemos que as abordagens por modelo único e por multimodelo forneceram resultados próximos para as probabilidades estimadas nos cenários da avaliados da Figura 4, então

movemos os gráficos correspondentes obtidos via multimodelo foram movidos para o Anexo (Figura B1).

Os pesos de Akaike utilizados para ponderar as estimativas dos parâmetros dispostas na Tabela 4 podem ser visualizados na Figura 4, onde percebemos que quatro desses modelos foram os mais influentes. O 31º modelo apresentou $\omega_{31} = 0,031$; o 63º apresentou modelo $\omega_{63} = 0,394$; o 95º modelo apresentou $\omega_{95} = 0,404$; e, por fim, o 127º apresentou $\omega_{127} = 0,159$. Assim, de acordo com a Tabela 1, temos que $\Delta_{31} = 5,15$ (consideravelmente menos substancial), $\Delta_{63} = 0,05$ (substancial), $\Delta_{95} = 0$ (substancial), $\Delta_{127} = 1,86$ (substancial).

Figura 4 – Gráfico com os valores dos Pesos de Akaike (ω_i), sendo i de 1 a 128, correspondente aos modelos que compõem o multimodelo do conjunto completo de dados para inferência. Modelos seguem a ordem estabelecida pelo *Power Set* (conjunto potência).



Fonte: do autor.

Podemos visualizar na Tabela 5 os coeficientes dos quatro modelos mais influentes multiplicados por seus respectivos pesos, que, combinados, correspondem a 98% de influência. Podemos perceber que, em todos os quatro modelos, há a participação dos quatro preditores sensométricos Aparência, Aroma, Sabor e Textura. O modelo 31, com menor peso de Akaike, não inclui nem FSJ e nem FSJ^2 em seu preditor; o modelo 63 inclui apenas o termo linear de FSJ ; o modelo 95, com maior peso de Akaike, conta apenas com FSJ^2 ; e o modelo 127 inclui ambos, FSJ e FSJ^2 .

Ao comparar os resultados da Tabela 5 com os da Tabela 4, percebemos pequenas diferenças nos valores das estimativas dos parâmetros, sendo que os valores são iguais em β_{22}

e β_{23} . As predições multimodelo considerando apenas os modelos mais influentes (Figura B2) também seguem muito próximas às curvas obtidas por modelo único (Figura 4) e multimodelo global (Figura B1).

Tabela 5 – Parâmetros dos quatro modelos mais influentes para inferência multimodelo com os seus respectivos pesos. A ponderação pelos respectivos pesos está disposta na última linha da tabela.

Coefficientes		Modelo 31	Modelo 63	Modelo 95	Modelo 127	Multimodelo
Efeito do segundo nível de aparência	β_{12}	1,25	1,42	1,38	1,38	1,38
Efeito do terceiro nível de aparência	β_{13}	2,36	2,64	2,62	2,61	2,58
Efeito do segundo nível de aroma	β_{22}	1,35	0,99	0,83	0,98	0,92
Efeito do terceiro nível de aroma	β_{23}	2,61	2,20	2,04	2,19	2,13
Efeito do segundo nível de sabor	β_{32}	1,19	1,19	1,19	1,18	1,17
Efeito do terceiro nível de sabor	β_{33}	4,06	4,10	4,14	4,11	4,09
Efeito do segundo nível de textura	β_{42}	1,70	1,99	2,10	1,97	1,99
Efeito do terceiro nível de textura	β_{43}	4,09	4,52	4,62	4,49	4,52
Efeito de FSJ	β_5	-	0,03	-	0,01	0,0154
Efeito de FSJ^2	β_6	-	-	0,001	0,0005	0,000409
Intercepto para a classe 1 2	β_{01}	2,52	3,19	2,89	3,04	2,99
Intercepto para a classe 2 3	β_{02}	8,72	9,60	9,40	9,46	9,37
Peso de Akaike	ω_i	0,03	0,39	0,40	0,16	0,98

Fonte: do autor.

4.4 Validação Cruzada

Há uma vantagem em usar o Multimodelo a partir dos resultados da Tabela 6 para esse conjunto de dados sensométricos. Essa vantagem, contudo, se torna menos expressiva à medida que aumentamos o número de dados para compor o modelo de ajuste para predição por validação cruzada.

É nítido que à medida que aumentamos os dados para treinamento, o multimodelo tende a diminuir a distância em relação ao modelo único, mesmo assim apresenta um número maior de casos em que foi melhor o modelo único. Já os casos em que o Multimodelo foi igual ao modelo único aumentam consideravelmente quando há menos dados para predição, vistos na Tabela 6.

Tabela 6 – Frequências absolutas (do total de 1000 repetições). Os percentuais dados nas colunas se referem aos percentuais dos dados de ajuste.

Casos		30%	50%	70%	90%
Multimodelo melhor que o Modelo Único	$MM > MU$	335	322	240	148
Multimodelo com o mesmo desempenho do Modelo Único	$MM = MU$	470	478	544	712
Multimodelo teve desempenho inferior ao Modelo Único	$MM < MU$	195	200	216	140

Fonte: do autor.

O ganho percentual da média de acertos ao usar o Multimodelo na Tabela 7, como esperado, tende ser menor ao usar menos dados para predição que podemos perceber na linha do ganho percentual ao usar Multimodelo (MM).

Tabela 7 – Resultados das taxas médias de acertos do Modelo Único (MU_{tx}), de acertos do Multimodelo (MM_{tx}) e do ganho percentual ao usar o multimodelo (MM_g), de acordo os respectivos percentuais dos dados de ajuste.

	30%	50%	70%	90%
MU_{tx}	0,8785	0,8860	0,8870	0,8896
MM_{tx}	0,8802	0,8860	0,8870	0,8898
MM_g	0,1668	0,1530	0,0630	0,0260

Fonte: do autor.

Para esse conjunto de dados, a partir dos modelos, se o conjunto para predição fosse pequeno, por parcimônia, poderíamos escolher o Modelo Único para predição. Entretanto, quanto maior a predição a ser feita, mais a necessidade de uso do Multimodelo ponderados por Pesos de Akaike para predição.

5 CONCLUSÃO

Como objetivo geral, conseguimos iniciar um panorama novo em Sensometria, fornecendo uma nova via de compreensão dessa natureza de conjunto de dados fazendo uma abordagem com dados multinomiais, com inferência multimodelo ponderados por pesos de Akaike e validação cruzada estratificada. A partir dos resultados do nosso conjunto de dados e revisão de literatura até aqui, podemos pensar que sempre haverá a possibilidade para dados sensométricos em escala hedônica (para provadores não treinados – escala Hedônica) o uso da modelagem com modelos lineares generalizados, fazer inferência dos parâmetros desses modelos, criar os modelos para predição para decidir sobre aceitação de esse ou mais produtos.

O ajuste da variável resposta impressão global como resposta de acordo com as covariáveis sob estudo utilizando tanto a abordagem usual, com base no melhor modelo, bem como pela abordagem multimodelo permitiu conduzir de forma clara a modelagem dos dados para que pudéssemos discutir todos os possíveis modelos ajustados a eles.

O uso dos modelos termos quadráticos nos modelos dos logitos junto com suas respectivas probabilidades abre muito espaço para pesquisas futuras para análise minuciosa de todas as suas combinações possíveis para o processo decisório na composição dos produtos que utilizam análise sensorial de quando os seus dados se modelam também com parábolas.

Dentre os objetivos específicos, que era o de verificar sobre as vantagens e desvantagens do uso da Inferência Multimodelo, fica claro ao final deste trabalho que não seria possível realiza-la sem ajuda de recursos computacionais, o que pode explicar o fato de ser uma metodologia que vem sendo aplicada mais recentemente.

A Inferência multimodelo apresenta uma melhora em relação aos resultados de modelo único, verificada por validação cruzada estratificada. Usar apenas os modelos com substancial relevância na inferência multimodelo é bem próximo de usar o conjunto com todos os modelos.

A inferência multimodelo tem que ser usada sempre que possível. Para estudos futuros podemos também pensar na hipótese de tornar o efeito do Provedor aleatório e conduzindo assim um estudo direcionado a Modelo Linear Generalizado Misto. Já do ponto de vista sensorial, podemos concluir que a barra de cereal, nas diferentes composições apresentadas, teve uma resposta de aceitação do consumidor.

REFERÊNCIAS

- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR12806**: Análise sensorial dos alimentos e bebidas: terminologia. Rio de Janeiro, 1993.
- AGRESTI, A. **Categorical data analysis**. 2nd ed. New Jersey: John Wiley, 2002.
- AGRESTI, A. **An introduction to categorical data analysis**. 2nd ed. New Jersey: John Wiley, 2007.
- AKAIKE, H. Information theory as an extension of the maximum likelihood principle. *In*: PETROV, B. N.; CSAKI, F. (ed.). **Second International symposium on information theory**. Budapest: Akademiai Kiado, 1973. p. 267–281.
- BERNARDI, L. K. **Inferência Multimodelos na predição de multiprodutos em povoamentos de Eucalyptus. sp.** 2020. 65f. Dissertação (Mestrado em Planejamento e Uso de Recursos Renováveis) – Universidade Federal de São Carlos, Sorocaba, 2020. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/12384>. Acesso em: 22 jan. 2022.
- BURNHAN, K. P.; ANDERSON, D. R. **Model Selection and multimodel inference – a practical theoretic approach**. 2nd ed. New York: Springer Verlag, 2002.
- BURNHAM, K. P.; ANDERSON, D. R. Multimodel Inference. **Sociological Methods & Research**. v. 33. n. 2, p. 261–304, 2004. doi:10.1177/0049124104268644.
- BOZDOGAN, H. Model selection and Akaike's information criterion (AIC): The general theory and its analytical extensions. **Psychometrika**, v. 52, p. 345–370, 1987.
- COVARRUBIAS, V. H.; VALENCIA, J. L. P.; VILLASEÑOR, H.A. **Inferencia multimodelo: cálculo de la talla media de madurez del ostión de roca striostrea prismatica en Nayarit, México**. México: Ciencia Pesquera, 2013. Disponível em: <https://www.inapesca.gob.mx/portal/documentos/publicaciones/REVISTA/Mayo2014/5-Hernandez-et-al-2014.pdf>. Acesso em: 15 feb. 2022.
- COX, D. R.; HINKLEY, D.V. **Theoretical statistics**. 3rd ed. Cambridge: Chapman and Hall, 1986.
- CHRISTENSEN, R. H. B; CLEAVER, G.; BROCKHOFF, P. B.. Statistical and Thurstonian models for the A-not A protocol with and without sureness. **Food Quality and Preference**, v. 22. n.6. p. 542–549, 2011. Disponível em: doi:10.1016/j.foodqual.2011.03.0. Acesso em: 20 Apr. 2020.
- DA CUNHA, D.T. *et al.* Differences between organic and conventional leafy green vegetables perceived by university students: Vegetables attributes or attitudinal aspects?. **British Food Journal**, v. 121, n. 7, p. 1579-1591, Mar. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1108/BFJ-08-2018-0503>. Acesso em: 20 Mar. 2020.
- DAVIS, B. *et al.* **Food and beverage management**. New York: Routledge, 2018.
- DEMÉTRIO, C. G. B., **Modelos lineares generalizados em experimentação agrônômica**. Piracicaba: ESALQ/USP, 2001. p. 01-57

FARAWAY, J. J. **Extending the linear model with R. Generalized linear, mixed effects and nonparametric regression models**. New York: Chapman & Hall/CRC; 2004. p. 106-148.

FELLER, W. **An introduction to probability theory and its applications**. 3rd ed. New York: John Wiley, 1968.

FERREIRA, E.B; OLIVEIRA, M.S. **Sensometria: uma abordagem com ênfase em Procrustes**. Santa Maria: UFRS, 2007. p.3-16.

FISHER, R. A. On the mathematical foundations of theoretical statistics. **Philosophical Transactions of the Royal Society**, London, v. 222, n. 22, p.309-368, 1922.

FRIEDMAN, J.; HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R. **The elements of statistical learning**. Londo,: Springer. 2001.

GIOLO, S. R. **Introdução à análise de dados categóricos com aplicações**. Londrina: Editora Edgard Blucher. 2017.

GRUEBER, C. E. *et al.* Multimodel inference in ecology and evolution: challenges and solutions. **Journal of Evolutionary Biology**, London, n. 4, p. 699–711, 2011. Disponível em: doi:10.1111/j.1420-9101.2010.02210.x. Acesso em: 20 Feb. 2022

JAMES, G. *et al.* **An introduction to statistical learning with applications in R**. California: Springer, 2013. p. 177-195.

JOHNSON, N. L. **Discrete multivariate distribution**. New York: John Willey, 1996. p. 31-84.

LIMA, F. A *et al.* Larval dispersal of Brachyura in the largest estuarine / marine system in the world. **PLoS One**, London, v. 9, n. 19, 2022.

LINK, W. A.; BARKER, R. J. Model weights and the foundations of multimodel inference. **Ecology**, v. 87. n. 10, p.2626–2635, 2006. Disponível em: doi:10.1890/0012-9658(2006)872626:mwatfo2.0.co;2. Acesso em: 15 May 2020.

MARINO, L.M. **Desenvolvimento e aceitabilidade de barra de cereal enriquecida com farinha de casca de jabuticaba (Myrciaria cauliflora)**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Nutrição) - Universidade Federal de Alfenas, 2017.

MCCULLAGH, P.; NELDER, J.A. **Generalized Linear Models**. 2nd ed. London: Chapman and Hall. 1985. p. 1-44

MELO, J.M. **Modelos para dados categorizados ordinais de ensaios sensoriais com delineamento em blocos incompletos**. Tese (Doutorado em Ciências) - Universidade de São Paulo, 2021.

MILLER, A.J. **Subset selection in regression**. London: Chapman and Hall, 1990.

NELDER, J. A.; WEDDERBURN, R. W. M. Generalized Linear Models. **Journal of the Royal Statistical Society A**, v. 135, n. 3, p. 370-384, 1972.

OLIVEIRA, S. N.; RODRIGUES, M. C. P.; Papel da Análise Sensorial como ferramenta de apoio no processo de desenvolvimento de produtos alimentícios. **Revista Educação Agrícola Superior**, v. 26, n. 1. p. 40-44, 2011.

PAIVA, A.P. *et al.* Characterization of food bars manufactured with agroindustrial by-products and waste. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 36, n. 3, p. 333-340, 2012.

R CORE TEAM. *R: A language and environment for statistical computing*. **R Foundation for Statistical Computing**, Vienna, 2020. Disponível em: <https://www.R-project.org>. Acesso em: 10 June 2021.

TEIXEIRA, L. V. Análise sensorial na indústria de alimentos. **Revista do Instituto de Laticínios “Cândido Tostes”**, v. 64, n. 366. p. 12-21, 2009.

TOMPSON, L. A. **R (and S-PLUS) Manual to accompany agresti’s categorical data analysis (2002)**. 2nd ed. London: Springer, 2009.

APÊNDICES

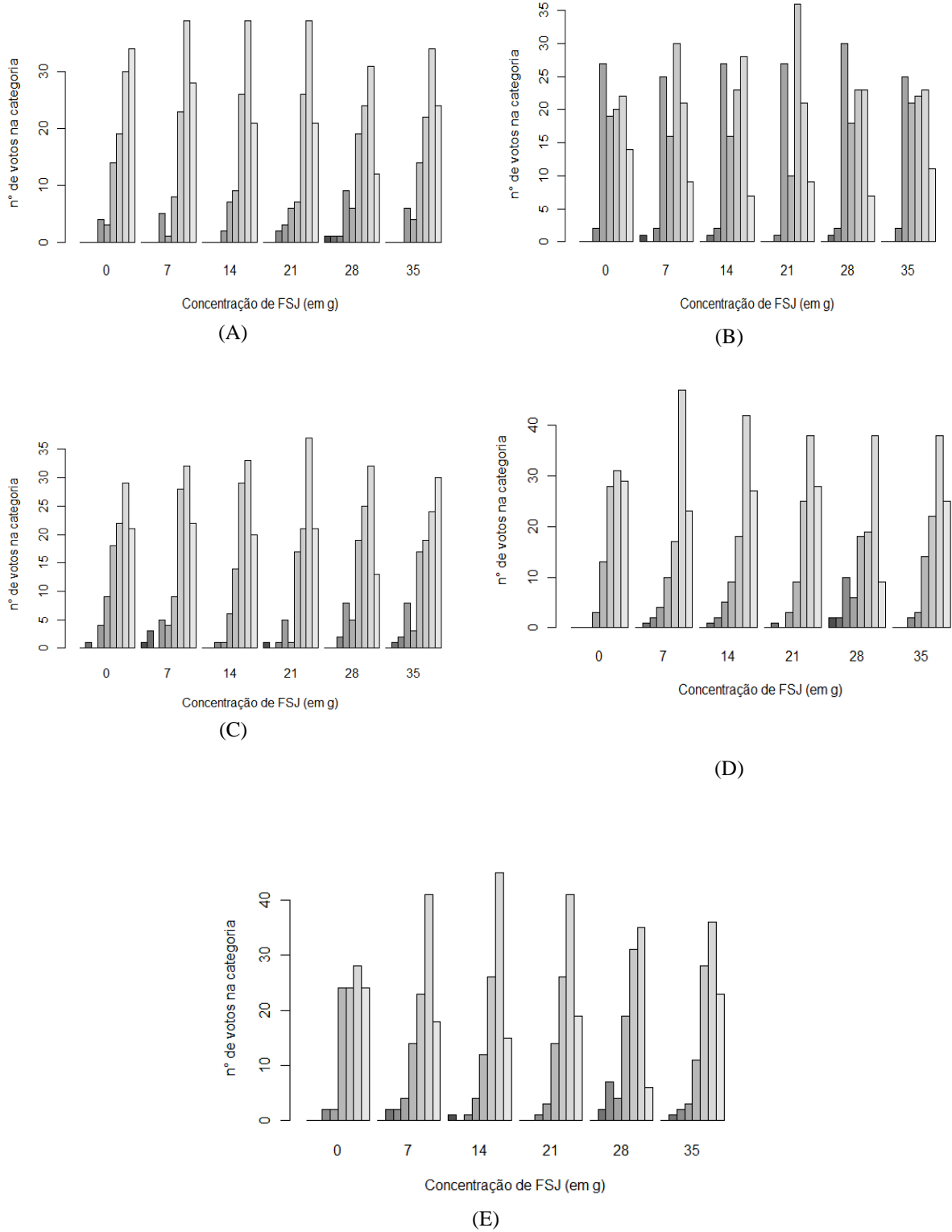
APÊNDICE A – Análises descritivas preliminares

Figura A1 – Disposição em escala Likert para os dados com as notas de 1 a 9 para as variáveis sensoriais da FSJ.



Fonte: do autor.

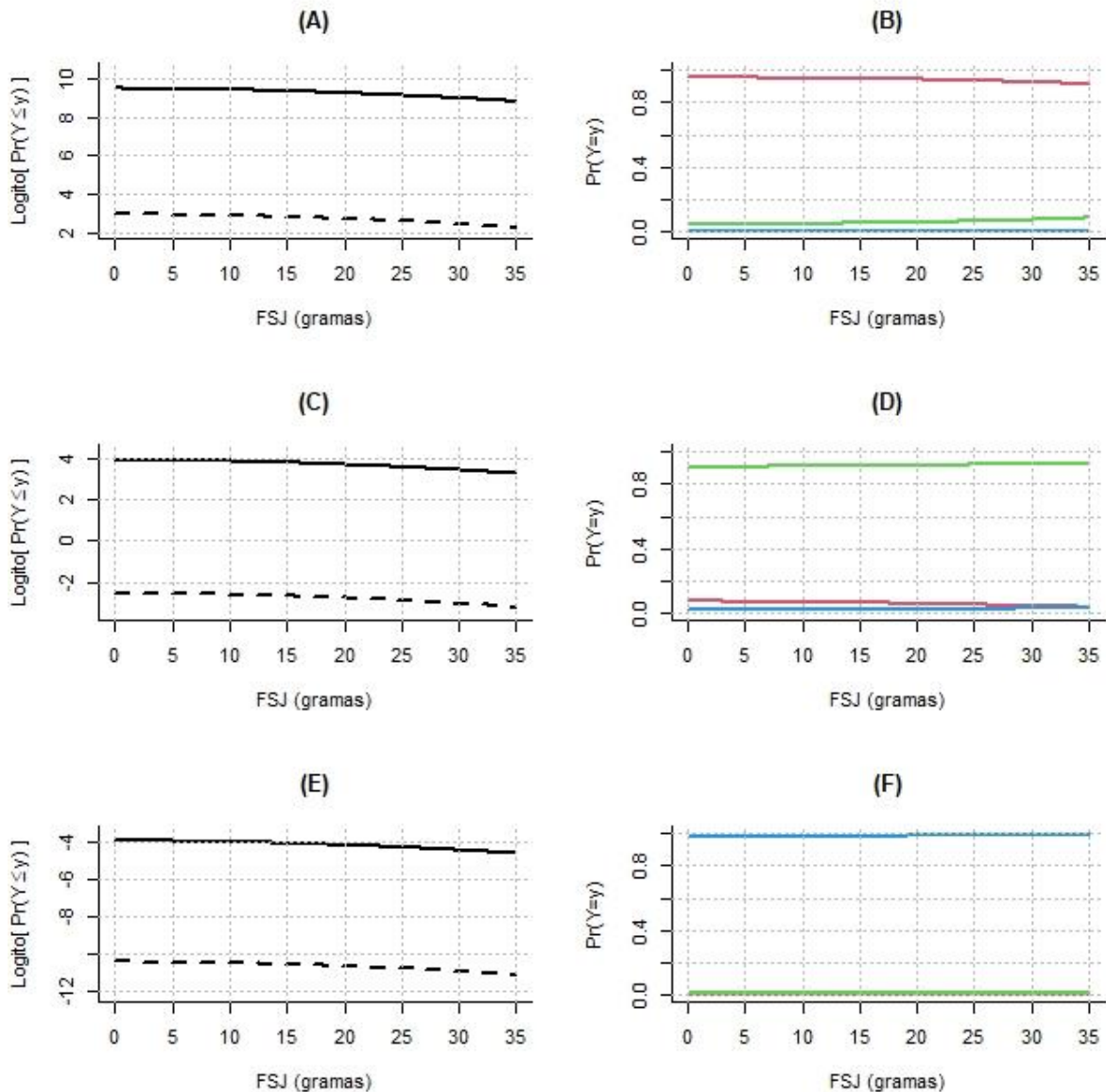
Figura A2 – Gráfico de barras dos dados por variável com Concentração FSJ (em gramas) x Número de Votos na categoria. Cada barra representa uma nota (de 1 a 9) atribuída de acordo com as quantidades de FSJ (0, 7, 14, 21, 28 e 35g) para os 104 provadores julgando (A) Aparência, (B) Aroma, (C) Sabor, (D) Textura (E) IG.



Fonte: do autor.

APÊNDICE B – Resultados da Inferência Multimodelo

Figura B1 – Gráficos das previsões multimodelo dos logitos da razão de chances.

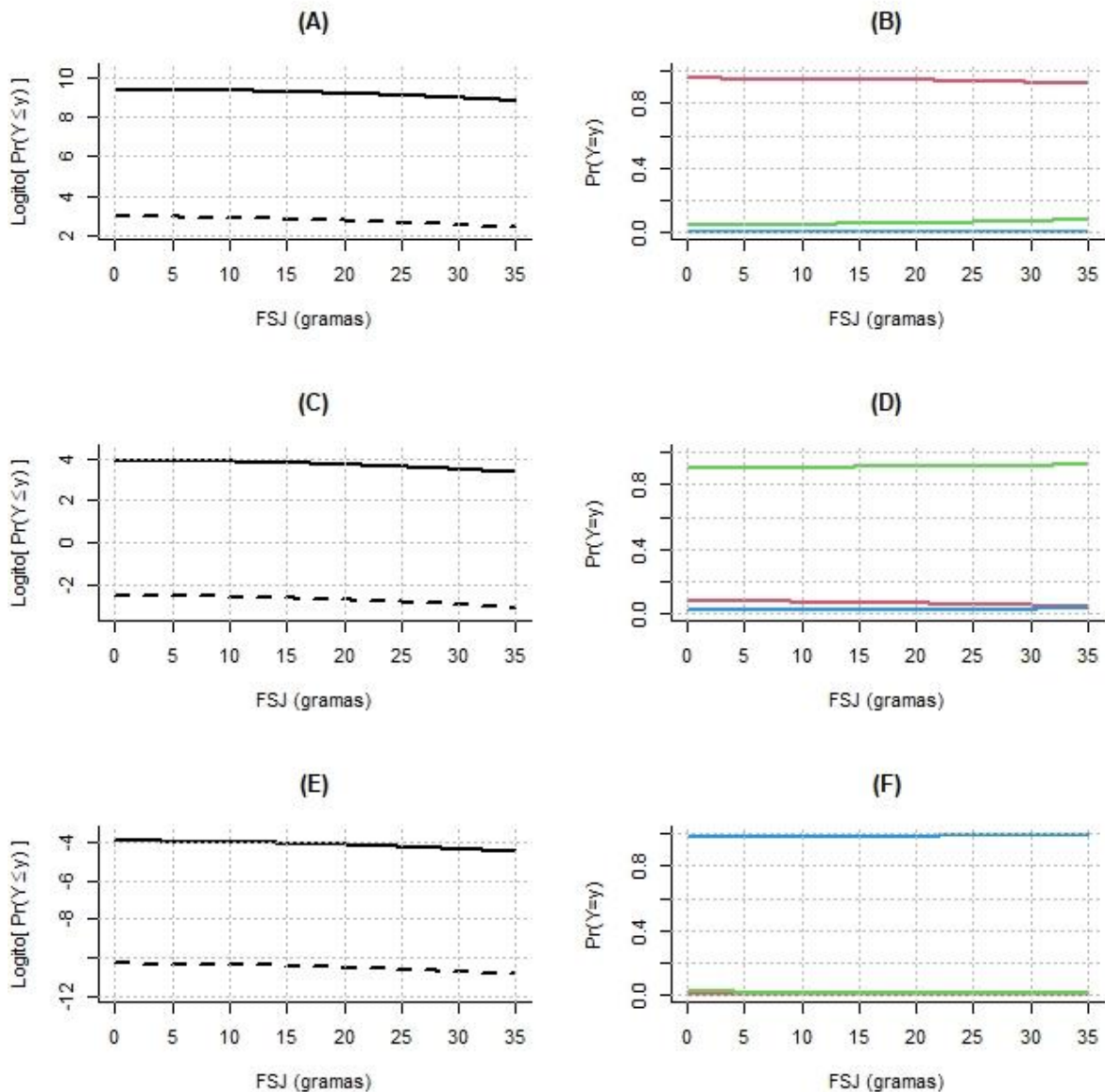


Fonte: do autor.

Legenda: (linhas tracejadas: $y \leq 1$; linhas contínuas: $y \leq 2$) e das probabilidades para o IG de acordo com as concentrações de FSJ (linhas vermelhas: “rejeição”; linhas verdes: “indiferença”; linhas azuis: “aceitação”). (A) logito para o IG mantendo-se todas as covariáveis no 1º nível, (B) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as covariáveis no 1º nível, (C) logito para o IG mantendo-se todas as covariáveis no 2º nível, (D) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as

covariáveis no 2º nível, (E) logito para o IG mantendo-se todas as covariáveis no 1º nível, (F) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as covariáveis no 3º nível.

Figura B2 – Gráficos das predições multimodelo considerando apenas modelos mais influentes dos logitos da razão de chances.



Fonte: do autor.

Legenda: (linhas tracejadas: $y \leq 1$; linhas contínuas: $y \leq 2$) e das probabilidades para o IG de acordo com as concentrações de FSJ (linhas vermelhas: “rejeição”; linhas verdes: “indiferença”; linhas azuis: “aceitação”). (A) logito para o IG mantendo-se todas as covariáveis no 1º nível, (B) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as covariáveis no 1º nível, (C) logito para o IG mantendo-se todas as covariáveis no 2º nível, (D) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as covariáveis no 2º nível, (E) logito para o IG mantendo-

se todas as covariáveis no 1º nível, (F) probabilidades dos três níveis para o IG mantendo-se as covariáveis no 3º nível.