



CAMILLA MARQUES BARROSO

**AMOSTRAGEM GIBBS E INLA PARA A MODELAGEM
DE TESTES TRIANGULARES**

**LAVRAS - MG
2017**

CAMILLA MARQUES BARROSO

**AMOSTRAGEM GIBBS E INLA PARA A MODELAGEM
DE TESTES TRIANGULARES**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para obtenção do título de Doutor.

Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho

Orientador

LAVRAS - MG

2017

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da
Biblioteca Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Barroso, Camilla Marques.

Amostragem Gibbs e INLA para a modelagem de testes tri-
angulares

Camilla Marques Barroso. – Lavras: UFLA, 2017.

99 p. : il.

Orientador: Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Lavras, 2017.

Bibliografia.

1. INLA. 2. MCMC. 3. Testes triangulares. I. Bueno Filho,
Júlio Sílvio de Sousa. II. Título.

CAMILLA MARQUES BARROSO

**AMOSTRAGEM GIBBS E INLA PARA A MODELAGEM
DE TESTES TRIANGULARES**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, área de concentração em Estatística e Experimentação Agropecuária, para obtenção do título de Doutor.

APROVADA em 25 de abril de 2017.

Prof. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho	UFLA-MG
Prof. Márcio Balestre	UFLA-MG
Profa. Thelma Sáfadi	UFLA-MG
Profa. Andréa Cristiane dos Santos Delfino	UFSJ-MG
Prof. Denismar Alves Nogueira	UNIFAL-MG

Dr. Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho
Orientador

LAVRAS - MG

2017

AGRADECIMENTOS

A Deus, pela vida;

À minha querida mãe Fátima, pelo exemplo, pelo amor e pela dedicação na boa educação;

Ao meu pai, José Pedro, pelas palavras de estímulo e confiança;

Aos meus irmãos, Renan e Louise, pelo companheirismo;

A todos os meus familiares e amigos, pelo apoio e carinho;

Ao meu marido, Rodrigo, pelo amor e parceria;

Ao meu orientador Júlio Sílvio de Sousa Bueno Filho, pelos conhecimentos e esclarecimentos intelectuais e morais confiados a mim, pela paciência e compreensão;

Aos professores pelas importantes contribuições nesta tese, especialmente aos professores da banca por aceitarem colaborar com seus conhecimentos neste projeto;

A todos funcionários pela colaboração e carinho;

À Universidade Federal de Lavras (UFLA) e ao Departamento de Ciências Exatas (DEX), pela oportunidade de cursar o doutorado;

À CAPES, pela concessão da bolsa de estudos, tornando financeiramente possível a realização desse sonho;

A todos que de alguma forma contribuíram, mesmo inconscientemente, para a realização deste trabalho.

MUITO OBRIGADA !

RESUMO

Em inferência bayesiana, em geral, para obter amostras da distribuição marginal a posteriori dos parâmetros é necessário resolver integrais complexas que muitas vezes não possuem solução analítica. A análise padrão usa métodos de simulação, como os métodos de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM) que permitem encontrar amostras das distribuições sem a necessidade de resolver algebricamente todos os cálculos. Esses métodos, em geral, obtêm excelentes resultados, porém necessitam de um elevado tempo computacional para apresentar convergência em modelos complexos. A aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA) é um método determinístico que pode ser uma alternativa para encontrar aproximações das distribuições marginais a posteriori dos parâmetros sem a necessidade de verificação de convergência e com menor esforço computacional. Abordamos a análise de um teste triangular replicado na análise sensorial considerando as duas formas de análise, MCCM e INLA. Ambos apresentaram bons resultados, no entanto a aproximação INLA retornou a análise em menor tempo computacional comparado ao método MCCM.

Palavras-chave: Inferência Bayesiana. INLA. MCCM. Testes triangulares.

ABSTRACT

In Bayesian inference, in order to obtain samples of the marginal posterior distribution of the parameters it is necessary to solve complex integrals that often have no analytical solution. The standard analysis uses simulation methods, such as Markov chain Monte Carlo (MCCM) methods that allow finding samples of the distributions without the need to algebraically solve all calculations. These methods, in general, obtain excellent results, but they require a high computational time to present convergence in complex models. The integrated nested Laplace approximation (INLA) is a deterministic method that can be an alternative to find approximations of the posterior marginal distributions of the parameters without the necessity of verification of convergence and with less computational effort. We approached the analysis of a triangular test replicated in the sensorial analysis considering the two forms of analysis, MCCM and INLA. Both presented good results, however the INLA approach returned the analysis in less computational time compared to the MCCM method.

Keywords: Bayesian Inference. INLA. MCMC. Triangular tests.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Respostas corretas em um teste triangular, dado que a percepção de a_2 está mais próxima de a_1 do que de b	22
Figura 2.2 – Respostas incorretas em um teste triangular, dado que a percepção de a_2 está mais próxima de b do que de a_1	22
Figura 2.3 – Ilustração da exploração da marginal a posteriori de σ_b^2 , encontrando pontos de alta densidade por reparametrização.	37
Figura 3.1 – Densidade a posteriori da (a) variância de provadores σ_b^2 e (b) do coeficiente de correlação intraclasse ρ	56
Figura 3.2 – Curvas médias estimadas para a proporção de acertos (linhas contínuas) e para os dados observados (linhas tracejadas) para cada adulterante considerando: (a) modelo que leva em conta correlações entre os efeitos de provador e (b) modelo que não leva em conta correlações entre os efeitos de provador. As curvas associadas aos adulterantes casca, milho e palha estão representadas em ambos os gráficos pelas cores preto, vermelho e verde, respectivamente.	57
Figura 3.3 – Estimativa média e intervalo de credibilidade 95% associado à habilidade dos provadores	60
Figura 3.1 – Curvas médias estimadas para a proporção de acertos (linha cheia) e para os dados observados (linhas tracejadas) para cada adulterante considerando o modelo com efeito aleatório de provador. As curvas associadas aos adulterantes casca, milho e palha estão representadas pelas cores preto, vermelho e verde, respectivamente.	74
Figura 3.2 – Estimativa média e intervalo de credibilidade associado aos provadores para os métodos MCCM e INLA.	76
Figura 3.3 – Histograma gerado pelas estimativas de σ_b^2 através do método MCCM e curva gerada através da aproximação da densidade de σ_b^2 pelo método INLA	77
Figura 3.4 – Histograma gerado pelas estimativas do método MCCM e curva gerada através da aproximação da densidade pelo método INLA: (a) β_0 (casca); (b) β_1 (casca); (c) β_0 (milho); (d) β_1 (milho); (e) β_0 (palha); (f) β_1 (palha)	78
Figura 3.5 – Histograma gerado pelas estimativas do método MCCM para os blocos e respectivas curvas de densidade geradas através da aproximação pelo método INLA.	80
Figura 3.6 – Estimativa média e intervalo de credibilidade associado aos provadores para os métodos MCCM e INLA.	82

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Critério de informação de Akaike para modelos de regressão em que x é a porcentagem de adulterante estandardizada.	55
Tabela 3.2 – Estimativas médias, intervalos de credibilidade 95% (HPD)(limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão associados à variância de provedores σ_b^2 e ao coeficiente de correlação intraclasse ρ	56
Tabela 3.3 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) para os coeficientes da regressão.	56
Tabela 3.4 – Limiares de detecção associados a cada adulterante considerando o modelo hierárquico bayesiano proposto neste trabalho e o modelo fixo que não leva em conta correlações entre os efeitos de provedores.	58
Tabela 3.5 – Estimativas das médias em ordem crescente e intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão para os parâmetros referente aos provedores considerando o modelo com efeito aleatório de provedor.	59
Tabela 3.1 – Critério de informação deviance para modelos de regressão	72
Tabela 3.2 – Estimativa média, intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão associado à variância de provedores σ_b^2	72
Tabela 3.3 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) para os coeficientes de regressão.	72
Tabela 3.4 – Limiares de detecção associados a cada adulterante.	73
Tabela 3.5 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) para os parâmetros associados aos provedores.	75
Tabela 3.6 – Estimativa média, intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão associado à variância de provedores σ_b^2 , considerando os métodos INLA e MCCM.	77
Tabela 3.7 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) para os coeficientes da regressão	78
Tabela 3.8 – Limiares de detecção associados a cada adulterante considerando as abordagens MCCM e INLA	79
Tabela 3.9 – Estimativas das médias, intervalos de credibilidade 95% (HPD) e desvio padrão (σ) para os parâmetros associados aos provedores considerando as abordagens MCCM e INLA	81

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	REFERENCIAL TEÓRICO	14
2.1	Análise Sensorial	14
2.2	Testes triangulares simples	14
2.3	Testes triangulares replicados	16
2.4	Análise usual	19
2.5	Modelos Thurstonianos	20
2.6	Modelos lineares generalizados mistos	23
2.7	Ensaio do tipo dose-resposta	24
2.8	Limiares de detecção	26
2.9	Modelos hierárquicos bayesianos	27
2.10	Método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM)- Algoritmo de Gibbs sampler	28
2.10.1	Gibbs sampler - Dados aumentados	30
2.11	Modelos gaussianos latentes	32
2.12	Aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA)	34
2.12.1	Etapa 1. Aproximando $P(\sigma_b^2 \mathbf{y})$	35
2.12.2	Etapa 2. Aproximando $P(\gamma_i \sigma_b^2, \mathbf{y})$	37
2.12.3	Etapa 3. Integração numérica	39
2.13	INLA x MCCM	39
2.14	Seleção de modelos	41
	REFERÊNCIAS	43
	SEGUNDA PARTE	46
	ARTIGO 1 Análise bayesiana de delineamentos triangulares para testes de discriminação: I-Amostragem Gibbs com dados aumentados	47
1	INTRODUÇÃO	48
2	MATERIAL E MÉTODOS	51
2.1	Dados	51
2.2	Modelo	51
2.3	Seleção de modelos	54
3	RESULTADOS E DISCUSSÃO	55
4	CONCLUSÕES	61
	REFERÊNCIAS	62
	ARTIGO 2 Análise bayesiana de delineamentos triangulares para testes de discriminação: II-Aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA)	64
1	INTRODUÇÃO	65
2	MATERIAL E MÉTODOS	67
2.1	Dados	67
2.2	Modelo	67
3	RESULTADOS E DISCUSSÃO	72

3.1	Comparação da aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA) e métodos de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM)	76
4	CONCLUSÕES	83
	REFERÊNCIAS	84
	APÊNDICE A	85
	ANEXO A	96
5	CONCLUSÃO GERAL	98

1 INTRODUÇÃO

Os testes de discriminação na análise sensorial podem ser analisados sob o ponto de vista da psicometria e da psicofísica, estudando a resposta sensorial de um provador a um determinado estímulo.

Os testes triangulares são exemplos de testes de discriminação em que são avaliadas duas amostras em cada ensaio e o objetivo é determinar se existe diferença significativa entre os dois produtos. O método consiste em montar um ensaio em que cada provador recebe três amostras codificadas, sendo duas iguais e uma diferente, devendo este provar as amostras e selecionar a que considera diferente. O provador é forçado a fazer a escolha mesmo que nenhuma diferença seja percebida.

Em geral, cada provador realiza o ensaio mais de uma vez e tais experimentos são normalmente analisados como se não houvesse essas repetições, isto é, como se as respostas viessem de diferentes provadores.

Alguns trabalhos consideram que a proporção de respostas corretas dos provadores considerando vários ensaios segue distribuição de probabilidade normal. Essa análise, no entanto, é uma aproximação. Podemos modelar diretamente o número de acertos usando a distribuição binomial, uma vez que podemos dicotomizar as respostas ao teste e interpretá-las como variáveis aleatórias binárias. Kunert e Meyners (1999) estudando testes de discriminação replicados apresentaram um modelo binomial decompondo a probabilidade em uma parte que representa o acerto ao acaso e outra que considera a habilidade do provador.

Thurstone (1927) estudando os mecanismos que geram a resposta de um provador a um dado estímulo mostrou que as respostas de um mesmo provador em repetições de um mesmo ensaio podem estar correlacionadas e portanto é importante considerar esse efeito aleatório de provador. A análise bayesiana através de modelos hierárquicos bayesianos é uma alternativa de análise que trata parâmetros como variáveis aleatórias e não constantes desconhecidas.

Nesse modelos, em geral, para obter amostras da distribuição marginal a posteriori dos parâmetros é necessário resolver integrais complicadas que muitas vezes não possuem solução analítica. Para resolver esse problema, frequentemente, usam-se métodos de simulação, como os métodos de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM). A ideia desses métodos é utilizar cadeias de Markov para obter uma distribuição limite para os parâmetros do modelo. É um processo iterativo que permite encontrar amostras das distribuições de interesse sem a necessidade de resolver algebricamente todos os cálculos. Esses métodos, em geral, obtêm resultados

satisfatórios, porém o esforço computacional pode ser excessivo em modelos complexos, além de apresentar problemas de convergência.

Uma alternativa foi proposta por Rue, Martino e Chopin (2009), conhecida como aproximação de Laplace aninhada integrada, do inglês *Integrated nested Laplace approximation* (INLA), que faz aproximações determinísticas para distribuições a posteriori, com consideráveis reduções em tempo computacional.

Neste trabalho apresentamos análises de um teste triangular replicado considerando as abordagens MCCM e INLA. Inicialmente descrevemos no referencial teórico a análise usual deste tipo de teste muito usado na análise sensorial que, no entanto, é uma aproximação e pode superestimar as estimativas. Um modelo alternativo é proposto incluindo as possíveis correlações existentes entre os efeitos de provadores. Apresentamos as principais ideias relacionadas aos métodos MCCM e INLA e como usá-los na análise de testes triangulares. A segunda parte do trabalho está dividida em dois artigos, ambos descrevendo a análise de um experimento real considerando um teste triangular replicado. No primeiro considerando o método MCCM usando a técnica de dados aumentados e no segundo a aproximação INLA em detalhes.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Análise Sensorial

A análise sensorial ou avaliação sensorial é uma ciência que utiliza os sentidos humanos visão, olfato, tato, paladar e audição, para avaliar as características ou atributos de um produto, ou seja, é usada para analisar e interpretar reações das características dos alimentos como são percebidas pelos sentidos humanos (ABNT, 1993).

Vários métodos são utilizados para analisar os resultados das análises sensoriais e uma preocupação quando se escolhe um desses métodos é assegurar que esse é adequado para responder às questões que estão sendo analisadas sobre o produto em teste. Por esta razão, os testes sensoriais são geralmente classificados de acordo com a sua principal finalidade. Em geral, são agrupados em afetivos e analíticos como em Lawless e Heymann (2010). Nos métodos afetivos, é possível utilizar pessoas sem treinamento prévio, pois buscam-se respostas resultantes de estímulos e reações espontâneas do indivíduo ao degustar e avaliar o produto. Tem como finalidade avaliar a aceitação e preferência dos consumidores em relação a um ou mais produtos.

Nos métodos analíticos é necessária a seleção ou treinamento da equipe sensorial para realização das análises e também é exigida uma avaliação objetiva, ou seja, não são consideradas as preferências dos membros da equipe. Estes testes, por sua vez, também se dividem em dois grupos: testes descritivos e discriminativos.

O método sensorial descritivo envolve técnicas que permitem a avaliação da intensidade dos atributos sensoriais de produtos. Por outro lado, os testes de discriminação devem ser usados quando se quer determinar se existem diferenças entre duas ou mais amostras. Neste caso não importam qualidades específicas de cada amostra, mas a diferença entre elas. É possível que duas amostras sejam quimicamente diferentes na formulação, mas essas diferenças sejam imperceptíveis aos seres humanos. Os testes triangulares são exemplos de testes discriminativos.

2.2 Testes triangulares simples

Pela facilidade de aplicação e por fornecer uma análise simples e direta, os testes triangulares são muito usados em análise sensorial. O objetivo do teste é determinar se existem

diferenças sensoriais entre duas ou mais amostras. O método consiste em montar um ensaio em que cada provador recebe três amostras codificadas, sendo duas iguais e uma diferente, devendo este provar as amostras e selecionar a amostra que considera diferente. O provador é forçado a fazer a escolha mesmo que nenhuma diferença seja percebida (KEMP; HOLLOWOOD; HORT, 2009).

Dizemos que o provador teve sucesso em um dado ensaio se ele respondeu corretamente ao teste, ou seja, se ele identificou a amostra diferente e fracasso se ele não conseguiu identificar a amostra diferente das demais .

Podemos dicotomizar essas respostas e interpretá-las como variável aleatória binária,

$$Z = 1 \text{ se sucesso;}$$

$$Z = 0 \text{ se fracasso,}$$

com probabilidade $P(Z = 1) = \pi$ e $P(Z = 0) = 1 - \pi$ sendo $0 \leq \pi \leq 1$. Assim, em um teste triangular simples temos o seguinte esquema, considerando n ensaios.

Definimos $Y = \sum_{j=1}^n Z_j$ como o número de sucessos em n ensaios. A variável aleatória Y tem distribuição Binomial (n, π) e podemos calcular a probabilidade de y sucessos em n ensaios pela equação (2.1):

$$P(Y = y) = \frac{n!}{y!(n-y)!} \pi^y (1-\pi)^{n-y} \quad y = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (2.1)$$

Considerando, então, a distribuição binomial, Roessler et al. (1978) construíram tabelas para facilitar a análise dos resultados. Essas tabelas informam o número mínimo de sucessos y necessário para concluir que existe diferença significativa entre as amostras. Para isso, basta entrar com o número total n de provadores que participaram do teste e um nível α de significância. Se o número de sucessos y encontrado no experimento for menor que o valor encontrado na tabela podemos concluir que não existe diferença entre os produtos ao nível de $\alpha\%$ de significância, ou seja, os provadores não detectaram a diferença entre as amostras. Esta análise é também uma aproximação porque desconsidera diferença entre as probabilidades de sucesso, efeito de provas diferentes.

Carr, Civile e Meilgaard (2006) recomendam usar de 20 a 40 provadores, sendo que estes, de preferência, devem conhecer o método triangular e o produto em teste, especialmente porque a memória de gosto desempenha um papel importante no procedimento.

Ennis (1993) estudou cálculos de poder para testes de discriminação e construiu tabelas que podem ser usadas para determinar o número de julgamentos necessários para um certo nível de poder. O poder de um teste tem como objetivo conhecer o quanto o teste de hipóteses controla um erro do tipo II, ou a probabilidade de rejeitar a hipótese nula se realmente for falsa.

Um teste ideal seria aquele que não rejeitasse para nenhuma amostra observada a hipótese nula verdadeira e rejeitasse 100% das vezes as hipóteses nulas falsas. Como isso não ocorre em situações reais, busca-se um teste que mantenha as taxas de erro tipo I menores ou iguais a um valor nominal de probabilidade escolhido, diga-se, α , e que tenha o maior poder possível.

Para obter maior poder de detecção devemos aumentar o número de ensaios realizados em um teste, por exemplo, aumentando o número de provadores. No entanto, frequentemente, o número de provadores é limitado e, nesse caso, o número de ensaios pode ser aumentado fazendo com que cada membro avalie as amostras mais de uma vez em uma sessão, ou seja, o provador pode repetir um mesmo ensaio diversas vezes. Esses testes são conhecidos como testes de discriminação replicados.

2.3 Testes triangulares replicados

Os testes de discriminação replicados consideram a possibilidade de cada provador realizar um ensaio mais de uma vez. Tais experimentos, geralmente, são analisados como se não houvesse repetições, isto é, como se todos os julgamentos fossem de provadores diferentes. Seja z_i o número de respostas corretas do provador i . Somando-se z_i para todos os n provadores obtemos o número total y de respostas corretas. Em seguida, y é comparado a um valor crítico tabelado, usando a tabela construída por Roessler et al. (1978) e mencionada na seção anterior (LAWLESS; HEYMANN, 2010).

Brockhoff e Schlich (1998) estudaram testes de discriminação replicados e propuseram o modelo descrito na equação (2.2) considerando efeito aleatório para provadores:

$$\pi_i = p_i + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad 0 \leq p_i \leq 1, \quad (2.2)$$

sendo π_i a probabilidade de um provador i ter sucesso e p_i a probabilidade média de um provador i ter sucesso. A variável aleatória ε_i tem média zero e variância desconhecida. Esse modelo considera que os provadores têm diferentes probabilidades de escolher uma amostra como diferente mesmo se os produtos são idênticos.

Kunert e Meyners (1999) abordando especificamente testes triangulares criticaram esse modelo justificando que com essa suposição, se não há diferença entre os produtos, uma vez que $p_i = \frac{1}{3}$, algum provador i poderá apresentar $\pi_i < \frac{1}{3}$. Assim, alguns provadores podem apresentar probabilidade de resposta correta menor que a probabilidade de acerto ao acaso.

Os autores concordam que os provadores têm diferentes probabilidades de acerto se considerarmos produtos diferentes, mas não concordam se considerarmos a hipótese nula de igualdade dos produtos. Neste caso, afirmam que os julgamentos são independentes e têm a mesma probabilidade de sucesso $\frac{1}{3}$ se o experimento é corretamente executado e corretamente aleatorizado. Isso implica que a soma de todas as respostas corretas é binomial com parâmetro $\pi = \frac{1}{3}$ e as observações podem ser tratadas como se fossem todas produzidas por diferentes provadores e se não houvesse repetições.

Essa aleatorização diz respeito ao delineamento experimental, que determina qual das seis possíveis ordens de apresentação AAB, ABA, BAA, ABB, BAB, BBA será mostrada ao provador. Cada uma dessas ordens deve ser apresentada o mesmo número de vezes no teste. Assim, sob a hipótese nula, as correlações entre as respostas podem ser evitadas por aleatorização.

Para a situação em que há diferença entre os produtos, Kunert e Meyners (1999) sugerem um modelo alternativo que é uma variação do modelo proposto por Brockhoff e Schlich (1998).

Considere dois diferentes grupos de provadores, os que são capazes de perceber a diferença entre dois produtos e aqueles que não são capazes de perceber a diferença. Seja c a probabilidade de acerto ao acaso, que no teste triangular é $\frac{1}{3}$. Além disso, seja π_i a probabilidade de sucesso do provador i , $i=1,2,\dots,n$.

Se não existe diferença entre os produtos, uma adequada aleatorização evita correlações entre as respostas e $\pi = c$, para todo i . Se existe diferença entre os produtos, devemos levar em conta a correlação existente entre as respostas e para cada provador, a probabilidade de sucesso é dada pela equação (2.3):

$$\pi_i = p_i + (1 - p_i) c > c, \quad (2.3)$$

sendo p_i a probabilidade do provador i realmente identificar a amostra diferente e não apenas advinhar.

Assumimos que os provadores são sorteados aleatoriamente de alguma população, tal que cada provador tem uma probabilidade γ de ser um provador que tenha a sensibilidade de

perceber a diferença existente entre as amostras. Sendo $0 < \gamma < 1$ temos que o modelo que descreve a probabilidade π_i do provador i ter sucesso é dado por:

$$\pi_i = c \quad \text{com probabilidade} \quad 1 - \gamma; \quad (2.4)$$

$$\pi_i = p_i + (1 - p_i)c \quad \text{com probabilidade} \quad \gamma. \quad (2.5)$$

Provedores que não sabem a resposta do teste têm probabilidade igual a chance de acertar ao acaso e aqueles que acreditam saber a resposta correta têm uma probabilidade de acerto que leva em conta a habilidade de cada provador. Neste caso, podemos perceber que fazendo $p_i = 0$, ou seja, o provador não consegue identificar a amostra diferente no teste triangular, caímos no primeiro caso.

Os autores não especificam a distribuição de p_i e relatam que essa distribuição depende de vários fatores como, por exemplo, a população dos provedores e a diferença entre os produtos. Além disso, consideram que as repetições para cada provador são independentes. Assim, para um determinado provador i pode-se assumir que p_i vem de uma distribuição de probabilidade comum para todas as repetições de um ensaio no teste.

Podemos reescrever as equações (2.4) e (2.5) como:

$$\pi_i = c \quad \text{com probabilidade} \quad 1 - \gamma; \quad (2.6)$$

$$\pi_i = c + (1 - c)p_i \quad \text{com probabilidade} \quad \gamma. \quad (2.7)$$

A equação (2.7) generaliza ambos os casos, pois se o provador não tem habilidade de detectar a diferença entre os produtos ($p_i = 0$), então a equação (2.7) cai na equação (2.6).

Usando o caso geral, no teste triangular temos:

$$\pi_i = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}p_i \quad \text{com probabilidade} \quad \gamma. \quad (2.8)$$

Assim, se o provador não sabe a resposta, a probabilidade de acerto casual é $\pi_i = \frac{1}{3}$. Se ele sabe, tem algum discernimento, isto corresponde a uma probabilidade maior de acertar, que é igual a $\pi_i = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}p_i$.

Essa metodologia engloba as correlações existentes entre os provedores porém ainda

não considera as correlações existentes entre as respostas de um mesmo provador em repetições de um mesmo ensaio. A inferência bayesiana associada às ideias de Thurstone, como veremos na seção 2.5 pode ser a solução.

Apesar de há anos existirem estudos que propõem modelos considerando efeito aleatório para provadores, ainda hoje a análise usual na ciência dos alimentos, em geral, não considera essa ideia.

2.4 Análise usual

Vimos na seção 2.2 que a variável aleatória Y , que fornece o número de sucessos, ou seja, o total de acertos no teste triangular, segue distribuição Binomial. O Teorema do Limite Central permite aproximar as probabilidades binomiais pela distribuição normal, isto é, a distribuição normal pode ser utilizada para calcular, de forma aproximada, probabilidades associadas a uma variável aleatória com distribuição binomial.

Esta aplicação é justificada pelo fato de que uma variável aleatória, Y , que segue distribuição Binomial surge da soma de variáveis independentes e identicamente distribuídas Bernoulli. Se $Y_i = 1$ com probabilidade p e $Y_i = 0$ com probabilidade $1 - p$ e se Y_1, Y_2, \dots, Y_n são independentes, a variável $Y = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_n$ tem distribuição binomial com parâmetros n e p . Esta distribuição tem média igual a np e variância igual a $np(1 - p)$. Para valores grandes de n e de acordo com o Teorema do Limite Central a variável Y , com distribuição Binomial, tem uma distribuição assintoticamente normal.

Assim, a distribuição normal é uma distribuição contínua que fornece uma aproximação à distribuição binomial, quando n , o número de tentativas (ou tamanho da amostra), é grande e a probabilidade de sucesso p é aproximadamente igual a $1/2$.

Usualmente, muitas análises são feitas considerando essa ideia, ou seja, supõe-se que a proporção de respostas corretas considerando as repetições em cada ensaio segue distribuição de probabilidade normal. Assim, a técnica estatística de análise de variância (ANAVA) pode ser usada para verificar se existe diferença significativa entre os tratamentos e se os fatores exercem influência em alguma variável dependente.

Essa análise no entanto é uma aproximação e pode fornecer resultados distintos se considerarmos a distribuição exata.

Barroso e Bueno Filho (2013) analisaram um exemplo com dados reais de um teste triangular considerando um modelo fixo para os parâmetros e observaram que a distribuição bi-

nomial foi mais eficiente, com maior poder de discriminação, especialmente quanto aos limiares de detecção.

Os autores consideraram um modelo fixo, que no caso de variáveis contínuas é justificado pela aleatorização (HINKELMANN; KEMPTHORNE, 2007). No entanto, este modelo não leva em conta agregações de observações do mesmo provador. Pode-se estar superestimando a precisão das estimativas. Uma solução mais adequada seria supor um modelo que considere efeito aleatório de provador, ou seja, que leve em conta a correlação existente entre os efeitos de provadores. Uma justificativa sobre essa correlação foi apresentada por Louis Leon Thurstone e está descrita na seção 2.5.

2.5 Modelos Thurstonianos

Louis Leon Thurstone foi um engenheiro mecânico e psicólogo americano pioneiro nos campos da psicometria e psicofísica. A psicofísica estuda a resposta sensorial a um estímulo, os mecanismos que geraram essa resposta e qualquer processamento de informação no cérebro que possa afetar a forma como o provador relata essas sensações (O'MAHONY; ROUSSEU, 2002).

Os testes de discriminação, como o teste triangular, podem ser analisados do ponto de vista dessa área da ciência, procurando entender como o ser humano usa os sentidos para avaliar as características dos alimentos.

A modelagem thurstoniana considera essa relação abordando duas ideias, variação da percepção e o conceito de regra de decisão.

A primeira ideia considera que a não homogeneidade existente entre as amostras e as variações no mecanismo neural do provador fazem com que a intensidade da percepção do produto não seja constante durante o teste, ou seja, a cada repetição o provador estabelece uma intensidade de percepção diferente (LEE; O'MAHONY, 2007).

Assim, além de variação entre provadores vamos considerar variação dentro de provadores, ou seja, se os mesmos indivíduos repetem seus julgamentos sobre as mesmas amostras, a possibilidade desses julgamentos não serem totalmente independentes será considerada. Em outras palavras, as avaliações repetidas feitas por um provador específico podem estar correlacionadas.

Thurstone (1927) observou que um provador não é consistente em seus julgamentos de uma repetição para outra, pois apresenta diferentes respostas em repetições sucessivas consi-

derando o mesmo par de estímulos. Assim, concluiu que o processo de discriminação correspondente a um dado estímulo não é fixo. As percepções são momentâneas, porque se assume que variam de julgamento a julgamento e desse modo podem ser representadas como variáveis aleatórias, por exemplo, normalmente distribuídas.

O quantil desta distribuição indica o nível de percepção correspondente a uma determinada probabilidade de discriminar corretamente. No teste triangular corresponde à probabilidade de acertar a amostra diferente (CHRISTENSEN, 2012).

Portanto, assumindo que a percepção para cada produto segue distribuição normal, quando dois produtos têm diferenças sensoriais significativas, eles não serão confundidos considerando que não há sobreposição em suas distribuições de percepção (CHRISTENSEN, 2012). Existe debate na literatura sobre essa suposição de normalidade. Para mais detalhes ver Luce (1994).

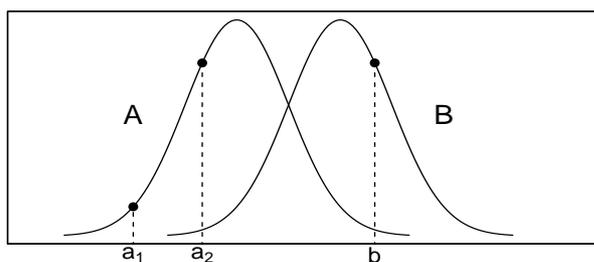
A segunda ideia da abordagem thurstoniana se baseia no conceito de regra de decisão ou estratégia cognitiva, que é uma regra usada pelo provador para produzir uma resposta sobre a percepção das amostras. Para um mesmo provador, esta regra é independente do estímulo envolvido, ou seja, em um teste triangular, independente do número de repetições, a regra de decisão de um provador específico será sempre a mesma. As regras de decisão entre provadores podem ser diferentes e devido a este fato, algumas regras de decisão podem ser mais eficientes que outras e assim, alguns provadores podem apresentar melhor desempenho.

No teste triangular, por exemplo, temos dois produtos iguais (a_1 e a_2) e um diferente (b). Assim, supondo que o erro de percepção é homogêneo entre as amostras, temos duas curvas normais com mesma variância para as percepções desses dois produtos. As Figuras 2.1 e 2.2 ilustram as distribuições de probabilidade das percepções associadas a um teste triangular considerando dois ensaios diferentes. O provador recebe as três amostras a_1 , a_2 e b devendo identificar a amostra diferente.

No primeiro ensaio, o provador selecionou a amostra b porque perceptivelmente é mais distante de ambas as amostras a_1 e a_2 do que as amostras a_1 e a_2 são uma da outra. Nesse ensaio o provador dá uma resposta correta porque a sua percepção é consistente com a real diferença entre os produtos. No segundo ensaio, o provador seleciona a amostra a_1 porque, perceptivelmente, é mais distante das amostras a_2 e b do que a_2 e b são uma da outra. Nesse ensaio, o provador dá uma resposta incorreta porque a percepção do provador é inconsistente com a real diferença entre os produtos. No entanto, em ambos ensaios, o provador aplica a regra

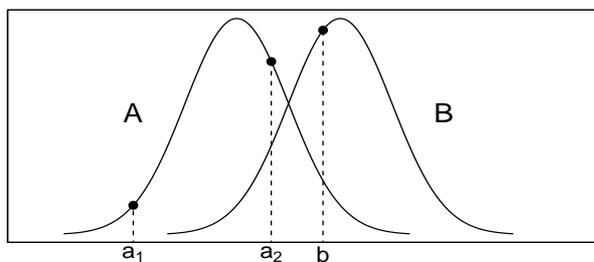
de decisão correta, que é selecionar a amostra mais distante das outras duas. No entanto, devido à natureza probabilística da percepção, em um ensaio a resposta é correta e em outro a resposta é incorreta (CARR; CIVILLE; MEILGAARD, 2006).

Figura 2.1 – Respostas corretas em um teste triangular, dado que a percepção de a_2 está mais próxima de a_1 do que de b .



Fonte: Carr, Civille e Meilgaard (2006).

Figura 2.2 – Respostas incorretas em um teste triangular, dado que a percepção de a_2 está mais próxima de b do que de a_1 .



Fonte: Carr, Civille e Meilgaard (2006).

Situações desse tipo não são raras em experimentos que envolvem análise sensorial, daí a necessidade de se aprimorar as técnicas de avaliação de dados com essas características.

Lleixà et al. (2016) apresentaram um experimento em que foram realizadas fermentações semi-industriais com as leveduras *Hanseniaspora vineae* e *Saccharomyces cerevisiae* usando mostos Macabeo e Merlot a fim de avaliar diferenças durante a fermentação e produção do vinho. As amostras foram analisadas através de um teste triangular em que 13 provadores treinados avaliaram os atributos sensoriais dos vinhos. Os resultados da análise sensorial foram

submetidos ao teste t de Student. A análise não levou em conta a possível correlação existente entre os efeitos de provadores.

Dada as recomendações feitas por Thurstone ressaltamos a importância de se considerar um modelo que englobe a correlação existente nas respostas de um mesmo provador em repetições de um mesmo ensaio. Os modelos hierárquicos bayesianos podem ser uma solução como apresentado a seguir.

2.6 Modelos lineares generalizados mistos

A técnica de modelos lineares generalizados, desenvolvida por Nelder e Wedderburn (1972), permite a generalização ou flexibilização dos modelos lineares clássicos, de forma que toda estrutura para a estimação e predição em modelos lineares normais, pode ser estendida para os modelos não lineares. Os modelos lineares clássicos são, em verdade, casos especiais de modelos lineares generalizados.

Em geral, esses modelos envolvem uma variável resposta, variáveis explicativas e uma amostra aleatória de n observações independentes, sendo que:

(i) a variável resposta, componente aleatório do modelo tem uma distribuição pertencente a família exponencial. Temos,

$$Y_i \sim \text{indep. } f_{Y_i}(y_i); \quad (2.9)$$

$$f_{Y_i}(y_i) = \exp \{ [y_i \gamma_i - b(\gamma_i)] / \tau^2 - c(y_i, \tau) \}, \quad (2.10)$$

sendo $b(\cdot)$ e $c(\cdot, \cdot)$ funções conhecidas, τ parâmetro de escala e γ_i parâmetro canônico ou natural da distribuição de Y_i .

(ii) as variáveis explicativas entram na forma de uma estrutura linear, constituindo o componente sistemático do modelo. As variáveis explicativas x_1, x_2, \dots, x_p produzem um preditor linear $\boldsymbol{\eta}$ dado por

$$\boldsymbol{\eta} = \sum_{j=1}^p x_j \beta_j = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \quad (2.11)$$

sendo X a matriz de delineamento e $\boldsymbol{\beta}$ o vetor de parâmetros desconhecidos.

(iii) a ligação entre os componentes aleatório e sistemático é feita por meio de uma

função de ligação conhecida $g(\cdot)$ monótona e diferenciável, que liga a média μ_i ao preditor linear, isto é,

$$g(\mu_i) = \eta_i. \quad (2.12)$$

Os modelos lineares generalizados podem agregar efeitos aleatórios caracterizando os denominados modelos lineares generalizados mistos com um preditor linear η (MCCULLOCH; SEARLE, 2001). Então,

$$\eta = \mathbf{X}\beta + \mathbf{Z}\mathbf{b} \quad (2.13)$$

em que β é o vetor de parâmetros de efeitos fixos desconhecidos, com matriz de delineamento conhecida \mathbf{X} , \mathbf{b} é um vetor de parâmetros de efeitos aleatórios desconhecidos, com matriz de delineamento conhecida \mathbf{Z} .

Esses modelos então podem ser úteis na análise de testes triangulares em que a incorporação de efeitos aleatórios se faz necessária, pois de acordo com as ideias thurstonianas devemos levar em consideração as correlações existentes entre as respostas de um mesmo provador.

2.7 Ensaios do tipo dose-resposta

Os testes triangulares são muito usados na ciência dos alimentos quando se pretende estudar a percepção dos provadores em relação a algum produto alterando a porcentagem de determinada substância ou ingrediente adicionado a este produto. Em geral, quanto maior a porcentagem ou dose desse ingrediente mais perceptível ele se torna. Esses experimentos são conhecidos como experimentos ou ensaios do tipo dose-resposta.

De uma forma geral, ensaios do tipo dose-resposta são aqueles em que uma determinada droga é administrada em diferentes doses a diferentes indivíduos e estes respondem ou não à droga, produzindo uma resposta binária. Dados desse tipo de ensaio podem ser considerados como provenientes de uma distribuição binomial com probabilidade π de responder ao estímulo (ALTSHULER, 1981; McCULLAGH; NELDER, 1989; COLEMAN; MARKS, 1998).

Os objetivos desse tipo de experimento são, em geral, modelar a probabilidade π como função de variáveis explicativas e, então, determinar doses efetivas como DL_{50} que é a dose que causa mudança de estado em 50% dos indivíduos (ALTSHULER, 1981; McCULLAGH; NELDER, 1989; COLEMAN; MARKS, 1998).

Em estudos sobre adulteração de alimentos, por exemplo, podemos conduzir testes triangulares replicados seguindo essa ideia. Apresentamos ao provador amostras de um produto contaminadas com algum adulterante em diferentes porcentagens de adulteração e analisamos se o provador percebe ou não a diferença em relação a uma amostra padrão, sem adulterantes.

Cada provador analisa então o mesmo ensaio diversas vezes e além disso, é possível que cada provador analise vários ensaios diferentes, considerando várias amostras, ou seja, podemos montar vários tratamentos considerando vários adulterantes e várias porcentagens de adulteração. Temos, então, um esquema fatorial e podemos modelar a probabilidade de sucesso do provador j no tratamento i , π_{ij} , ou seja, modelar a probabilidade de acertos no teste triangular considerando os efeitos de tratamento e os efeitos de provadores.

A intensidade do efeito ou da resposta é proporcional à dose administrada, ou seja, a probabilidade de sucesso é pequena para baixas porcentagens de adulteração e se aproxima de um, à medida que se aumentam as porcentagens, sendo uma função estritamente crescente.

Em geral, experimentos que tem como objetivo estudar a relação entre a dose de um princípio e o seu efeito são modelados por uma curva de dose-resposta. Essa curva tem as propriedades matemáticas de uma função de distribuição contínua acumulada e exibe uma forma sigmóide ou forma de S . A distribuição logística é frequentemente usada neste tipo de análise, mas também pode ser usada a acumulada normal ou outras funções crescentes.

Assim, estendemos os conceitos apresentados por Kunert e Meyners (1999) e descritos na seção 2.4 para vários tratamentos e dessa forma podemos encontrar uma curva de dose-resposta para cada adulterante que apresente a relação entre a probabilidade de sucesso e as diferentes porcentagens do adulterante utilizadas. Visto que a distribuição acumulada normal é frequentemente usada nesse tipo de análise consideramos a probabilidade p_{ij} do provador j realmente identificar a amostra diferente no teste triangular considerando o tratamento i como sendo

$$p_{ij} = \Phi(\eta_{ij}) \quad i = 1, 2, \dots, I \quad \text{e} \quad j = 1, 2, \dots, J, \quad (2.14)$$

em que, Φ representa a distribuição de probabilidade acumulada da normal padrão.

A probabilidade de sucesso no modelo binomial para o teste triangular é dada por

$$\pi_{ij} = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}\Phi(\eta_{ij}), \quad (2.15)$$

em que, $\eta = \mathbf{X}\beta + \mathbf{Z}\mathbf{b}$ sendo β o vetor de parâmetros associado aos efeitos fixos de tratamentos (adulterantes e porcentagens de adulteração) e \mathbf{b} o vetor de parâmetros associados aos efeitos aleatórios de provadores.

2.8 Limiares de detecção

As curvas de dose-resposta fornecem informações como a dose que causa uma determinada mudança de estado. Essa dose é conhecida como limiar de detecção ou *threshold* e pode ser definido como o nível abaixo do qual nenhuma sensação é produzida por um estímulo e acima do qual uma sensação chega à consciência do provador.

Nos testes triangulares podemos encontrar para cada adulterante a porcentagem de adulteração a partir da qual o adulterante se torna perceptível. Na prática verifica-se que existe uma variabilidade no ponto em que os provadores mudam a sua resposta. Existe variabilidade mesmo dentro de um único indivíduo. Em uma sequência de ensaios, mesmo dentro da mesma sessão experimental, o ponto no qual uma pessoa muda a sua, ou, as suas respostas serão diferentes. Muitas vezes há diferenças entre os indivíduos, especialmente em relação à sensibilidade a sabor e cheiro. Isto levou ao estabelecimento de regras comuns para a definição de um limiar, tais como o nível em que a detecção ocorre 50% das tentativas, ou seja, o nível que corresponde a 50% de respostas corretas (LAWLESS; HEYMANN, 2010).

No teste triangular fazemos $p_i = 50\%$ e por interpolação encontramos o nível correspondente à probabilidade de sucesso $\pi = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2} = \frac{2}{3}$. A partir da curva de dose-resposta é possível fazer uma interpolação afim de encontrar o limiar de detecção associado à essa probabilidade de sucesso no teste triangular (PENG; JAEGER; HAUTUS, 2012).

Newman et al. (2016) realizaram um estudo a fim de avaliar o efeito de uma refeição rica em gordura imediatamente antes da realização de um teste de limiar de detecção de ácido oléico em amostras de leite desnatado. O ácido oléico foi adicionado em amostras de leite desnatado em concentrações variáveis. Os limiares foram avaliados usando um teste triangular duas vezes por dia em que participaram 32 provadores. Estes inicialmente foram distribuídos aleatoriamente em um dos 3 tipos de dieta: teor alto, baixo ou controlado de gordura no café da manhã. Os testes foram realizados primeiramente uma hora antes do almoço e a próxima etapa uma hora após a conclusão do primeiro teste. Além disso, cada provador participou de 3 sessões de laboratório com pelo menos 1 dia de intervalo entre elas.

Os provadores receberam amostras até que fossem capazes de identificar a amostra di-

ferente três vezes consecutivas. As diferenças nos limiares de detecção de cada provedor foram comparadas usando análise de variância que não levou em conta as correlações existentes entre os efeitos de provedores, ou seja, a análise não considerou um modelo com efeito aleatório de provedor para descrever a relação entre a variável resposta e as covariáveis uma vez que existe dependência entre as observações. Esses modelos conseguiriam flexibilizar uma estrutura para a matriz de variâncias e covariância que introduziria a possível correlação presente nos dados.

2.9 Modelos hierárquicos bayesianos

Os modelos lineares hierárquicos bayesianos são uma forma geral de captar as correlações existentes entre as respostas de um provedor através da incorporação de fatores aleatórios ao modelo (MCCULLOCH; SEARLE, 2001).

Seja Y uma variável aleatória com função de verossimilhança $P(Y | \gamma)$, sendo γ um vetor $k \times 1$ de parâmetros que caracteriza a distribuição de Y . Considerando a abordagem bayesiana podemos assumir uma distribuição de probabilidade a priori para γ com variância σ_b^2 representada por $P(\gamma | \sigma_b^2)$ e uma distribuição de probabilidade a priori para o hiperparâmetro σ_b^2 .

A distribuição da probabilidade a posteriori pode ser calculada usando o teorema de Bayes

$$P(\gamma, \sigma_b^2 | Y) = \frac{P(\gamma | \sigma_b^2) P(\sigma_b^2) P(Y | \gamma, \sigma_b^2)}{P(Y)}. \quad (2.16)$$

Usando o fato que o denominador não depende de γ temos

$$P(\gamma, \sigma_b^2 | Y) \propto P(\gamma | \sigma_b^2) P(\sigma_b^2) P(Y | \gamma, \sigma_b^2). \quad (2.17)$$

Assim, a distribuição de probabilidade a posteriori é proporcional ao produto da função de verossimilhança pelas distribuições de probabilidade a priori do parâmetros e hiperparâmetros (PRESS, 2003).

Desejamos obter as marginais a posteriori de γ dadas por

$$P(\gamma_i | Y) = \int \cdots \int P(\gamma | Y) d\gamma_{-i}, \quad (2.18)$$

além da distribuição marginal a posteriori de σ_b^2 .

Os modelos hierárquicos bayesianos podem ser generalizados como modelos em que os parâmetros que descrevem a variabilidade da variável de interesse são considerados quantidades aleatórias oriundas de uma distribuição de probabilidade cujos parâmetros são chamados de hiperparâmetros. Podemos considerar três níveis de hierarquia: modelo das observações, modelo dos parâmetros e modelo dos hiperparâmetros (PRESS, 2003).

Em geral, para obter amostras da distribuição marginal a posteriori dos parâmetros e hiperparâmetros é necessário resolver integrais complexas que muitas vezes não possuem solução analítica. A inferência bayesiana baseada em amostras da distribuição conjunta é hoje consagrada. Em especial técnicas de simulação iterativa, baseadas em cadeias de Markov são amplamente utilizadas. Essa metodologia contempla a estimação simultânea de parâmetros e hiperparâmetros devido às atualizações realizadas no processo iterativo. Para mais detalhes sobre métodos de simulação ver, por exemplo, Bernardo e Smith (1994); PRESS (2003).

2.10 Método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM)- Algoritmo de Gibbs sampler

Uma cadeia de Markov é um caso particular de processo estocástico e apresenta a propriedade Markoviana, chamada assim em homenagem ao matemático Andrei Andreyevich Markov. A definição desta propriedade é que os estados anteriores são irrelevantes para a predição dos estados seguintes, desde que o estado atual seja conhecido (BERNARDO; SMITH, 1994).

Abordaremos a seguir os métodos de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM), em que designa-se por método de Monte Carlo qualquer método de uma classe de métodos estatísticos que se baseiam em amostragens aleatórias massivas para obter resultados numéricos, isto é, repetindo sucessivas simulações um elevado número de vezes, para calcular probabilidades.

O objetivo dos métodos de MCCM é amostrar sequencialmente para cada parâmetro partindo de distribuições completamente condicionadas nos demais parâmetros do modelo e utilizar as cadeias de Markov formadas para obter uma distribuição limite para os parâmetros do modelo. É um processo iterativo que permite encontrar amostras das distribuições de interesse sem a necessidade de resolver algebricamente todos os cálculos. Esses métodos, em geral, obtêm resultados satisfatórios, porém o esforço computacional pode ser excessivo em modelos complexos (BERNARDO; SMITH, 1994).

Um método de Monte Carlo via cadeias de Markov muito utilizado é denominado amostrador de Gibbs ou algoritmo de Gibbs sampler (GELFAND; SMITH, 1990). É uma técnica uti-

lizada para gerar amostras aleatórias de uma distribuição conjunta e dela obter as distribuições marginais desejadas sem que se conheça a sua densidade. Neste método o conhecimento das distribuições condicionais completas dos parâmetros é suficiente para determinar a distribuição conjunta, ou seja, o algoritmo é um esquema markoviano dinâmico que requer a amostragem dessas distribuições condicionais e pode ser descrito como a seguir.

Suponhamos que o vetor de parâmetros γ seja dividido em k subvetores $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_k)'$ e que as distribuições condicionais de cada parâmetro γ_i dados todos os outros seja conhecida.

Estas distribuições são chamadas distribuições condicionais completas e denotadas por

$$\begin{aligned} P(\gamma_1 \mid \gamma_2, \gamma_3, \dots, \gamma_k, \mathbf{y}) \\ P(\gamma_2 \mid \gamma_1, \gamma_3, \dots, \gamma_k, \mathbf{y}) \\ \dots \\ P(\gamma_k \mid \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{k-1}, \mathbf{y}) \end{aligned}$$

Seja $\gamma^{(0)} = (\gamma_1^{(0)}, \gamma_2^{(0)}, \dots, \gamma_k^{(0)})$ um valor arbitrário para o vetor γ . Proceda-se da seguinte forma:

Obtém-se

$$\begin{aligned} \gamma_1^{(1)} \text{ de } P(\gamma_1 \mid \gamma_2^{(0)}, \gamma_3^{(0)}, \dots, \gamma_k^{(0)}, \mathbf{y}) \\ \gamma_2^{(1)} \text{ de } P(\gamma_2 \mid \gamma_1^{(1)}, \gamma_3^{(0)}, \dots, \gamma_k^{(0)}, \mathbf{y}) \\ \dots \\ \gamma_k^{(1)} \text{ de } P(\gamma_k \mid \gamma_1^{(1)}, \gamma_2^{(1)}, \dots, \gamma_{k-1}^{(1)}, \mathbf{y}) \end{aligned}$$

Completa-se assim uma iteração e uma transição de $\gamma^{(0)}$ para $\gamma^{(1)} = (\gamma_1^{(1)}, \gamma_2^{(1)}, \dots, \gamma_k^{(1)})$. O esquema é repetido M vezes produzindo $\gamma^{(0)}, \gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}, \dots, \gamma^{(M)}$. A sucessão de valores $\gamma^{(0)}, \gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}, \dots, \gamma^{(M)}$ é uma realização de uma cadeia de Markov.

Pode-se provar que quando $M \rightarrow \infty$ então $(\gamma_1^{(M)}, \gamma_2^{(M)}, \dots, \gamma_k^{(M)})$ tende em distribuição para um vetor aleatório cuja função densidade de probabilidade conjunta é $P(\gamma \mid \mathbf{y})$ (BERNARDO; SMITH, 1994).

Os vetores $\gamma^{(M)}$ que vão sendo gerados são correlacionados e portanto, devemos contruir longas cadeias utilizando vetores espaçados de modo a anular o efeito da correlação. Esse salto é normalmente denominado "*jump*". Além disso, é indicado um descarte da porção inicial da cadeia de Markov, denominado "*burn in*".

As cadeias resultantes desse processo precisam ser avaliadas quanto à convergência para o estado de equilíbrio. Entre as várias propostas de análise de convergência temos: Gelman e Rubin (1992) e Raftery e Lewis (1992).

Após um número M suficientemente grande de iterações e analisada a convergência formamos uma amostra do vetor γ . No processo de inferência é comum a construção de histogramas de qualquer um de seus componentes. Frequentemente, escolhemos alguma medida para descrever o conhecimento sobre o parâmetro de interesse. Alguns casos, em que queremos uma estimativa pontual, podemos usar a média a posteriori, outros casos, quando a distribuição é bastante assimétrica, a mediana ou moda pode ser a medida mais interessante.

2.10.1 Gibbs sampler - Dados aumentados

Em MCCM, às vezes é útil modificar a distribuição alvo introduzindo variáveis latentes ou variáveis auxiliares no processo de amostragem. Essa ideia foi denominada de técnica de dados aumentados (*data augmentation*) por Tanner e Wong (1987).

Considere a distribuição a posteriori $P(\gamma | \mathbf{y}) \propto P(\gamma) L(\mathbf{y} | \gamma)$ e que devido a priori ou à verossimilhança, a distribuição a posteriori é computacionalmente difícil de ser obtida. Seja \mathbf{u} um vetor de variáveis latentes e a distribuição a posteriori modificada com a adição dessas variáveis latentes seja dada por

$$P(\gamma, \mathbf{u} | \mathbf{y}) \propto P(\gamma, \mathbf{u}) L(\mathbf{y}, \mathbf{u} | \gamma). \quad (2.19)$$

Podemos acrescentar variáveis latentes ao modelo de forma que a verossimilhança $L(\mathbf{y}, \mathbf{u} | \gamma)$ se torne tratável ou mesmo a distribuição condicional de γ dado (\mathbf{y}, \mathbf{u}) seja facilmente obtida. Nesse último caso, uma simulação pode ser conduzida com os blocos γ e \mathbf{u} . A simulação MCCM produz as saídas

$$(\gamma^{(1)}, \mathbf{u}^{(1)}), \dots, (\gamma^{(M)}, \mathbf{u}^{(M)}) \sim P(\gamma, \mathbf{u} | \mathbf{y}). \quad (2.20)$$

Assim, de maneira indireta podemos amostrar da distribuição a posteriori. Press (2003) apresenta um exemplo com respostas binárias e a distribuição a posteriori pode ser escrita como

$$P(\gamma | \mathbf{y}) \propto P(\gamma) \prod_{i=1}^n \pi_i^{y_i} (1 - \pi_i)^{(1-y_i)}, \quad (2.21)$$

em que $\pi_i = \Phi(x_i' \gamma)$.

Introduzimos as váriáveis latentes u_i e o modelo fica especificado como

$$u_i | \gamma \sim N(x_i' \gamma, 1); \quad (2.22)$$

$$y_i = I[u_i > 0]; \quad (2.23)$$

$$\gamma \sim N_k(\gamma_0, B_0). \quad (2.24)$$

Essa especificação é equivalente ao modelo de regressão probit

$$P(y_i = 1 | x_i, \gamma) = P(u_i > 0 | x_i, \gamma) = \Phi(x_i' \gamma). \quad (2.25)$$

O algoritmo continua com a amostragem das distribuições condicionais completas $\gamma | \mathbf{y}, \{u_i\}$ e $\{u_i\} | \mathbf{y}, \gamma$ ambas tratáveis. Especificamente, a distribuição de γ condicionada às variáveis latentes se torna independente dos dados observados e tem a forma

$$P(\gamma | \mathbf{y}, \{u_i\}) = P(\gamma | \{u_i\}); \quad (2.26)$$

$$P(\gamma | \mathbf{y}, \{u_i\}) \propto e^{\{-0.5(\gamma - \gamma_0)' \mathbf{B}_0^{-1} (\gamma - \gamma_0)\}} \prod_{i=1}^n e^{\{-0.5(u_i - x_i' \gamma)^2\}}, \quad (2.27)$$

que é uma densidade normal multivariada com média $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{B} \left(\mathbf{B}_0^{-1} \gamma_0 + \sum_{i=1}^n x_i u_i \right)$ e matriz de

variância $\mathbf{B} = \left(\mathbf{B}_0^{-1} + \sum_{i=1}^n x_i x_i' \right)^{-1}$.

A distribuição dos dados latentes condicionada aos dados e aos parâmetros em um conjunto de n distribuições independentes cada um dependendo dos dados somente através de y_i é

$$\{u_i\} | \mathbf{y}, \gamma \stackrel{d}{=} \prod_{i=1}^n u_i | y_i, \gamma. \quad (2.28)$$

As distribuições $\{u_i | y_i, \gamma\}$ são obtidas da seguinte forma. Suponha que $y_i = 0$, então pelo teorema de Bayes,

$$P(u_i | y_i = 0, \boldsymbol{\gamma}) \propto N(u_i | x_i' \boldsymbol{\gamma}, 1) P(y_i = 0 | u_i, \boldsymbol{\gamma}); \quad (2.29)$$

$$P(u_i | y_i = 0, \boldsymbol{\gamma}) \propto N(u_i | x_i' \boldsymbol{\gamma}, 1) I(u_i \leq 0), \quad (2.30)$$

porque $P(y_i = 0 | u_i, \boldsymbol{\gamma})$ é igual a 1 se u_i é negativo e igual a 0 caso contrário. Se $y_i = 1$ temos

$$P(u_i | y_i = 1, \boldsymbol{\gamma}) \propto N(u_i | x_i' \boldsymbol{\gamma}, 1) I(u_i > 0). \quad (2.31)$$

Podemos mostrar que

$$\mathbf{u} = \boldsymbol{\eta} + \sigma \Phi^{-1} \left[\Phi \left(\frac{a - \boldsymbol{\eta}}{\sigma} \right) + U \left(\Phi \left(\frac{b - \boldsymbol{\eta}}{\sigma} \right) - \Phi \left(\frac{a - \boldsymbol{\eta}}{\sigma} \right) \right) \right] \quad (2.32)$$

é a saída de uma $N(\boldsymbol{\eta}, \sigma^2)$ truncada no intervalo (a, b) , sendo Φ a função densidade acumulada da $N(0, 1)$ e $U \sim U(0, 1)$.

O custo computacional dos métodos de simulação pode crescer drasticamente à medida que a dimensão paramétrica aumenta. Isso, muitas vezes, se torna um problema na inferência e então os métodos determinísticos de aproximação, como o método proposto por Rue, Martino e Chopin (2009) podem ser uma alternativa produzindo ótimos resultados em um menor tempo computacional. Esse método é eficiente para uma classe de modelos conhecida como modelos gaussianos latentes como descrito a seguir.

2.11 Modelos gaussianos latentes

Os modelos gaussianos latentes são um caso específico dos modelos de regressão aditivos estruturados que possuem uma variável resposta y_i pertencente à família exponencial, no qual a média μ_i está ligada ao preditor aditivo estruturado η_i através de uma função de ligação $g(\cdot)$, tal que, $g(\mu_i) = \eta_i$. Esse preditor representa o efeito de várias covariáveis de uma forma aditiva (RUE; MARTINO; CHOPIN, 2009):

$$\eta_i = \alpha + \sum_{j=1}^{n_f} f^{(j)}(u_{ij}) + \sum_{k=1}^{n_\beta} \beta_k z_{ki} + \varepsilon_i, \quad (2.33)$$

sendo

$\{f^{(j)}(\cdot)\}$ funções das covariáveis \mathbf{u} ;

$\{\beta_k\}'$ s representam o efeito linear das covariáveis \mathbf{z} ;
 $\{\varepsilon_i\}'$ s são os termos não-estruturados.

Os modelos gaussianos latentes assumem uma distribuição de probabilidade a priori normal para as n variáveis latentes, ou seja, atribuem uma priori gaussiana para o campo latente γ dado pelas variáveis α , $\{f^{(j)}(\cdot)\}$, $\{\beta_k\}$ e $\{\varepsilon_i\}$. Essas variáveis são controladas por um vetor de parâmetros desconhecidos σ_b^2 , denominados hiperparâmetros.

Em geral, assumimos que as variáveis observadas y são condicionalmente independentes dados γ e σ_b^2 . Neste caso temos a estrutura hierárquica:

$$y_i | \gamma, \sigma_b^2 \sim P(y_i | \gamma_i, \sigma_b^2); \quad (2.34)$$

$$\gamma | \sigma_b^2 \sim P(\gamma | \sigma_b^2); \quad (2.35)$$

$$\sigma_b^2 \sim P(\sigma_b^2), \quad (2.36)$$

em que $y = (y_1, y_2, \dots, y_{n_d})'$ são os dados observados, $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)'$ os elementos do campo latente, σ_b^2 é o vetor de dimensão m de hiperparâmetros, a distribuição de $y_i | \gamma, \sigma_b^2$ pertence à família exponencial e a distribuição de $\gamma | \sigma_b^2$ é gaussiana.

Os componentes do campo latente γ são assumidos condicionalmente independentes, o que implica em uma matriz de precisão $Q(\sigma_b^2)$ esparsa. Tal condição permite um ganho computacional no processo de inferência.

A distribuição a posteriori é dada por

$$P(\gamma, \sigma_b^2 | \mathbf{y}) \propto P(\sigma_b^2) P(\gamma | \sigma_b^2) \prod_{i=1}^n P(y_i | \gamma_i, \sigma_b^2), \quad (2.37)$$

sendo a distribuição a priori de $\gamma | \sigma_b^2$ dada por uma Normal com média zero e matriz de precisão $Q(\sigma_b^2)$.

Nataro (2013) mostra que essa classe de modelos é amplamente aplicada devido às diferentes formas que as funções $\{f^{(j)}\}$ podem assumir, como por exemplo, modelos lineares generalizados mistos, modelos hierárquicos e modelos espaciais e espaço-temporais.

Os métodos de simulação estocástica apresentados em seções anteriores são frequentemente usados no processo de inferência em modelos gaussianos latentes. No entanto, esses

métodos podem apresentar elevado custo computacional em modelos complexos. A aproximação de Laplace aninhada integrada apresentada a seguir surge como uma alternativa, sendo um método baseado em múltiplas aproximações de Laplace combinadas com integração numérica. É uma extensão da aproximação de Laplace que permite a aproximação das distribuições marginais a posteriori de modelos que pertencem a classe dos modelos gaussianos latentes.

2.12 Aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA)

A aproximação de Laplace aninhada integrada, INLA (do inglês, *Integrated Nested Laplace Approximation*) é uma abordagem computacional introduzida por Rue, Martino e Chopin (2009) para realizar inferência bayesiana em campos latentes Gaussianos. A principal diferença desta abordagem em relação às abordagens bayesianas tradicionais é a de que esta metodologia não necessita de simulações estocásticas das distribuições marginais a posteriori como os métodos MCMC. Esta abordagem substitui as simulações com aproximações determinísticas, precisas e, sobretudo, de maneira rápida na classe de modelos gaussianos latentes.

As distribuições de interesse são as seguintes distribuições a posteriori marginais:

$$P(\gamma_i|\mathbf{y}) = \int P(\gamma_i|\sigma_b^2, \mathbf{y}) P(\sigma_b^2|\mathbf{y}) d\sigma_b^2; \quad (2.38)$$

$$P((\sigma_b^2)_j|\mathbf{y}) = \int P(\sigma_b^2|\mathbf{y}) d(\sigma_b^2)_{-j}, \quad (2.39)$$

em que $d(\sigma_b^2)_{-j}$ representa a soma sobre todos os σ_b^2 menos $(\sigma_b^2)_{-j}$.

A aproximação consiste em construir aproximações aninhadas:

$$\tilde{P}(\gamma_i|\mathbf{y}) = \int \tilde{P}(\gamma_i|\sigma_b^2, \mathbf{y}) \tilde{P}(\sigma_b^2|\mathbf{y}) d\sigma_b^2; \quad (2.40)$$

$$\tilde{P}((\sigma_b^2)_j|\mathbf{y}) = \int \tilde{P}(\sigma_b^2|\mathbf{y}) d(\sigma_b^2)_{-j}, \quad (2.41)$$

sendo $\tilde{P}(\cdot|\cdot)$ a densidade condicional aproximada de seus argumentos. Observe que aproximações para $P(\gamma_i|\mathbf{y})$ são calculadas aproximando $P(\gamma_i|\sigma_b^2, \mathbf{y})$ e $P(\sigma_b^2|\mathbf{y})$ e usando integração numérica em σ_b^2 (soma finita) como apresentado nas equações 2.42 e 2.43. As somas são realizadas sobre os valores de σ_b^2 com pesos Δ_k e Δ_{jk} .

$$\tilde{P}(\gamma_i | y) = \sum_k \tilde{P}(\gamma_i | (\sigma_b^2)_k, y) \tilde{P}((\sigma_b^2)_k | y) \Delta_k \quad (2.42)$$

$$\tilde{P}((\sigma_b^2)_j | y) = \sum_k \tilde{P}((\sigma_b^2)_k | y) \Delta_{jk} \quad (2.43)$$

Para aproximar $P((\sigma_b^2)_j | \mathbf{y})$ usamos a aproximação de $P(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$. A abordagem aninhada torna a aproximação de Laplace muito acurada quando aplicada a modelos gaussianos latentes (RUE; MARTINO; CHOPIN, 2009).

A aproximação INLA pode ser resumida em três etapas:

- **Etapa 1.** Encontrar a aproximação $\tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$ da distribuição marginal a posteriori de σ_b^2 usando aproximação de Laplace;
- **Etapa 2.** Calcular a aproximação $\tilde{P}(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ para valores selecionados de σ_b^2 ;
- **Etapa 3.** Combinar os passos anteriores usando integração numérica (soma finita).

Vamos abordar em detalhes a seguir cada uma dessas etapas.

2.12.1 Etapa 1. Aproximando $P(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$

Pela teoria da probabilidade, temos a seguinte identidade para distribuições conjuntas

$$P(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) = \frac{P(\gamma, \sigma_b^2 | \mathbf{y})}{P(\gamma | \sigma_b^2, \mathbf{y})} \quad (2.44)$$

$$P(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) = \frac{P(\mathbf{y} | \gamma, \sigma_b^2) P(\gamma, \sigma_b^2)}{P(\mathbf{y})} \frac{1}{P(\gamma | \sigma_b^2, \mathbf{y})} \quad (2.45)$$

$$P(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) = \frac{P(\mathbf{y} | \gamma) P(\gamma | \sigma_b^2) P(\sigma_b^2)}{P(\mathbf{y})} \frac{1}{P(\gamma | \sigma_b^2, \mathbf{y})} \quad (2.46)$$

$$P(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) \propto \frac{P(\sigma_b^2) P(\gamma | \sigma_b^2) P(\mathbf{y} | \gamma)}{P(\gamma | \sigma_b^2, \mathbf{y})}. \quad (2.47)$$

A aproximação $\tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$ da distribuição conjunta a posteriori de σ_b^2 , é dada por:

$$\tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) \propto \left[\frac{P(\sigma_b^2) P(\gamma | \sigma_b^2) P(\mathbf{y} | \gamma)}{\tilde{P}_G(\gamma | \sigma_b^2, \mathbf{y})} \right]_{\gamma=\gamma^*(\sigma_b^2)}, \quad (2.48)$$

sendo o numerador equivalente à distribuição a posteriori $P(\gamma, \sigma_b^2 | \mathbf{y})$, $\tilde{P}_G(\gamma | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ a aproximação gaussiana (ANEXO A) da condicional completa de γ e $\gamma^*(\sigma_b^2)$ a moda da condicional completa de γ . Essa expressão é equivalente a aproximação de Laplace, encontrada em Tierney e Kadane's (1986), da distribuição marginal a posteriori de σ_b^2 (RUE; MARTINO; CHOPIN, 2009).

Note que essa expressão só é válida em um ponto, ou seja, para cada σ_b^2 teremos uma moda e, conseqüentemente, uma probabilidade calculada. Portanto, para obter a aproximação da distribuição completa marginal a posteriori de σ_b^2 esta expressão precisa ser avaliada para um dado conjunto de σ_b^2 . A grade pode ser obtida escolhendo valores ao redor dos pontos de maior densidade da distribuição como descrito a seguir.

Assumimos que $\sigma_b^2 = ((\sigma_b^2)_1, (\sigma_b^2)_2, \dots, (\sigma_b^2)_m) \in \mathbb{R}^m$, isto é, o espaço paramétrico de cada hiperparâmetro está definido na reta real, o que pode ser obtido via reparametrização.

Passo 1: Localizamos a moda de $\tilde{P}(\sigma_b^2 | y)$, otimizando $\log \left\{ \tilde{P}(\sigma_b^2 | y) \right\}$. Seja $(\sigma_b^2)^*$ a configuração modal.

Passo 2: Na configuração modal $(\sigma_b^2)^*$ computamos a negativa matriz Hessiana (H), usando diferenças finitas. Seja $\Sigma = H^{-1}$ a matriz de covariância para σ_b^2 se a densidade fosse Gaussiana. Para auxiliar a exploração, usamos variáveis padronizadas z ao invés de σ_b^2 . Seja $\Sigma = V \Lambda V^T$ uma decomposição em autovalores e autovetores, sendo V a matriz de autovetores da matriz Σ e Λ uma matriz diagonal com os autovalores na diagonal, e defina σ_b^2 através de z como:

$$\sigma_b^2(z) = (\sigma_b^2)^* + V \Lambda^{\frac{1}{2}} z. \quad (2.49)$$

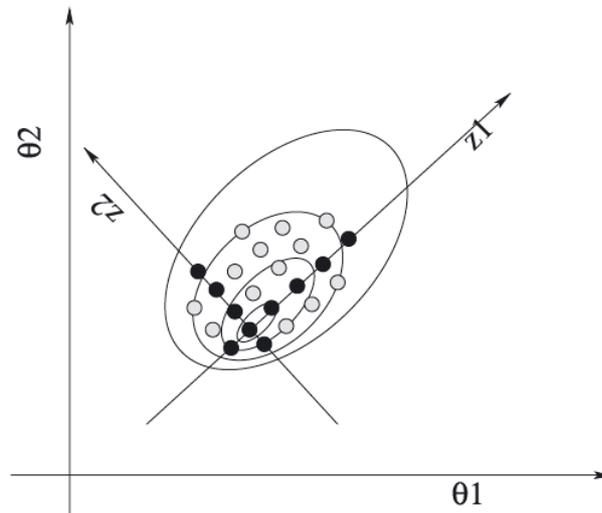
Se $\tilde{P}(\sigma_b^2 | y)$ é uma densidade gaussiana, então z é $N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$. Essa parametrização corrige a escala e a rotação simplificando a integração numérica.

Passo 3: Exploramos $\log \left\{ \tilde{P}(\sigma_b^2 | y) \right\}$ usando a parametrização- z . A Figura 2.3 ilustra o processo para o caso unimodal, representando o gráfico de contorno de $\log \left\{ \tilde{P}(\sigma_b^2 | y) \right\}$ para $m = 2$ com os novos eixos coordenados para z . A ideia é explorar $\log \left\{ \tilde{P}(\sigma_b^2 | y) \right\}$ a fim de localizar a maior massa de probabilidade. Iniciamos com a moda ($z = 0$) e seguimos na direção positiva de z_1 encontrando pontos espaçados $\delta_z = 1$ unidades, enquanto

$$\log \left[\tilde{P} \left\{ \sigma_b^2(0) | y \right\} \right] - \log \left[\tilde{P} \left\{ \sigma_b^2(z) | y \right\} \right] < \delta_\pi, \quad (2.50)$$

sendo, por exemplo, $\delta_\pi = 2, 5$. Esse processo é repetido na coordenada z_2 e então obtemos os pontos em preto na Figura 2.3. Considerando todas as combinações desses pontos encontramos valores intermediários representados pelos pontos em cinza. Estes novos pontos serão incluídos se a condição 2.50 for satisfeita. Uma vez que obtemos um grid regular de pontos, temos que todos os pesos Δ_k na equação (2.42) são iguais.

Figura 2.3 – Ilustração da exploração da marginal a posteriori de σ_b^2 , encontrando pontos de alta densidade por reparametrização.



Fonte: Rue, Martino e Chopin (2009).

2.12.2 Etapa 2. Aproximando $P(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$

Na primeira etapa, encontramos um conjunto de pontos $(\sigma_b^2)_k$ para serem usados no processo de integração. Nesta segunda etapa, consideramos uma aproximação da densidade marginal de cada variável do campo latente $\tilde{P}(\gamma_i | (\sigma_b^2)_k, \mathbf{y})$ fazendo uso da malha de pontos obtida na primeira etapa. Tal aproximação será posteriormente usada para integração numérica que aproxima

$$\tilde{P}(\gamma_i | y) = \sum_k \tilde{P}(\gamma_i | (\sigma_b^2)_k, y) \tilde{P}((\sigma_b^2)_k | y) \Delta_k. \quad (2.51)$$

Para encontrar a aproximação $\tilde{P}(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ usada nessa expressão Rue, Martino e Chopin (2009) sugerem três alternativas, a aproximação gaussiana, a aproximação de Laplace e a aproximação de Laplace simplificada.

Schrodle et al. (2011) mostram que dependendo do número de contrastes lineares envolvido nos dados, pode haver grande diferença entre o tempo computacional considerando

essas três alternativas. Em geral, a aproximação gaussiana tende a ser mais rápida, seguida da aproximação de Laplace simplificada e posteriormente a aproximação de Laplace completa.

A aproximação gaussiana para $P(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ possui média $\mu_i(\sigma_b^2)$ e a variância marginal $\sigma_i^2(\sigma_b^2)$ que são obtidas diretamente da aproximação gaussiana $\tilde{P}_G(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ usada na equação (2.48) apresentada na Seção 2.12.1 no cálculo de $\tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$, isto é,

$$\tilde{P}(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y}) = N(\gamma_i; \mu_i(\sigma_b^2), \sigma_i^2(\sigma_b^2)), \quad (2.52)$$

sendo $\mu(\sigma_b^2)$ o vetor de médias da aproximação gaussiana e $\sigma^2(\sigma_b^2)$ o vetor correspondente de variâncias marginais.

Essa aproximação frequentemente apresenta bons resultados, mas pode apresentar erros de locação ou erros devido à falta de assimetria (RUE; MARTINO; CHOPIN, 2009).

A segunda opção, mais custosa, porém mais precisa, é a aproximação de Laplace

$$\tilde{P}_{LA}(\gamma_i | \sigma_b^2, y) \propto \frac{P(\gamma, \sigma_b^2, y)}{\tilde{P}_{GG}(\gamma_{-i} | \gamma_i, \sigma_b^2, y)} \Big|_{\gamma_{-i} = \gamma_{-i}^*(\gamma_i, \sigma_b^2)}, \quad (2.53)$$

em que γ_{-i} representa o vetor γ sem o i -ésimo elemento, $\tilde{P}_{GG}(\gamma_{-i} | \gamma_i, \sigma_b^2, y)$ é a aproximação gaussiana de $\gamma_{-i} | \gamma_i, \sigma_b^2, y$ e $\gamma_{-i}^*(\gamma_i, \sigma_b^2)$ é a configuração modal de $P(\gamma_{-i} | \gamma_i, \sigma_b^2, y)$.

Esta opção é muito custosa pois é necessário recalculer cada aproximação gaussiana de $\tilde{P}_{GG}(\gamma_{-i} | \gamma_i, \sigma_b^2, y)$ para cada valor de γ_i e de σ_b^2 , uma vez que esta opção requer n fatorizações da matriz de precisão e o cálculo da moda em cada passo. No entanto, os autores sugerem duas modificações. Uma delas consiste em aproximar a moda pelo valor médio, ou seja,

$$\gamma_{-i}^*(\gamma_i, \sigma_b^2) \approx E_{\tilde{P}_G}(\gamma_{-i} | \gamma_i). \quad (2.54)$$

Outra modificação reside no fato de que somente alguns γ_j que estão “próximos” de γ_i devem possuir efeito marginal em γ_i . Denotando a região de interesse com relação a distribuição marginal de γ_i por $R_i(\sigma_b^2)$, temos

$$\frac{E_{\tilde{P}_G(\gamma_j | \gamma_i)} - \mu_j(\sigma_b^2)}{\sigma_j(\sigma_b^2)} = a_{ij}(\sigma_b^2) \frac{\gamma_i - \mu_i(\sigma_b^2)}{\sigma_i(\sigma_b^2)}, \quad (2.55)$$

para algum $a_{ij}(\sigma_b^2)$, $i \neq j$. Podemos considerar uma regra simples para construir $R_i(\sigma_b^2)$:

$$R_i(\sigma_b^2) = \{j : |a_{ij}(\sigma_b^2)| > 0,001\}. \quad (2.56)$$

Com isso, usando a região de interesse $R_i(\sigma_b^2)$, será necessário apenas fatorar matrizes esparsas de dimensão $|R_i(\sigma_b^2)| \times |R_i(\sigma_b^2)|$.

Uma terceira opção mais rápida que a de Laplace, de aproximação de $P(\gamma_i | (\sigma_b^2)_k, y)$, é denominada aproximação de Laplace simplificada. É obtida realizando expansões de Taylor de terceira ordem no numerador e primeira ordem no denominador da equação

$$\tilde{P}_{LA}(\gamma_i | \sigma_b^2, y) \propto \frac{P(\gamma, \sigma_b^2, y)}{\tilde{P}_{GG}(\gamma_{-i} | \gamma_i, \sigma_b^2, y)} \Big|_{\gamma_{-i} = \gamma_{-i}^*(\gamma_i, \sigma_b^2)}. \quad (2.57)$$

Assim, consegue-se contornar os problemas de locação e assimetria da aproximação gaussiana e ainda obter um desempenho computacional superior à aproximação de Laplace.

2.12.3 Etapa 3. Integração numérica

Nas etapas anteriores encontramos as aproximações $\tilde{P}(\gamma_i | (\sigma_b^2)_k, y)$ e $\tilde{P}((\sigma_b^2)_k | y)$ para uma grade de σ_b^2 . A Etapa 3 combina as etapas anteriores usando integração numérica (soma finita) afim de encontrar as marginas a posteriori de interesse como apresentado nas equações 2.42 e 2.43.

2.13 INLA x MCCM

Vários estudos mostram que o desempenho e o tempo computacional da aproximação INLA são satisfatórios, obtendo resultados similares aos métodos de simulação de forma mais rápida.

Taylor e Diggle (2014) comparam a aproximação INLA e o método MCCM em um contexto espacial considerando modelos hierárquicos bayesianos. O estudo de simulação confirmou a vantagem do INLA em termos de tempo computacional, mas mostra que o INLA tem baixa precisão em muitos cenários.

Grilli, Metelli e Rampichini (2014) apresentam, através de um estudo de simulação, o algoritmo INLA para um modelo logit com intercepto aleatório, comparando os resultados com aqueles obtidos da amostragem MCCM. Como medidas de desempenho para comparação usam o viés relativo das estimativas pontuais dos parâmetros, intervalos de credibilidade e tempo computacional. O INLA apresentou estimativas semelhantes às obtidas pelo MCCM em menor tempo computacional.

A principal limitação do método INLA é a de que o campo latente deve ser gaussi-

ano para a metodologia estimar corretamente as densidades a posteriori. Martins e Rue (2014) propuseram uma metodologia que permite que esse campo possua alguns componentes independentes não necessariamente gaussianos, ou seja, permite uma maior flexibilidade nessa suposição. No entanto, tais distribuições deverão ter um comportamento aproximadamente gaussiano. A solução preserva a natureza gaussiana do campo latente, necessária para aplicação da aproximação INLA.

Muff et al. (2015) consideram a análise bayesiana de modelos de erro de medida usando a aproximação INLA, discutindo como as abordagens mais comuns para ajustar erros de medida (erro de medida clássico e erro de medida de Berkson) se encaixam no contexto dos modelos gaussianos latentes.

Akerkar, Martino e Rue (2010) investigaram o uso da aproximação INLA para resolver problemas na área de análise de sobrevivência, comparando os resultados com os resultados obtidos usando MCCM. As estimativas dos parâmetros foram muito parecidas em ambos os métodos confirmando a ideia de Rue, Martino e Chopin (2009).

Em geral, as distribuições marginais a posteriori não possuem forma fechada e métodos computacionais para obtenção dessas distribuições são frequentemente usados, como os métodos de Monte Carlo via Cadeia de Markov. No entanto, Rue, Martino e Chopin (2009) salientam que para modelos gaussianos latentes esses métodos podem não ser a ferramenta adequada, pois podem apresentar elevado tempo computacional ou até mesmo problemas de convergência. Nesse ponto, o INLA é uma alternativa, visto que sua eficiência computacional é sua principal vantagem frente aos métodos MCCM.

A principal diferença da abordagem INLA em relação às abordagens bayesianas tradicionais é que esta metodologia não necessita de simulações estocásticas das distribuições marginais a posteriori como os métodos baseados em simulações de cadeias de Markov. Esta técnica substitui as simulações por aproximações determinísticas, precisas e, sobretudo, rápidas. A qualidade do ajuste com esta abordagem é extremamente alta, tal que, em geral, para um grande número de simulações de MCCM não apresentam diferenças significativas do INLA. A principal vantagem é a agilidade computacional que é muito superior quando comparado com os métodos tradicionais mesmo para um campo latente com alta dimensão. Outra vantagem é a de que, devido a sua natureza de aproximação analítica, o INLA não sofre dos conhecidos problemas de convergência (GRILLI; METELLI; RAMPICHINI, 2014).

2.14 Seleção de modelos

No processo de seleção de modelos, em geral buscamos o modelo mais parcimonioso, isto é, o modelo que envolva o mínimo de parâmetros possível e que explique bem o comportamento da variável resposta. Dentre os vários critérios para a seleção de modelos, os critérios baseados no máximo da função de verossimilhança são os mais utilizados, como o fator de Bayes, o critério bayesiano de Schwarz (BIC) e o critério de informação de Akaike (AIC).

Considerando $P(y | \theta)$ a função de verossimilhança de um modelo para y indexado por um parâmetro θ e uma distribuição a priori $P(\theta)$. A verossimilhança marginal de y é definida como

$$P(y) = \int P(y | \theta) P(\theta) d\theta. \quad (2.58)$$

O fator de Bayes para comparação de modelos é calculado a partir da razão entre as verossimilhanças marginais. No entanto, o cálculo dessas verossimilhanças pode apresentar problemas computacionais.

A verossimilhança marginal $P(y)$ pode ser expressa como uma esperança em relação a distribuição a posteriori dos parâmetros, motivando assim uma estimativa baseada em uma amostra de Monte Carlo da posteriori (RAFTERY et al., 2007).

Pelo teorema de Bayes,

$$\frac{1}{P(y)} = \int \frac{P(\theta | y)}{P(y | \theta)} d\theta = E \left[\frac{1}{P(y | \theta)} | y \right]. \quad (2.59)$$

Portanto, a verossimilhança marginal é a média harmônica a posteriori das verossimilhanças. Isso sugere que a verossimilhança marginal $P(y)$ pode ser aproximada pela média harmônica amostral das verossimilhanças,

$$\hat{P}_{HM}(y) = \left[\frac{1}{B} \sum_{t=1}^B \frac{1}{P(y | \theta^t)} \right]^{-1}, \quad (2.60)$$

baseado em B saídas $\theta^1, \dots, \theta^B$ da distribuição a posteriori $P(\theta | y)$. Portanto, o estimador mais simples da verossimilhança marginal é a média harmônica das verossimilhanças. Embora esse estimador seja consistente e não viesado, seu recíproco pode ter variância infinita e por isso, é instável em geral.

Raftery et al. (2007) apresentaram um método para estabilização desse estimador con-

siderando que a distribuição a posteriori das logverossimilhanças é aproximadamente uma distribuição Gama. Isso produz estimativas da logverossimilhança marginal e critérios de seleção de modelos semelhantes ao AIC , denominado $AICM$ e calculado por:

$$AICM = 2\hat{l}_{max} - 2\hat{d} = 2\hat{l}_{max} - 4s_l^2 = 2(\bar{l} - s_l^2). \quad (2.61)$$

O modelo com menor $AICM$ é considerado o melhor modelo, ou o modelo de melhor ajuste. Esse critério de seleção têm a vantagem computacional que pode ser calculado diretamente da amostra gerada pelo método MCCM sem recorrer a qualquer outra análise mais complicada.

O DIC (*Deviance Information Criterion*) é uma generalização hierárquica do AIC. É muito usado na seleção de modelos bayesianos em que a distribuição a posteriori dos modelos é obtida pelo MCCM. A ideia é que modelos com menor DIC devem ser escolhidos frente a modelos com maior DIC. No entanto, Rue, Martino e Chopin (2009) apresentam um cálculo para o critério DIC considerando o contexto INLA. A deviance é definida como

$$D(\gamma, \theta) = -2 \sum_{i \in I} \log \{P(y_i | \gamma_i, \theta)\} + constante. \quad (2.62)$$

O DIC é definido como duas vezes a média da deviance menos a deviance da média. A média da deviance pode ser calculada em duas etapas: primeiro, calculando a média condicionada a θ usando integração numérica univariada para cada $i \in I$ e, em seguida, integrar $P(\theta | y)$ em relação a θ . A deviance da média requer a média a posteriori de cada $\gamma_i, i \in I$, que é calculado da marginal a posteriori dos γ_i 's.

REFERÊNCIAS

- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR 12806: análise sensorial de alimentos e bebidas. Terminologia. Rio de Janeiro, 1993.
- AKERKAR, R.; MARTINO, S.; RUE, H. Implementing Approximate Bayesian Inference for Survival Analysis using Integrated Nested Laplace Approximations. **PREPRINT STATISTICS**.n.3, 2010.
- ALTSHULER, B. Modeling of Dose Response Relationships. **Environmental Health Perspectives**, v.42, p. 23-27, 1981.
- AZZALINI, A.; CAPITANIO, A. Statistical applications of the multivariate skew normal distribution. **Journal of the Royal Statistical Society serie B**, Wiley Library, v.61, p. 579-602, 1999.
- BARROSO, C. M.; BUENO FILHO, J. S. S. Testes triangulares considerando a distribuição binomial: um exemplo com qualidade de café. **Revista Brasileira de Biometria**. São Paulo, v.31, n.2, p.189-205, 2013.
- BERNARDO, J.M. SMITH, A.F.M. **Bayesian Theory**. New York: Wiley, 1994. 608p.
- BROCKHOFF, P. B.; SCHLICH, P. Handling replications in discrimination tests. **Food Quality and Preference**, Elsevier, v.9, n.5, p. 303-312, 1998.
- CARR, B. T.; CIVILLE, G. V.; MEILGAARD, M. C. **Sensory evaluation techniques**. 4nd ed. Boca Raton: CRC Press, 2006. 448 p.
- CHRISTENSEN, R. H. B. **Sensometrics: Thurstonian and statistical model**. Kongens Lyngby: DTU Informatics, 2012. 388 p.
- COLEMAN, M., MARKS, H. Topics in dose-response modelling. **Journal of Food Protection**, v.61, n.11, p. 1425-1582, 1998.
- ENNIS, D. M. The power of sensory discrimination methods. **Journal of Sensory Studies**. v.8, n.4, p. 353-370, 1993.
- FISHER, R. A. **Statistical methods for research workers**. New York: Hafner Press, 1925.
- GELFAN, A. L.; SMITH, A. F. M. Sampling-based approaches to calculating marginal densities . **Journal of the American Statistical Association**. American Statistical Association, v. 85, n.410, p.398-409, 1990.
- GELMAN, A.; RUBIN, D. B. Inference from iterative simulation using multiple sequences.

Statistical Science. Statistical Science, v. 7, n.4, p.457-511, 1992.

GRILLI, L.; METELLI, S.; RAMPICHINI, C. Bayesian estimation with integrated nested Laplace approximation for binary logit mixed models. **Journal of Statistical computation and simulation.** Taylor e Francis, p.1-9, 2014.

HINKELMANN, K.; KEMPTHORNE, O. **Design and analysis of experiments:** introduction to experimental design. 2nd ed. New York: J. Wiley, 2007. v. 1, 631 p.

KEMP, S.E.; HOLLOWOOD, T.; HORT, J. **Sensory Evaluation:** a practical handbook. 1nd ed. London: J. Wiley, 2009. 196 p.

KUNERT, J. MEYNER, M. One the triangle test with replications. **Food Quality and Preference.** Elsevier Science, v.10, p.477-482, 1999.

LAWLESS, H. T.; HEYMANN, H **Sensory evaluation of food:** principles and practices. 2nd ed. New York: Springer, 2010. 595 p.

LEE, H. S.; O MAHONY, M. The evolution of a model: A review of Thurstonian and conditional stimulus effects on difference testing. **Food Quality and Preference,** Elsevier, v.18, p. 369-383, 2007.

LLEIXÀ, J.; MARTÍN, V.; PORTILLO, M.;CARRAU, F.; BELTRAN, G.; MAS, A. Comparison of Fermentation and Wines Produced by Inoculation of *Hanseniaspora vineae* and *Saccharomyces cerevisiae*. **Frontiers in Microbiology,** Original Research, v.7, n.338, 2016.

LUCE, R. D. Thurstone and sensory scaling: then and now. **Psychological review.** American Psychological Association, v.101, n.2, p.271-277, 1994.

MARTINS, R. G.; RUE, H. Extending integrated nested Laplace approximation to a class of near-gaussian latent models. **Scandinavian journal of statistics: Theory and applications.** Wiley Publishing, v.41, p.893-912, 2014.

McCULLAGH, P.,NELDER, J.A. **Generalized linear models.** London: Chapman e Hall, 1989. 526p.

MCCULLOCH, C. E.; SEARLE, S. R. **Generalized, Linear, and Mixed Models.** New York: John Wiley e Sons, 2001. 325p.

MUFF, S.; RIEBLER, A.; HELD,L.;RUE, H.; SANER,P. Bayesian analysis of measurement error models using integrated nested Laplace approximations. **Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics).** v.64, n.2, p.231-252, 2015.

NATARIO, I. Métodos computacionais: INLA, Integrated Nested Laplace Approximation. **Boletim Sociedade Portuguesa de Estatística.** Lisboa, n.2, 2013.

NELDER, J. A.; WEDDERBURN, W. M. Generalized linear models. **Journal of the Royal Statistical Society. Series A**. Blackwell Publishing, v. 135, n.3, p.370-384, 1972.

NEWMAN, L. P.; TORRES, S. J.; BOLHUIS, D. P.; KEAST, R. S. J. The influence of a high-fat meal on fat taste thresholds. **Appetite**. Elsevier, v. 101, p.199-204, 2016.

O'MAHONY, M. ROUSSEAU, B. Discrimination testing: a few ideas, old and new. **Food Quality and Preference**, Elsevier, v.14, p. 157-164, 2002.

PENG, M.; JAEGER, S. R.; HAUTUS, M. J. Determining odour detection thresholds: Incorporating a method-independent definition into the implementation of ASTM E679. **Food Quality and Preference**, Barking, v.25, n.2, p. 95-104, 2012.

PRESS, S. J. **Subjective and Objective Bayesian Statistics**. New York: John Wiley e Sons, 2003. 559p.

RAFTERY, A. E.; NEWTON, M. A.; SATAGOPAN, J. M.; KRIVITSKY, P. N. Estimating the Integrated Likelihood via Posterior Simulation Using the Harmonic Mean Identity. **Bayesian Statistics**, v.8, p. 1-45, 2007.

RAFTERY, A. E.; LEWIS, S.M. One long run with diagnostics: Implementation strategies for Markov chain Monte Carlo. **Statistical Science**, v.7, n.4, p. 493-497, 1992.

ROESSLER, E. B.; PANGBORN, R. M.; SIDEL, J. L.; STONE, H. Expanded statistical tables for estimating significance in paired-preference, paired difference, duo-trio and triangle tests. **Journal of Food Science**, Chicago, v.43, n.3, p. 940-943, 1978.

RUE, H.; MARTINO, S.; CHOPIN, N. Approximate Bayesian inference for latent Gaussian models by using integrated nested Laplace approximations. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B - Statistical Methodology**. v.71, n.2, p. 319-392, 2009.

SCHRODLE, B.; HELD, L.; RIEBLER, A.; DANUSER, J. Using integrated nested Laplace approximations for the evaluation of veterinary surveillance data from Switzerland: a case-study. **Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)**. Blackwell Publishing Ltd, v.60, n.2, p.261-279, 2011.

TANNER, M. WONG, W. The calculation of posterior distributions by data augmentation. **Journal of the American Statistical Association**, v.82, p.528-550, 1987.

TAYLOR, B. M.; DIGGLE, P. J. INLA or MCMC? A tutorial and comparative evaluation for spatial prediction in log-Gaussian Cox process. **Journal of Statistical Computation and Simulation**. Taylor e Francis, v.84, n.10, p. 2266-2284, 2014.

THURSTONE, L. L. A law of comparative judgment. **Psychology Review**. American Psychological Association, v.34, p. 273-286, 1927.

SEGUNDA PARTE

Nesta parte do trabalho apresentamos dois artigos que abordam a análise estatística de testes triangulares, sendo o primeiro usando o método de simulação Gibbs sampler e o segundo usando a abordagem INLA.

ARTIGO 1 Análise bayesiana de testes triangulares: I-Amostragem Gibbs com dados aumentados

RESUMO

Diferenças em produtos alimentícios podem ser estudadas com o uso de testes de discriminação como o teste triangular em que cada provador recebe três amostras codificadas, sendo duas iguais, devendo identificar a amostra diferente. Frequentemente considera-se que a proporção de respostas corretas segue distribuição normal. No entanto, podemos modelar diretamente o número de acertos usando a distribuição binomial considerando que os provadores têm probabilidades diferentes de acertar a resposta correta. Dentro das repetições de um mesmo ensaio eles podem apresentar diferentes respostas no teste, no entanto as respostas podem estar correlacionadas, o que é consistente com as ideias psicológicas thurstonianas sobre os processos de percepção. O modelo para analisar esses experimentos deve ser capaz de captar essa possível correlação existente entre os efeitos de provadores. A análise bayesiana através de modelos hierárquicos bayesianos é uma alternativa que trata parâmetros como variáveis aleatórias e não constantes desconhecidas. O objetivo deste trabalho é justificar a importância de se considerar a possível correlação existente entre os efeitos de provadores e apresentar um modelo que considere essa ideia na análise dos testes. Para a estimação usamos a amostragem Gibbs associada à técnica de dados aumentados para modelos hierárquicos bayesianos. Os resultados permitem concluir que esse método apresenta bons resultados e pode ser utilizado na análise de testes triangulares replicados em análise sensorial.

Palavras-chave: Amostragem Gibbs. Dados aumentados. Testes triangulares. Thurstone.

1 INTRODUÇÃO

Testes de discriminação formam uma importante metodologia usada amplamente em análise sensorial. Em particular, os testes triangulares são métodos utilizados para determinar se existe diferença entre duas ou mais amostras. São apresentadas ao provador três amostras codificadas, sendo duas iguais, do mesmo tratamento e outra de um segundo tratamento, cabendo ao provador avaliar as amostras na ordem fornecida e identificar a “diferente” (KEMP; HOLLOWOOD; HORT, 2009).

Dados sensoriais discriminativos replicados, em que J provadores avaliam I tratamentos em K repetições são frequentemente avaliados através da análise de variância (ANAVA) para dois fatores fixos, ou seja, supõe-se que a proporção de respostas corretas considerando as repetições em cada ensaio segue distribuição de probabilidade normal. No entanto, apesar de constantemente usada, talvez pela facilidade de implementação e interpretação, esta pode não ser a melhor opção.

De forma estatisticamente mais poderosa, podemos modelar diretamente o número de acertos usando a distribuição binomial. A suposição básica para este modelo é que as respostas de todos os provadores são independentes umas das outras e a probabilidade π de acertar a resposta correta é a mesma para cada provador.

No entanto, a variação entre provadores sempre existe e portanto, não é razoável assumir que todos os provadores, mesmo em um painel treinado, tenham a mesma habilidade de discriminação (BI,2003).

Kunert e Meyners (1999) propuseram um modelo binomial alternativo para testes triangulares replicados em que os provadores têm diferentes probabilidades de identificar corretamente a amostra diferente. O modelo considera que, se os provadores não sabem a resposta eles têm igual probabilidade de acertar e se os provadores acreditam saber a resposta têm uma probabilidade de acerto que leva em conta a habilidade de cada provador.

Em outras palavras, se o provador não sabe a resposta, a probabilidade de acerto casual é $\pi_{ij} = \frac{1}{3}$. Se ele sabe, tem algum discernimento, isto corresponde a uma probabilidade maior de acertar, que é igual a $\pi_{ij} = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}p_{ij}$ em que p_{ij} é a probabilidade média de um provador j ter sucesso no tratamento i .

Os autores consideram a probabilidade p_{ij} uma variável aleatória assumindo que os provadores são retirados de uma superpopulação. Assim, neste trabalho modelamos a probabili-

dade p_{ij} através da distribuição acumulada normal, mas também poderíamos usar a distribuição logística que é frequentemente usada na análise de ensaios do tipo dose-resposta, entre outras.

A teoria bayesiana oferece uma alternativa à análise clássica de modelos binomiais, pois trata o parâmetro π como uma variável aleatória seguindo uma distribuição ao invés de uma constante desconhecida. Essa abordagem aplicada ao parâmetro π é consistente com as ideias psicológicas sobre os processos de percepção e decisão (BI, 2003).

Thurstone (1929) estudando como o ser humano usa os sentidos para avaliar as características do produto em testes sensoriais observou que a não homogeneidade existente entre as amostras e as variações no mecanismo neural do provador fazem com que a intensidade da percepção do produto não seja constante durante o teste, ou seja, a cada repetição o provador estabelece uma intensidade de percepção diferente.

Assim, o processo de discriminação correspondente a um dado estímulo não é fixo e por isso, é importante levar em conta a variação existente nas respostas de um mesmo provador em um mesmo ensaio. Para isso devemos considerar um modelo que englobe essas correlações existentes entre os efeitos de provadores.

Barroso e Bueno Filho (2013) analisaram um exemplo com dados reais de um teste triangular considerando um modelo fixo para os parâmetros e observaram que a distribuição binomial foi mais eficiente em relação à análise usual (normalidade), com maior poder de discriminação, especialmente quanto aos limiares de detecção. No entanto, este modelo não leva em conta agregações de observações do mesmo provador. Pode-se estar superestimando a precisão das estimativas.

Uma alternativa mais adequada seria supor um modelo linear generalizado que considere a correlação existente entre os efeitos de provadores. Este modelo deve ser capaz de produzir uma melhor análise, com capacidade de detectar diferenças entre os tratamentos com maior poder e produzir intervalos de credibilidade mais estreitos para as estimativas. Além disso, permite a generalização dos resultados para a população de provadores ao invés de provadores específicos. Considerar provador como efeito fixo pode levar a conclusões que as diferenças entre os tratamentos são maiores do que realmente são (PELTIER et al., 2014).

Esse modelo também permite visualizar as estimativas de cada efeito de provador, além de permitir que se realize simultaneamente a análise da diferença entre os tratamentos e a análise do desempenho do painel de provadores (PELTIER et al., 2014).

Na análise desses modelos quando as distribuições condicionais completas são conhe-

cidas podemos usar a amostragem Gibbs que é um algoritmo MCMC usado para obter uma sequência de observações que são aproximadas da distribuição a posteriori conjunta, quando a amostragem direta é difícil. O amostrador pode ser visualizado como uma implementação prática do fato de que o conhecimento das distribuições condicionais é suficiente para a determinação da distribuição conjunta, se ela existir (CASELLA; GEORGE, 1992).

Na aplicação que vamos descrever neste trabalho, essas distribuições não apresentam forma padrão (por exemplo, normal, gamma) e o processo de simulação pode se tornar difícil. Usamos então a técnica de dados aumentados apresentada por Tanner e Wong (1987) no qual adicionamos variáveis latentes ao processo de amostragem e então obtemos distribuições condicionais completas na forma padrão.

Considerar as possíveis correlações entre os efeitos de provadores ainda é desafiador para pesquisadores da área sensorial devido à dificuldade associada à escolha dos efeitos aleatórios, escolha do modelo adequado e interpretação dos resultados. Mas, justificada a importância, o objetivo deste trabalho é apresentar a inferência bayesiana com amostragem Gibbs associada à técnica de dados aumentados usando um modelo hierárquico aplicado à análise de testes triangulares replicados que considere a correlação existente entre os efeitos de provadores.

2 MATERIAL E MÉTODOS

2.1 Dados

Os dados utilizados nesse trabalho são provenientes de um experimento conduzido no esquema fatorial para avaliar a adição de diferentes tipos de adulterantes em amostras de café. Os fatores estudados foram: tipos de adulterantes em três níveis (casca de café, milho e palha de café) e proporção de adulteração em seis níveis (1%, 10%, 20%, 30%, 40% e 50%). O delineamento experimental foi em blocos casualizados, sendo que cada um dos vinte provadores constituiu um bloco. O teste consiste em apresentar ao provador três amostras, sendo duas iguais e uma diferente. Cada provador teve três chances para cada combinação de fatores devendo identificar, em cada ensaio, a amostra que considera diferente das demais (TAVARES, 2012).

2.2 Modelo

Seja Y_{ij} a variável aleatória Bernoulli associada ao indivíduo j no tratamento i , sendo $Y_{ij} = 1$ ou $Y_{ij} = 0$ no caso de acerto ou erro, respectivamente, no teste triangular. Temos então, a função de verossimilhança dos n ensaios referente a um experimento com J provadores para avaliar I tratamentos

$$L(\tau, b, \sigma_b^2 | y) \propto \prod_{i=1}^{18} \prod_{j=1}^{20} \pi_{ij}^{y_{ij}} (1 - \pi_{ij})^{m_{ij} - y_{ij}}, \quad (2.1)$$

em que

y_{ij} : número de respostas corretas do provador j no tratamento i ;

m_{ij} : número de repetições do provador j no tratamento i ;

$\pi_{ij} = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}\Phi(\eta_{ij})$ em que Φ é a função distribuição acumulada da normal padrão;

$\eta = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{b} = \mathbf{W}\boldsymbol{\gamma}$ é o vetor de combinações lineares associadas aos provadores e tratamentos dada pela matriz de delineamento \mathbf{W} e pelo vetor de efeitos $\boldsymbol{\gamma}$;

\mathbf{X} : matriz de delineamento associada aos coeficientes de regressão;

\mathbf{Z} : matriz de delineamento associada aos provadores;

$\gamma = (\beta, \mathbf{b})$ em que β é o vetor de efeitos fixos associado aos coeficientes de regressão e \mathbf{b} é o vetor de efeitos aleatórios associado a blocos (provadores);

Para as componentes dos vetores β e \mathbf{b} assumimos, respectivamente, as prioris $N(0, 100)$ e $N(0, \sigma_b^2)$. Note que, o hiperparâmetro σ_b^2 modela a possível correlação existente entre os efeitos de provadores.

Por conveniência de notação assumimos o vetor $\gamma = (\beta, \mathbf{b})$ e então uma priori gaussiana para este vetor, $\gamma \mid \sigma_b^2 \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{Q}^{-1}(\sigma_b^2))$, sendo $\mathbf{0}$ um vetor de zeros e \mathbf{Q} a matriz de precisão dependente de σ_b^2 .

Assumimos que o campo latente γ admite propriedades de independência condicional e, portanto, o campo latente é um campo aleatório de Gauss Markov com uma matriz de precisão esparsa $\mathbf{Q}(\sigma_b^2)$.

Para o hiperparâmetro σ_b^2 foi estabelecida uma priori qui-quadrado inversa escalada com $\nu_b = 5$ graus de liberdade e parâmetro de escala s_b^2 igual a 1, ou seja, $\sigma_b^2 \sim \chi_{scal}^{-2}(5, 1)$.

A distribuição a posteriori conjunta é dada por

$$P(\gamma, \sigma_b^2 \mid \mathbf{y}) \propto (\sigma_b^2)^{-(1+\frac{5}{2})} \mid \mathbf{Q} \mid^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{5}{2\sigma_b^2} - \frac{1}{2}\gamma' \mathbf{Q} \gamma + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \log [\pi_{ij}^{y_{ij}} (1 - \pi_{ij})^{m_{ij} - y_{ij}}]} \quad (2.2)$$

As distribuições condicionais completas dos vetores β , \mathbf{b} e σ_b^2 não apresentam forma padrão (por exemplo, normal, gamma) e, então, usamos a técnica de dados aumentados apresentada por Tanner e Wong (1987) afim de facilitar o processo de simulação.

Seja u um vetor de variáveis latentes adicionadas ao modelo e a distribuição a posteriori modificada dada por

$$P(\gamma, \sigma_b^2, u \mid y) \propto P(\gamma, \sigma_b^2, u) L(y \mid \gamma, \sigma_b^2, u). \quad (2.3)$$

Podemos mostrar que a distribuição condicional completa a posteriori $P(\gamma \mid y, \sigma_b^2, u)$ é normal, $P(\sigma_b^2 \mid y, \gamma, u)$ é qui-quadrado inversa escalada e $P(u \mid y, \gamma, \sigma_b^2)$ é normal. As três distribuições condicionais completas e a implementação do algoritmo Gibbs sampler associado a técnica de dados aumentados é então dada por:

Passo 1. Amostrando de

$$\boldsymbol{\gamma} \mid \mathbf{y}, \sigma_b^2, \mathbf{u} \sim MVN(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{M}), \quad (2.4)$$

sendo

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{M} \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{u} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{u} \end{bmatrix}; \quad (2.5)$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}'\mathbf{X} + 0.01\mathbf{I} & \mathbf{X}'\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z}'\mathbf{X} & \mathbf{Z}'\mathbf{Z} + (1/\sigma_b^2)\mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

em que \mathbf{I} é a matriz identidade.

Passo 2. Amostrando de

$$\sigma_b^2 \mid \mathbf{y}, \mathbf{u} \sim \chi_{scal}^{-2}(\nu_b^*, s_b^{2*}), \quad (2.7)$$

sendo $\nu_b^* = \nu_b + q$ e $s_b^{2*} = \frac{\mathbf{b}'\mathbf{b} + \nu_b s_b^2}{\nu_b + q}$, em que q é o número de colunas da matriz \mathbf{Z} associada a provadores.

Passo 3. Amostrando de

$$u_i \sim \begin{cases} N(u_i \mid \eta, 1) I[u_i < 0], & y_i = 0 \\ N(u_i \mid \eta, 1) I[u_i > 0], & y_i = 1 \end{cases}. \quad (2.8)$$

Passo 4. Voltar ao Passo 1.

O algoritmo iterativo de Gibbs continua até atingir um critério de parada pré-especificado. Ao final do processo obtemos uma amostra da distribuição conjunta a posteriori dada na equação (2.3). Para cada componente dos vetores $\boldsymbol{\beta}$ e \mathbf{b} e para a variância de provadores σ_b^2 podemos plotar um histograma da distribuição marginal a posteriori e então calcular as médias a posteriori marginais dos parâmetros, os intervalos de credibilidade 95% HPD (*highest posterior density*) e desvio padrão associados.

Uma medida comumente usada no estudo de adulteração de alimentos é o limiar de detecção (*threshold*), que corresponde a porcentagem de adulteração a partir da qual o adulterante se torna perceptível. Podemos estimar esse valor através das curvas de dose-reposta que representam a relação entre a probabilidade de sucesso π e a porcentagem de adulteração (LAWLESS; HEYMANN, 2010). No teste triangular devemos encontrar a porcentagem do adulterante associada à probabilidade $\pi = 2/3$, pois nesse ponto temos a maior inclinação da curva, ou seja, onde há maior variabilidade nas respostas.

Para efeito de comparação apresentamos, para cada adulterante, as curvas médias estimadas para a proporção de acertos e as curvas médias observadas considerando o modelo fixo apresentado por Barroso e Bueno Filho (2013), que não leva em conta o efeito aleatório de provador.

Para avaliar o desempenho do modelo que considera a correlação existente entre os efeitos de provadores usamos o coeficiente médio de correlação intraclasse. Segundo Fisher (1925) quanto mais próximo do valor zero maior a variabilidade intra-classe, ou seja, entre as respostas de um provador, fornecendo mais evidências para assumirmos esse modelo.

2.3 Seleção de modelos

Testamos a significância dos modelos de regressão até quinto grau utilizando uma versão do critério de Akaike (AICM) com base na simulação a posteriori (RAFTERY et al., 2007), estimado por

$$AICM = 2(\bar{l} - s_l^2) \quad (2.9)$$

em que \bar{l} e s_l^2 representaram a média e a variância das logverossimilhanças respectivamente. O modelo com menor *AICM* foi considerado o melhor modelo, ou modelo com melhor ajuste.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os modelos de regressão até o quinto grau com interação foram ajustados para verificar qual deles melhor explica o comportamento da variável resposta. Os modelos representam a relação entre o preditor linear η e as porcentagens de adulteração, x , para cada adulterante, $i = 1, 2, 3$. A Tabela 3.1 apresenta os valores de $AICM$ para estes modelos.

Tabela 3.1 Critério de informação de Akaike para modelos de regressão em que x é a porcentagem de adulterante estandardizada.

MODELO PARA DOSE DE CONTAMINANTE (η_i)	AICM
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2 + \beta_{3i}x^3 + \beta_{4i}x^4 + \beta_{5i}x^5$	1002,90
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2 + \beta_{3i}x^3 + \beta_{4i}x^4$	1002,31
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2 + \beta_{3i}x^3$	997,41
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2$	996,71
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x$	995,01

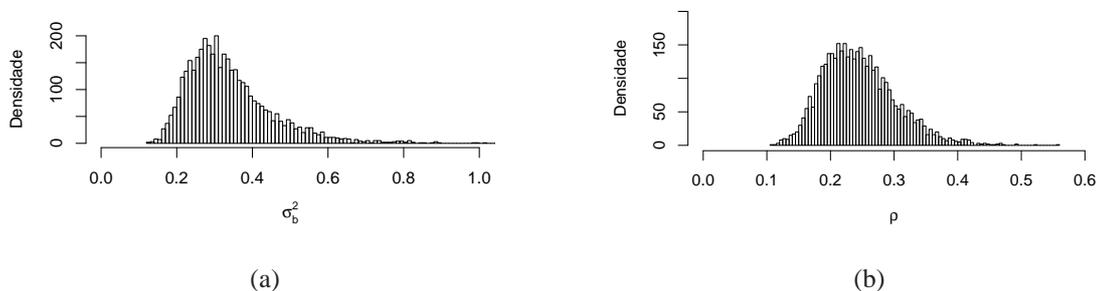
Fonte: Do autor (2017).

O modelo de regressão de primeiro grau apresentou menor $AICM$, sendo portanto o modelo que melhor se ajusta aos dados.

O algoritmo de Gibbs Sampler associado à técnica de dados aumentados retornou uma amostra final de tamanho 4000 para cada parâmetro do modelo, após ter sido feito um descarte (*burn-in*) de 1000 valores iniciais e um salto (*jump*) de 150 iterações. A verificação de convergência foi feita seguindo os critérios de Raftery e Lewis (1992).

As Figuras 3.1 (a) e (b) ilustram os gráficos das densidades a posteriori relacionadas à variância de provadores σ_b^2 e ao coeficiente de correlação intraclassa ρ . Valores de σ_b^2 estão concentrados em torno de 0,3 e valores de ρ estão concentrados em torno de 0,25, sendo esta mais uma evidência a favor do modelo que considera correlações entre os efeito de provadores, o que pode ser visto também na Tabela 3.2. O valor médio do coeficiente de correlação intraclassa está mais próximo do valor zero do que do valor um indicando uma maior variabilidade intraclassa, ou seja, entre as respostas de um provador.

Figura 3.1 – Densidade a posteriori da (a) variância de provadores σ_b^2 e (b) do coeficiente de correlação intraclasse ρ .



Fonte: Do autor (2017).

A Tabela 3.2 também apresenta os intervalos de credibilidade 95% (HPD) e o desvio padrão relacionados à estimativa média da variância de provadores e à estimativa média do coeficiente de correlação intraclasse.

Tabela 3.2 – Estimativas médias, intervalos de credibilidade 95% (HPD)(limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão associados à variância de provadores σ_b^2 e ao coeficiente de correlação intraclasse ρ .

	LI	MÉDIA	LS	DESVIO PADRÃO
σ_b^2	0,17	0,33	0,55	0,11
ρ	0,16	0,25	0,37	0,06

Fonte: Do autor (2017).

A Tabela 3.3 apresenta as estimativas médias dos coeficientes de regressão β , os intervalos de credibilidade 95% (HPD) e desvio padrão associados a cada adulerante.

Tabela 3.3 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) para os coeficientes da regressão.

ADULTERANTE	COEFICIENTE	LI	MÉDIA	LS	DESVIO PADRÃO
Casca	β_0	0,50	0,80	1,14	0,17
	β_1	0,92	1,23	1,54	0,16
Milho	β_0	0,56	0,88	1,20	0,17
	β_1	0,35	1,10	1,85	0,22
Palha	β_0	-0,04	0,26	0,54	0,15
	β_1	-0,22	0,51	1,18	0,20

Fonte: Do autor (2017).

A partir dessas estimativas médias encontramos equações de regressão para cada adulterante que determinam o valor estimado do preditor linear η associado a um certo nível x de adulteração:

$$\hat{\eta}_{casca} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x = 0,80 + 1,23x;$$

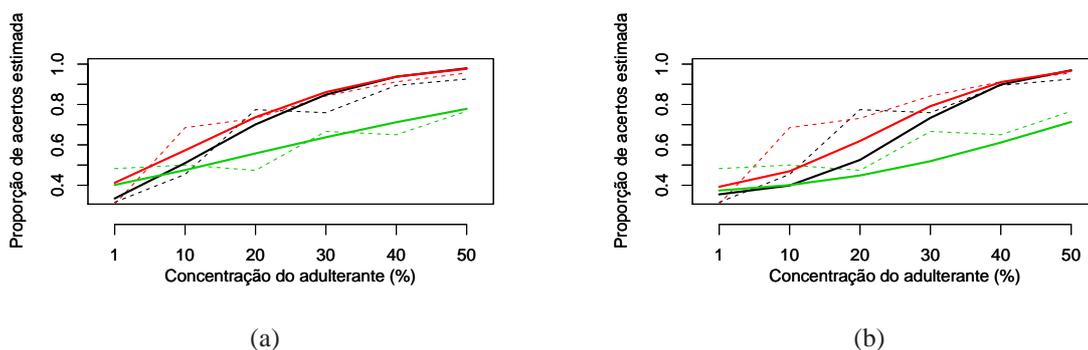
$$\hat{\eta}_{milho} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x = 0,88 + 1,10x;$$

$$\hat{\eta}_{palha} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x = 0,26 + 0,51x.$$

Essas equações que descrevem os preditores lineares são usadas para encontrar, para cada adulterante, a relação entre a probabilidade de acerto π e as porcentagens de adulteração x como apresentado na descrição da equação (2.1).

A Figura 3.2 (a) ilustra para cada adulterante as curvas médias estimadas para a proporção de acertos (curvas contínuas) e as curvas médias considerando os dados observados (curvas tracejadas) para o modelo que leva em conta a possível correlação existente entre os efeitos de provador. As cores preto, vermelho e verde estão associadas, respectivamente, aos adulterantes casca, milho e palha.

Figura 3.2 – Curvas médias estimadas para a proporção de acertos (linhas contínuas) e para os dados observados (linhas tracejadas) para cada adulterante considerando: (a) modelo que leva em conta correlações entre os efeitos de provador e (b) modelo que não leva em conta correlações entre os efeitos de provador. As curvas associadas aos adulterantes casca, milho e palha estão representadas em ambos os gráficos pelas cores preto, vermelho e verde, respectivamente.



Fonte: Do autor (2017).

Para os três adulterantes as curvas apresentaram um bom ajuste comparado aos dados observados, sendo que os gráficos referentes aos adulterantes casca e milho apresentaram comportamentos mais semelhantes em relação à adulteração, sendo mais facilmente detectados que a palha, apresentando limiar de detecção em torno de 20% e à medida que a porcentagem de adulteração se aproxima de 50%, a probabilidade de acerto em ambas se aproxima de 100%.

A curva associada ao adulterante palha apresentou um comportamento mais suave, sendo esse adulterante mais dificilmente detectável, com limiar de detecção em torno de 35%. Para porcentagens de adulteração mais altas, como 50%, temos em média 80% de probabilidade de acerto, sendo, portanto o adulterante que mais se confunde com o café.

Para efeito de comparação ilustramos na Figura 3.2 (b), para cada adulterante, as curvas médias estimadas para a proporção de acertos e as curvas médias observadas considerando um modelo que não leva em conta a correlação existente entre os efeitos de provadores. Barroso e Bueno Filho (2013) apresentam mais detalhes sobre esse modelo.

O modelo que leva em conta a correlação existente entre os efeitos de provador (FIGURA 3.2 (a)) apresentou melhor ajuste para todos os adulterantes em relação ao modelo fixo que não considera essa dependência (FIGURA 3.2 (b)), especialmente em porcentagens mais baixas de adulteração. Essa comparação dos modelos é importante visto que permite escolher o modelo que melhor explica o comportamento da variável resposta, conseqüentemente resulta em melhores estimativas para os parâmetros e limiares de detecção.

A tabela 3.8 apresenta os limiares de detecção associados a cada adulterante para o modelo hierárquico bayesiano e para o modelo fixo. Os resultados mostram que o modelo hierárquico bayesiano apresentou estimativas mais baixas para os limiares de detecção para todos os adulterantes considerados no experimento, ou seja, esse modelo teve um maior poder de detecção em relação ao modelo fixo. Isso significa que não considerar a possível correlação existente entre os efeitos de provadores pode superestimar as estimativas dos limiares de detecção, ou seja, com esse modelo pode-se concluir erroneamente que os adulterantes são detectados em certas porcentagens quando na verdade podem ser detectados em porcentagens menores.

Tabela 3.4 – Limiares de detecção associados a cada adulterante considerando o modelo hierárquico bayesiano proposto neste trabalho e o modelo fixo que não leva em conta correlações entre os efeitos de provadores.

ADULTERANTE	LIMIAR DE DETECÇÃO (%)	
	Modelo hierárquico bayesiano	Modelo fixo
Casca	18,15	26,90
Milho	15,39	22,66
Palha	33,70	45,40

Fonte: Do autor (2017).

Na Tabela 3.5 encontram-se descritas as estimativas médias em ordem crescente, os intervalos de credibilidade HPD e desvio padrão para os parâmetros associados aos provadores considerando o modelo proposto, que leva em conta a correlação entre os efeitos de provador.

Tabela 3.5 – Estimativas das médias em ordem crescente e intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão para os parâmetros referente aos provadores considerando o modelo com efeito aleatório de provador.

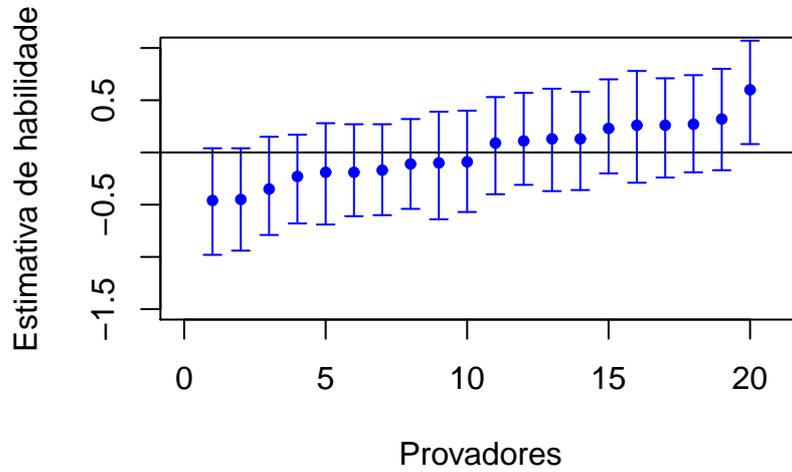
PARÂMETROS	LI	MÉDIA	LS	DESVIO PADRÃO
b_1	-0,98	-0,46	0,04	0,26
b_2	-0,94	-0,45	0,04	0,25
b_3	-0,79	-0,35	0,15	0,24
b_4	-0,68	-0,23	0,17	0,22
b_5	-0,61	-0,19	0,27	0,23
b_6	-0,69	-0,19	0,28	0,25
b_7	-0,60	-0,17	0,27	0,22
b_8	-0,54	-0,11	0,32	0,22
b_9	-0,64	-0,10	0,39	0,27
b_{10}	-0,57	-0,09	0,40	0,25
b_{11}	-0,40	0,09	0,53	0,24
b_{12}	-0,31	0,11	0,57	0,23
b_{13}	-0,37	0,13	0,61	0,25
b_{14}	-0,36	0,13	0,58	0,24
b_{15}	-0,20	0,23	0,70	0,23
b_{16}	-0,24	0,26	0,71	0,25
b_{17}	-0,29	0,26	0,78	0,27
b_{18}	-0,19	0,27	0,74	0,24
b_{19}	-0,17	0,32	0,80	0,25
b_{20}	0,08	0,60	1,07	0,25

Fonte: Do autor (2017).

Observando as médias estimadas apresentadas na Tabela 3.5 podemos notar que alguns provadores estiveram abaixo da média geral (zero), ou seja, apresentaram menor habilidade de detecção comparado à média geral dos provadores. Por outro lado, alguns provadores se destacaram apresentando estimativas acima da média geral, ou seja, possuem um maior poder de detecção em relação à média geral

A Figura 3.3 ilustra as estimativas médias em ordem crescente e respectivos intervalos de credibilidade associados aos provadores que permite detectarmos quais provadores estão abaixo da média geral dos demais, ou seja, no teste triangular quais apresentam uma habilidade mais baixa de detecção de adulterantes em relação à média geral, assim como quais provadores apresentam uma habilidade mais alta em relação à média.

Figura 3.3 – Estimativa média e intervalo de credibilidade 95% associado à habilidade dos pro-



Fonte: Do autor (2017).

Esse resultado pode ser usado na seleção de provedores para testes triangulares futuros, uma vez que é possível selecionar os provedores com maior habilidade em reconhecer, identificar estímulos específicos, o que permite obter precisão e consistência nos testes sensoriais.

4 CONCLUSÕES

Neste trabalho justificamos a importância de se considerar um modelo que leve em conta a existência de correlação entre os efeitos de provadores na análise de testes triangulares replicados, uma vez que apresentou ótimos resultados comparado ao modelo que não considera essa dependência.

A análise bayesiana foi uma importante ferramenta na construção dessa ideia, pois permitiu considerar um modelo hierárquico que englobe essa correlação. O método de simulação de Monte Carlo via cadeias de Markov apresentou problemas de convergência. No entanto, a amostragem Gibbs associada a técnica de dados aumentados foi usada para obtenção das estimativas dos parâmetros apresentando um bom desempenho computacional.

O modelo proposto apresentou maior poder de detecção, resultando em estimativas mais precisas para os limiares de detecção em experimentos de dose-resposta. Não considerar a correlação existente entre os efeitos de provadores pode superestimar essas estimativas, ou seja, pode-se concluir erroneamente que os adulterantes são detectados em certas porcentagens quando na verdade podem ser detectados em porcentagens menores.

O diagnóstico permitiu também analisar, simultaneamente, o desempenho do painel de provadores, selecionando quais destes apresentaram uma habilidade de detecção acima da média geral. Este resultado pode ser usado para selecionar provadores para um futuro teste sensorial.

Considerar as correlações existentes entre os efeitos de provadores ainda é desafiador para pesquisadores da área sensorial devido à dificuldade associada à escolha dos efeitos aleatórios, escolha do modelo adequado, implementação e interpretação dos resultados. Mas, justificada a importância, para trabalhos futuros pode-se pensar na implementação de pacotes e funções úteis que facilitem o uso dessa ideia, com o objetivo de melhorar a inferência deste tipo de experimento.

REFERÊNCIAS

ALBERT, J. H. CHIB, S. Bayesian analysis of binary and poychotomous response data **Journal of the American Statistical Association**. American Statistical Association, v.88, n.422, p. 669-679, 1993.

ALTSHULER, B. Modeling of Dose Response Relationships. **Environmental Health Perepectives**, v.42, p. 23-27, 1981.

BARROSO, C. M.; BUENO FILHO, J. S. S. Testes triangulares considerando a distribuição binomial: um exemplo com qualidade de café. **Revista Brasileira de Biometria**. São Paulo, v.31, n.2, p.189-205, 2013.

BI, J. Difficulties and a way out: a bayesian approach for sensory difference and preference tests. **Journal of Sensory Studies**. Richmond, v.18, n.1, p.1-18, 2003.

CASELLA, G.; GEORGE, E.I. Explaining the Gibbs Sampler. **The American Statistician**. Taylor e Francis, v.46, n.3, p.167-174, 1992.

COLEMAN, M., MARKS, H. Topics in dose-response modelling. **Journal of Food Protection**, v.61, n.11, p. 1425-1582, 1998.

FISHER, R. A. **Statistical methods for research workers**. Genesis Publishing Pvt Ltd, 1925.

KEMP, S.E.; HOLLOWOOD, T.; HORT, J. **Sensory Evaluation: a pratical handbook**. 1nd ed. London: J. Wiley, 2009. 196 p.

KUNERT, J.; MEYNERS, M. One the triangle test with replications. **Food Quality and Preference**. Elsevier Science, v.10, p.477-482, 1999.

LAWLESS, H. Commentary on random vs. fixed effects for panelists. **Food Quality and Preference**. v.9, n.3, p. 163-164, 1998.

LAWLESS, H. T.; HEYMANN, H **Sensory evaluation of food: principles and practices**. 2nd ed. New York: Springer, 2010. 595 p.

LUNDAHL, D. S. MCDANIEL, M. R. The panelist effect - fixed or random **Journal of Sensory Studies**. v.3, p. 113-121, 1988.

McCULLAGH, P.,NELDER, J.A. **Generalized linear models**. London: Chapman e Hall, 1989. 526p.

PELTIER, C.; BROCKHOFF, P. B.; VISALLI, M.; SCHLICH, P. The MAM-CAP table: A new tool for monitoring panel performances. **Food Quality and Preference**, v.32, p.24-27, 2014.

PENG, M.; JAEGER, S. R.; HAUTUS, M. J. Determining odour detection thresholds: Incorporating a method-independent definition into the implementation of ASTM E679. **Food Quality and Preference**, Barking, v.25, n.2, p. 95-104, 2012.

RAFTERY, A. E.; LEWIS, S. How Many Iterations in the Gibbs Sampler?. **Bayesian Statistics**, v.4, p. 763-773, 1992.

RAFTERY, A. E.; NEWTON, M. A.; SATAGOPAN, J. M.; KRIVITSKY, P. N. Estimating the Integrated Likelihood via Posterior Simulation Using the Harmonic Mean Identity. **Bayesian Statistics**, v.8, p. 1-45, 2007.

TANNER, M. WONG, W. The calculation of posterior distributions by data augmentation. **Journal of the American Statistical Association**, v.82, p.528-550, 1987.

TAVARES, K. M. **Detecção de adulteração em café riado torrado e moído por espectroscopia no infravermelho e análise sensorial**. 2012. 109 p. Dissertação (Mestrado em Ciência dos Alimentos) Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2012.

THURSTONE, L. L. A law of comparative judgment. **Psychology Review**. American Psychological Association, v.34, p. 273-286, 1927.

ARTIGO 2 Análise bayesiana de testes triangulares: II-Aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA)

RESUMO

Testes triangulares são frequentemente usados para analisar diferenças em produtos alimentícios, cada provador recebe três amostras codificadas, sendo duas iguais, devendo identificar a amostra diferente. O modelo para analisar esses experimentos deve ser capaz de captar a possível correlação existente entre os efeitos de provadores. A análise bayesiana através de modelos hierárquicos bayesianos é uma alternativa que trata parâmetros como variáveis aleatórias e não constantes desconhecidas. Métodos de simulação, como o método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM), são geralmente usados no processo de inferência. Essa abordagem baseada em amostragem é computacionalmente intensa, em muitos casos, podendo demorar dias para obtenção de convergência. A aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA) é um método de aproximação determinístico que surge como uma alternativa ao método MCCM, para modelos gaussianos latentes, apresentando ótimos resultados com uma vantagem, o tempo computacional reduzido. O objetivo principal do nosso estudo foi ilustrar o uso da aproximação INLA em testes triangulares replicados, sugerindo um modelo específico que não se encontra implementado no R. Os resultados permitem concluir que esse método apresenta bons resultados e pode ser utilizado na análise de testes triangulares replicados em análise sensorial.

Palavras-chave: INLA. Modelos gaussianos latentes. Testes de discriminação.

1 INTRODUÇÃO

Testes triangulares são exemplos de testes de discriminação em que são avaliadas duas amostras em cada ensaio e o objetivo é determinar se existe diferença significativa entre os dois produtos. O método consiste em montar um ensaio em que cada provador recebe três amostras codificadas, sendo duas iguais e uma diferente, devendo este provar as amostras e selecionar a amostra que considera diferente. O provador é forçado a fazer a escolha mesmo que nenhuma diferença seja percebida.

Em geral, considera-se que a proporção de respostas corretas no teste segue aproximadamente uma distribuição normal de probabilidade. No entanto, podemos modelar diretamente as respostas usando a aproximação exata binomial. O processo de estimação pode ser computacionalmente desafiador devido à necessidade de avaliar integrais intratáveis mas, métodos de simulação como Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM) têm sido propostos apresentando bons resultados. No entanto, o desenvolvimento do algoritmo com as características desejadas, como convergência, pode ser desafiador. Além disso, o esforço computacional pode ser excessivo em modelos complexos e em geral demandar métodos amostrais especificamente planejados para cada problema (PRESS, 2003).

Uma alternativa foi proposta por Rue, Martino e Chopin (2009), conhecida como aproximação de Laplace aninhada integrada, do inglês *Integrated nested Laplace approximation* (INLA), que permite a aproximação das distribuições marginais a posteriori dos parâmetros com menor tempo computacional. A proposta do método é executar a inferência bayesiana através de aproximações das densidades marginais a posteriori dos hiperparâmetros e variáveis latentes de interesse em modelos gaussianos latentes. Esses modelos são um caso específico dos modelos de regressão aditivos estruturados que permitem lidar com a presença de uma grande variedade de covariáveis e simultaneamente explorar possíveis correlações espaciais e temporais. Possuem os modelos lineares generalizados (MLG) como casos especiais, mas englobam uma classe mais ampla, por exemplo, dados espaço-temporais, permitindo a especificação de modelos mais complexos e realistas.

A maioria dos modelos gaussianos latentes satisfazem duas propriedades básicas que devemos assumir para aplicação da aproximação INLA nas análises. A primeira é que o campo latente admite propriedades de independência condicional e, portanto, o campo latente é um campo aleatório de Gauss Markov com uma matriz de precisão esparsa. Isso significa que podemos usar métodos numéricos para matrizes esparsas, que, em geral, são muito mais rápidos do

que cálculos para matrizes densas. A segunda propriedade é que o número de hiperparâmetros deve ser pequeno. Ambas propriedades são geralmente necessárias para obter uma inferência rápida (EIDSVIK et al., 2009).

Na literatura, a abordagem INLA têm sido aplicada a várias análises e seus resultados comparados aos obtidos pelo método convencional MCCM, mostrando que ambos apresentam um desempenho muito semelhante em termos de estimação paramétrica. Diferenças, no entanto, surgem em termos de tempo computacional.

Taylor e Diggle (2014) comparam a aproximação INLA e o método MCCM em um contexto espacial considerando modelos hierárquicos bayesianos. O estudo de simulação confirmou a vantagem do INLA em termos de tempo computacional, mas mostra que o INLA tem baixa precisão em muitos cenários.

Grilli, Metelli e Rampichini (2014) apresentam, através de um estudo de simulação, o algoritmo INLA para um modelo logit com intercepto aleatório, comparando os resultados com aqueles obtidos da amostragem MCCM. Como medidas de desempenho para comparação usam o viés relativo das estimativas pontuais dos parâmetros, intervalos de credibilidade e tempo computacional. O INLA apresentou estimativas semelhantes às obtidas pelo MCCM em menor tempo computacional.

Muff et al. (2015) consideram a análise bayesiana de modelos de erro de medida usando a aproximação INLA, discutindo como as abordagens mais comuns para ajustar erros de medida (erro de medida clássico e erro de medida de Berkson) se encaixam no contexto dos modelos gaussianos latentes.

Akerkar, Martino e Rue (2010) investigam o uso da aproximação INLA para resolver problemas na área de análise de sobrevivência, comparando os resultados com os resultados obtidos usando MCCM. As estimativas dos parâmetros foram muito parecidas em ambos os métodos confirmando a ideia de Rue, Martino e Chopin (2009).

Embora o INLA seja uma metodologia geral, seu uso na prática é limitado aos modelos implementados no pacote R-INLA do software **R**. Alguns modelos frequentemente usados na análise sensorial ainda não se encontram no referido pacote, sendo pouco utilizados. O objetivo principal do nosso estudo foi ilustrar o uso da aproximação INLA em testes triangulares replicados, sugerindo um modelo específico que não se encontra implementado no **R**. O algoritmo está disponibilizado no Apêndice A.

2 MATERIAL E MÉTODOS

2.1 Dados

Os dados apresentados neste trabalho são provenientes de um experimento com amostras de café para avaliar a adição de diferentes tipos de adulterantes. Os fatores estudados foram: tipos de adulterantes em três níveis (casca de café, milho e palha de café) e proporção de adulteração em seis níveis (1%, 10%, 20%, 30%, 40% e 50%). O delineamento experimental foi em blocos casualizados, sendo cada um dos vinte provadores considerado um bloco do experimento. O teste, conhecido como teste triangular, consiste em apresentar ao provador três amostras, sendo duas iguais e uma diferente. No teste cada provador teve três chances para cada combinação de fatores devendo identificar, em cada ensaio, a amostra que considera diferente das demais (TAVARES, 2012). Alguns provadores não compareceram aos três ensaios de cada tratamento, portanto, associamos cada provador ao número m de tentativas em que ele compareceu, ou seja, $m = 0, 1, 2$ ou 3 .

2.2 Modelo

Para analisar os dados do teste triangular, consideramos um modelo linear generalizado no qual as variáveis resposta são medidas em uma escala binária. Seja Y_{ij} a variável aleatória Bernoulli associada ao provador j no tratamento i , sendo $Y_{ij} = 1$ ou $Y_{ij} = 0$ no caso de acerto ou erro com probabilidade $P(Y_{ij} = 1) = \pi_{ij}$ e $P(Y_{ij} = 0) = 1 - \pi_{ij}$.

A probabilidade de acerto π_{ij} , no teste triangular, é construída de acordo com as ideias de Kunert e Meyners (1999) que apresentaram modelos para analisar testes de discriminação replicados tal que provadores que acreditam saber a resposta têm uma probabilidade de acerto que leva em conta a habilidade de cada provador. Dessa forma, no teste triangular, os autores definem a probabilidade π_{ij} de um provador j ter sucesso no tratamento i como

$$\pi_{ij} = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}p_{ij}, \quad (2.1)$$

sendo $\frac{1}{3}$ a probabilidade de acerto ao acaso, $\frac{2}{3}p_{ij}$ a probabilidade de acerto que leva em conta a habilidade do provador sendo p_{ij} a probabilidade média de um provador j ter sucesso no tratamento i . Visto que a distribuição acumulada normal é frequentemente usada nesse tipo de análise vamos considerar $p_{ij} = \Phi(\eta_{ij})$, sendo Φ representando a distribuição de probabilidade

acumulada da normal padrão.

A função de verossimilhança dos n ensaios referente a um experimento com $j = 1, 2, \dots, 20$ provadores para avaliar $i = 1, 2, \dots, 18$ tratamentos é dada por:

$$L(\tau, b, \theta | y) \propto \prod_{i=1}^I \prod_{j=1}^J \pi_{ij}^{y_{ij}} (1 - \pi_{ij})^{m_{ij} - y_{ij}}, \quad (2.2)$$

em que

y_{ij} : número de respostas corretas do provador j no tratamento i ;

m_{ij} : número de repetições do provador j no tratamento i ;

$\pi_{ij} = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}\Phi(\eta_{ij})$ em que Φ é a função distribuição acumulada da normal padrão;

$\eta = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{b} = \mathbf{W}\boldsymbol{\gamma}$ é o vetor de combinações lineares associadas aos provadores e tratamentos dada pela matriz de delineamento \mathbf{W} e pelo vetor de efeitos $\boldsymbol{\gamma}$;

X : matriz de delineamento associada aos coeficientes de regressão;

Z : matriz de delineamento associada aos provadores;

$\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\tau}, \mathbf{b})$, em que $\boldsymbol{\tau}$ é o vetor de efeitos fixos associado aos coeficientes de regressão e \mathbf{b} é o vetor de efeitos aleatórios associado aos provadores.

Para as componentes dos vetores $\boldsymbol{\beta}$ e \mathbf{b} assumimos, respectivamente, as prioris $N(0, 100)$ e $N(0, \sigma_b^2)$. Note que, o hiperparâmetro σ_b^2 modela a possível correlação existente entre os efeitos de provadores.

Por conveniência de notação assumimos o vetor $\boldsymbol{\gamma} = (\boldsymbol{\beta}, \mathbf{b})$ e então uma priori gaussiana para este vetor, $\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2 \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{Q}^{-1}(\sigma_b^2))$, sendo $\mathbf{0}$ um vetor de zeros e \mathbf{Q} a matriz de precisão dependente de σ_b^2 . Essa priori preserva a natureza gaussiana do campo latente, necessária para aplicação da aproximação INLA.

Para a variância de provadores σ_b^2 foi estabelecida uma priori qui-quadrado inversa escalada com $\nu_b = 5$ graus de liberdade e parâmetro de escala s_b^2 igual a 1.

A distribuição a posteriori é dada por

$$P(\boldsymbol{\gamma}, \sigma_b^2 | \mathbf{y}) \propto (\sigma_b^2)^{-(1+\frac{\nu_b}{2})} |\mathbf{Q}|^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\nu_b s_b^2}{2\sigma_b^2} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\gamma}'\mathbf{Q}\boldsymbol{\gamma} + \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \log [\pi_{ij}^{y_{ij}} (1 - \pi_{ij})^{m_{ij}-y_{ij}}]} \quad (2.3)$$

O INLA não estima a distribuição conjunta $P(\boldsymbol{\gamma}, \sigma_b^2 | \mathbf{y})$ mas a distribuição marginal das variáveis latentes e dos hiperparâmetros, isto é, $P(\gamma_i | \mathbf{y})$ e $P((\sigma_b^2)_j | \mathbf{y})$.

Vamos apresentar o método como definido em Rue, Martino e Chopin (2009), que consiste em construir aproximações aninhadas:

$$\tilde{P}(\gamma_i | \mathbf{y}) = \int \tilde{P}(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y}) \tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) d\sigma_b^2 \quad (2.4)$$

e

$$\tilde{P}((\sigma_b^2)_j | \mathbf{y}) = \int \tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) d(\sigma_b^2)_{-j}. \quad (2.5)$$

As aproximações para $P(\gamma_i | \mathbf{y})$ são calculadas aproximando $P(\gamma_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ e $P(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$ e usando integração numérica em σ_b^2 (soma finita). Para aproximar $P((\sigma_b^2)_j | \mathbf{y})$ usamos a aproximação de $P(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$.

Primeiramente encontramos a aproximação $\tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$ da distribuição marginal a posteriori de σ_b^2 :

$$\tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y}) \propto \frac{P(\sigma_b^2)P(\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2)P(\mathbf{y} | \boldsymbol{\gamma})}{\tilde{P}_G(\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2, \mathbf{y})} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\boldsymbol{\gamma}^*(\sigma_b^2)}, \quad (2.6)$$

sendo o numerador equivalente à distribuição a posteriori $P(\boldsymbol{\gamma}, \sigma_b^2 | \mathbf{y})$, $\tilde{P}_G(\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ a aproximação gaussiana da condicional completa de $\boldsymbol{\gamma}$ e $\boldsymbol{\gamma}^*(\sigma_b^2)$ a moda da condicional completa de $\boldsymbol{\gamma}$.

Escolhemos uma grade de valores para σ_b^2 a fim de obter a aproximação completa da distribuição a posteriori de σ_b^2 . Seleccionamos valores ao redor dos pontos de maior densidade da distribuição.

Para cada σ_b^2 podemos encontrar a moda $\boldsymbol{\gamma}^*(\sigma_b^2)$ usando algum método de otimização, como o método de Newton-Raphson. Para mais detalhes ver Bates e Watts (2007).

Seja $P(\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ a condicional completa de $\boldsymbol{\gamma}$ escrita como

$$P(\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2, \mathbf{y}) \propto e^{f(\boldsymbol{\gamma})} = e^{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \{y_{ij} \log \pi_{ij} + (m_{ij} - y_{ij}) \log(1 - \pi_{ij})\} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\gamma}' \mathbf{Q} \boldsymbol{\gamma}} ;$$

Para encontrar a aproximação gaussiana para a distribuição condicional completa $\tilde{P}_G(\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ é necessário o cálculo das derivadas primeira $f'(\boldsymbol{\gamma})$ e segunda $f''(\boldsymbol{\gamma})$ da função $f(\boldsymbol{\gamma})$ em relação ao campo latente $\boldsymbol{\gamma}$.

Considere $\boldsymbol{\pi} = \Phi(\boldsymbol{\eta}) = \int e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}^2} d\boldsymbol{\eta}$ e $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{b} = \mathbf{W}\boldsymbol{\gamma}$. Temos então,

$$f'(\boldsymbol{\gamma}) = \mathbf{W} \left(\frac{\mathbf{y}}{\boldsymbol{\pi}} - \frac{\mathbf{m} - \mathbf{y}}{1 - \boldsymbol{\pi}} \right) e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}^2} - \mathbf{Q}\boldsymbol{\gamma} \quad (2.7)$$

e

$$f''(\boldsymbol{\gamma}) = \mathbf{W} \left[\left(\frac{\mathbf{y}}{\boldsymbol{\pi}} - \frac{\mathbf{m} - \mathbf{y}}{1 - \boldsymbol{\pi}} \right) - \boldsymbol{\eta} e^{-\frac{1}{2}\boldsymbol{\eta}^2} - e^{-\boldsymbol{\eta}^2} \left(\frac{\mathbf{y}}{\boldsymbol{\pi}^2} + \frac{\mathbf{m} - \mathbf{y}}{(1 - \boldsymbol{\pi})^2} \right) \right] \mathbf{W} - \mathbf{Q}. \quad (2.8)$$

A aproximação gaussiana para a condicional completa de $\boldsymbol{\gamma}$ é dada por:

$$\boldsymbol{\gamma} | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y} \sim N \left(\frac{b(\boldsymbol{\gamma}^*)}{c(\boldsymbol{\gamma}^*)}, \frac{1}{c(\boldsymbol{\gamma}^*)} \right), \quad (2.9)$$

sendo $b(\boldsymbol{\gamma}^*) = f'(\boldsymbol{\gamma}^*) - f''(\boldsymbol{\gamma}^*) \boldsymbol{\gamma}^*$, $c(\boldsymbol{\gamma}^*) = -f''(\boldsymbol{\gamma}^*)$ e $\boldsymbol{\gamma}^*$ a moda da condicional completa.

Os autores sugerem três opções, a aproximação gaussiana, a aproximação de Laplace e a aproximação de Laplace simplificada para encontrar $\tilde{P}(\boldsymbol{\gamma}_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$. Devido à facilidade de implementação consideramos a aproximação gaussiana para $P(\boldsymbol{\gamma}_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ que possui média $\mu_i(\sigma_b^2)$ e a variância marginal $\sigma_i^2(\sigma_b^2)$ que são obtidas diretamente da aproximação gaussiana $\tilde{P}_G(\boldsymbol{\gamma} | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ usada na equação 2.6 no cálculo de $\tilde{P}(\sigma_b^2 | \mathbf{y})$, isto é,

$$\tilde{P}(\boldsymbol{\gamma}_i | \sigma_b^2, \mathbf{y}) = N(\boldsymbol{\gamma}_i; \mu_i(\sigma_b^2), \sigma_i^2(\sigma_b^2)),$$

sendo $\mu(\sigma_b^2)$ o vetor de médias da aproximação gaussiana e $\sigma^2(\sigma_b^2)$ o vetor correspondente de variâncias marginais.

Encontrada a aproximação para $P(\boldsymbol{\gamma}_i | \sigma_b^2, \mathbf{y})$ usamos a equação 2.4 para encontrar $\tilde{P}(\boldsymbol{\gamma}_i | \mathbf{y})$ e então podemos plotar gráficos das curvas associadas a cada parâmetro considerando uma grade de valores para cada $\boldsymbol{\gamma}_i$ além de encontrar as estimativas médias, desvio padrão e intervalos de credibilidade para cada parâmetro.

Em relação aos parâmetros associados aos coeficientes de regressão podemos encontrar as equações de regressão para cada adulterante que determinam o valor estimado do preditor linear η associado a um certo nível x de adulteração. Podemos então, encontrar para cada adulterante a porcentagem de adulteração a partir da qual o adulterante se torna perceptível, ou seja, o limiar de detecção associado a cada adulterante. No teste triangular devemos encontrar a porcentagem do adulterante associada à probabilidade $\pi = 2/3$, pois nesse ponto temos a maior inclinação da curva, ou seja, onde há maior variabilidade nas respostas (LAWLESS; HEYMANN, 2010).

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ajustamos modelos de regressão até o quinto grau com interação para verificar qual deles melhor explica o comportamento da variável resposta. Os modelos representam a relação entre o preditor linear η e as porcentagens de adulteração, x , para cada adulterante, $i = 1, 2, 3$.

A tabela 3.1 apresenta os valores de DIC para estes modelos. O modelo de regressão de primeiro grau apresentou menor DIC , igual a 789,12, sendo portanto o modelo que melhor se ajusta aos dados e que será usado no processo de inferência.

Tabela 3.1 Critério de informação deviance para modelos de regressão

MODELO PARA DOSE DE CONTAMINANTE (η_i)	DIC
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2 + \beta_{3i}x^3 + \beta_{4i}x^4 + \beta_{5i}x^5$	820,11
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2 + \beta_{3i}x^3 + \beta_{4i}x^4$	805,02
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2 + \beta_{3i}x^3$	799,01
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x + \beta_{2i}x^2$	797,11
$\beta_{0i} + \beta_{1i}x$	789,12

Fonte: Do autor (2017).

A Tabela 3.2 apresenta a estimativa média, os intervalos de credibilidade 95% (HPD) e o desvio padrão associado à variância de provadores σ_b^2 .

Tabela 3.2 – Estimativa média, intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão associado à variância de provadores σ_b^2 .

LI	MÉDIA A POSTERIORI	LS	DESVIO-PADRÃO
0,15	0,31	0,50	0,10

Fonte: Do autor (2017).

A Tabela 3.3 apresenta as médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) para os parâmetros associados aos coeficientes de regressão.

Tabela 3.3 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) para os coeficientes de regressão.

ADULTERANTE	COEFICIENTE	LI	MÉDIA	LS	DESVIO-PADRÃO
casca	β_0	0,40	0,78	1,05	0,41
	β_1	0,90	1,20	1,50	0,40
milho	β_0	0,55	0,87	1,20	0,40
	β_1	0,60	1,08	1,45	0,47
palha	β_0	-0,10	0,26	0,50	0,39
	β_1	0,15	0,50	0,90	0,44

Fonte: Do autor (2017).

A partir das estimativas médias apresentadas na Tabela 3.3 encontramos as equações de

regressão para cada adulterante que determinam o valor estimado do preditor linear η associado a um certo nível x de adulteração.

$$\hat{\eta}_{casca} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x = 0,78 + 1,20x;$$

$$\hat{\eta}_{milho} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x = 0,87 + 1,08x;$$

$$\hat{\eta}_{palha} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x = 0,26 + 0,50x;$$

A Tabela 3.8 apresenta os limiares de detecção associados a cada adulterante, ou seja, o nível que corresponde a $\pi = \frac{2}{3}$ de respostas corretas.

Tabela 3.4 – Limiares de detecção associados a cada adulterante.

ADULTERANTE	LIMIAR DE DETECÇÃO (%)
casca	18,2
milho	15,7
palha	33,8

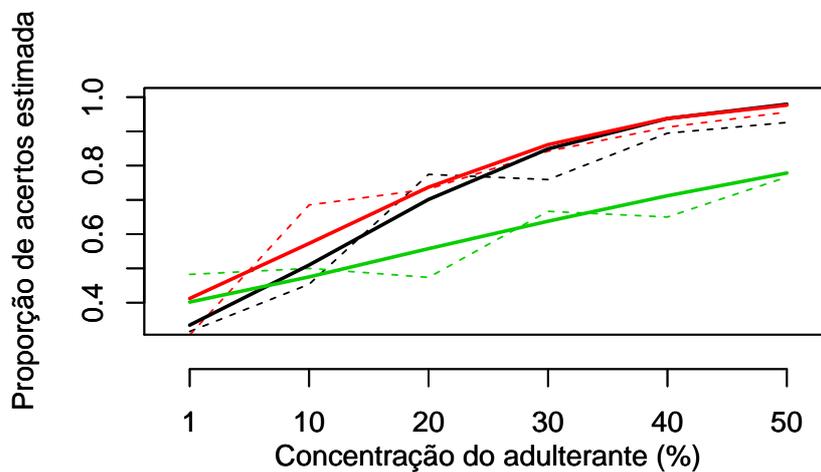
Fonte: Do autor (2017).

As equações que descrevem os preditores lineares são usadas para encontrar, para cada adulterante, a relação entre a probabilidade de acerto π e as porcentagens de adulteração x . A Figura 3.1 apresenta para cada adulterante as curvas médias estimadas para a proporção de acertos (curvas contínuas) e as curvas médias considerando os dados observados (curvas traçadas). As cores preto, vermelho e verde estão associadas, respectivamente, aos adulterantes casca, milho e palha.

Para os três adulterantes as curvas apresentaram um bom ajuste comparado aos dados observados, sendo que os gráficos referentes aos adulterantes casca e milho apresentaram comportamentos mais semelhantes em relação à adulteração, sendo mais facilmente detectados que a palha e à medida que a porcentagem de adulteração se aproxima de 50%, a probabilidade de acerto em ambas se aproxima de 100%.

A curva associada ao adulterante palha apresentou um comportamento mais suave, sendo esse adulterante mais dificilmente detectável, com limiar de detecção em torno de 33%. Para porcentagens de adulteração mais altas, como 50%, temos aproximadamente 70% de probabilidade de acerto, sendo, portanto o adulterante que mais se confunde com o café.

Figura 3.1 – Curvas médias estimadas para a proporção de acertos (linha cheia) e para os dados observados (linhas tracejadas) para cada adulterante considerando o modelo com efeito aleatório de provador. As curvas associadas aos adulterantes casca, milho e palha estão representadas pelas cores preto, vermelho e verde, respectivamente.



Fonte: Do autor (2017).

A Tabela 3.9 apresenta as estimativas médias, os intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão para os parâmetros associados aos provadores.

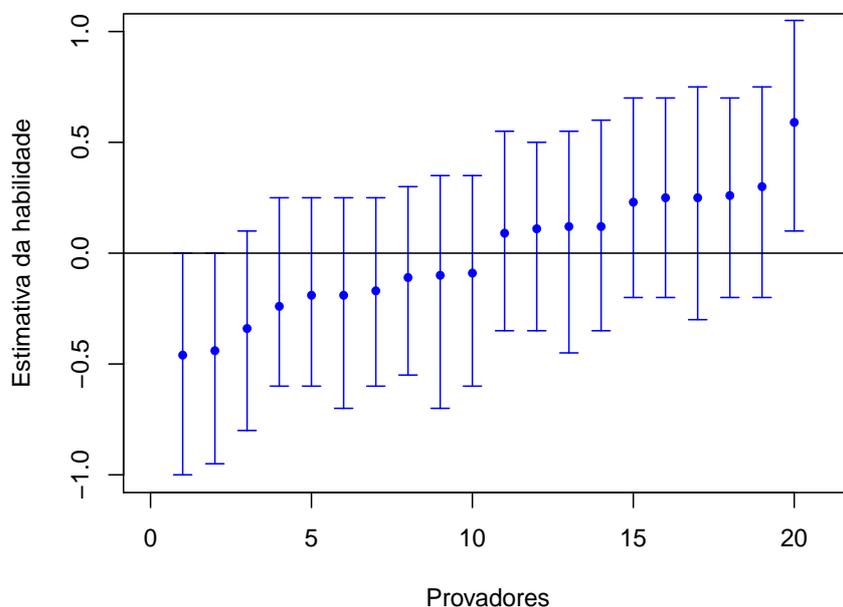
Tabela 3.5 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) para os parâmetros associados aos provadores.

COEFICIENTE	LI	MÉDIA	LS	DESVIO-PADRÃO
b_1	-1,00	-0,46	0,00	0,23
b_2	-0,95	-0,44	0,00	0,23
b_3	-0,80	-0,34	0,10	0,23
b_4	-0,60	-0,24	0,25	0,23
b_5	-0,60	-0,19	0,25	0,22
b_6	-0,70	-0,19	0,25	0,23
b_7	-0,60	-0,17	0,25	0,23
b_8	-0,55	-0,11	0,30	0,23
b_9	-0,70	-0,10	0,35	0,23
b_{10}	-0,60	-0,09	0,35	0,23
b_{11}	-0,35	0,09	0,55	0,23
b_{12}	-0,35	0,11	0,50	0,23
b_{13}	-0,45	0,12	0,55	0,23
b_{14}	-0,35	0,12	0,60	0,23
b_{15}	-0,20	0,23	0,70	0,23
b_{16}	-0,20	0,25	0,70	0,23
b_{17}	-0,30	0,25	0,75	0,23
b_{18}	-0,20	0,26	0,70	0,23
b_{19}	-0,20	0,30	0,75	0,24
b_{20}	0,10	0,59	1,05	0,23

Fonte: Do autor (2017).

A Figura 3.6 ilustra as estimativas médias em ordem crescente e respectivos intervalos de credibilidade 95% (HPD) associados aos provadores. Alguns provadores estão abaixo da média geral (zero), ou seja, no teste triangular esses provadores apresentam uma habilidade mais baixa de detecção de adulterantes em relação à média geral. Assim como alguns apresentam uma habilidade mais alta em relação à média geral.

Figura 3.2 – Estimativa média e intervalo de credibilidade associado aos provadores para os métodos MCCM e INLA.



Fonte: Do autor (2017).

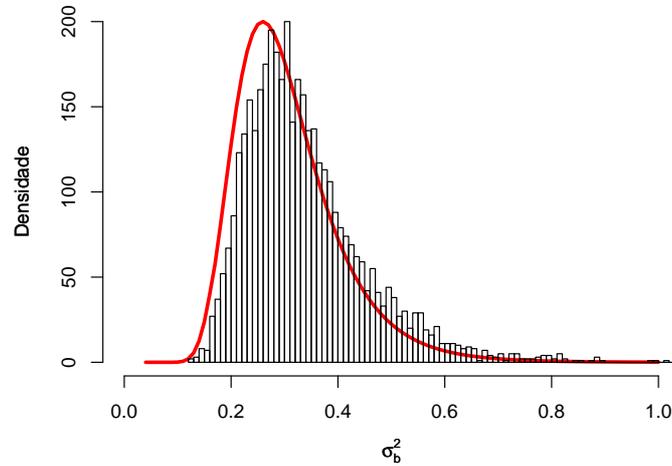
3.1 Comparação da aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA) e métodos de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM)

Para avaliar a precisão das estimativas obtidas com o INLA, comparamos os resultados com os alcançados usando métodos MCCM. Detalhes sobre a análise MCCM podem ser encontrados em Barroso e Bueno Filho (2017). Neste trabalho usamos apenas os resultados para efeito de comparação.

Os histogramas das amostras MCCM e as aproximações das marginais a posteriori pelo INLA são comparadas para todos os parâmetros do campo latente (β, \mathbf{b}) e para a variância de provadores σ_b^2 .

Para a variância de provadores σ_b^2 esta comparação é ilustrada na Figura 3.3, que mostra os histogramas MCMC e as aproximações INLA bem próximos. Pequenos desvios podem ter sido detectados devido ao uso da aproximação gaussiana. Melhores estimativas podemos ser obtidas usando aproximação de Laplace completa ou simplificada.

Figura 3.3 – Histograma gerado pelas estimativas de σ_b^2 através do método MCCM e curva gerada através da aproximação da densidade de σ_b^2 pelo método INLA



Fonte: Do autor (2017); Barroso e Bueno Filho(2017).

A Tabela 3.6 apresenta a estimativa média, os intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e o desvio padrão associado à variância de provadores considerando os métodos INLA e MCCM.

Tabela 3.6 – Estimativa média, intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão associado à variância de provadores σ_b^2 , considerando os métodos INLA e MCCM.

MÉTODO	LI	MÉDIA A POSTERIORI	LS	DESVIO-PADRÃO
INLA	0,15	0,31	0,50	0,10
MCCM	0,17	0,33	0,55	0,11

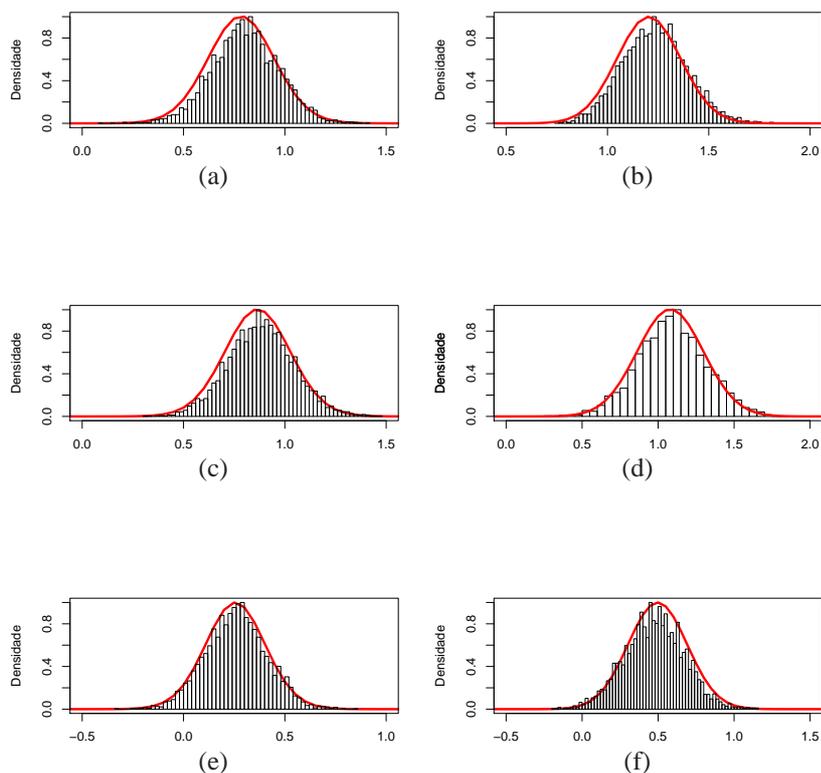
Fonte: Do autor (2017); Barroso e Bueno Filho(2017).

Os resultados da Tabela 3.6 comprovam a boa aproximação do INLA para a estimação dos hiperparâmetros, as estimativas médias obtidas para a variância de provadores foram próximas as resultantes do método MCCM, assim como o intervalo de credibilidade e desvio padrão.

Para o campo latente γ os histogramas MCMC e as aproximações INLA parecem praticamente idênticos para todos os componentes. A Figura 3.4 apresenta os gráficos das densidades marginais a posteriori relacionadas aos coeficientes de regressão, sendo os histogramas gerado pelas estimativas do método MCCM e as curvas geradas através da aproximação INLA. Os gráficos mostram um bom resultado para a estimação de todos os coeficiente de regressão do modelo, as distribuições marginais a posteriori estão similiares considerando os dois métodos

de aproximação.

Figura 3.4 – Histograma gerado pelas estimativas do método MCCM e curva gerada através da aproximação da densidade pelo método INLA: (a) β_0 (casca); (b) β_1 (casca); (c) β_0 (milho); (d) β_1 (milho); (e) β_0 (palha); (f) β_1 (palha)



Fonte: Do autor (2017).

A Tabela 3.7 apresenta as estimativas médias dos coeficientes de regressão, os intervalos de credibilidade 95% (HPD) (limite inferior-LI e limite superior-LS) e desvio padrão associados a cada adulterante considerando o método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM) e a aproximação INLA.

Tabela 3.7 – Estimativas das médias e os intervalos de credibilidade 95% (HPD) para os coeficientes da regressão

ADULTERANTE	coeficiente	MCCM				INLA			
		LI	média	LS	desvio-padrão	LI	média	LS	desvio-padrão
casca	β_0	0,50	0,80	1,14	0,40	0,40	0,78	1,05	0,41
	β_1	0,92	1,23	1,54	0,40	0,90	1,20	1,50	0,40
milho	β_0	0,56	0,88	1,20	0,40	0,55	0,87	1,20	0,40
	β_1	0,35	1,10	1,85	0,47	0,60	1,08	1,45	0,47
palha	β_0	-0,04	0,26	0,54	0,39	-0,10	0,26	0,50	0,39
	β_1	-0,22	0,51	1,18	0,45	0,15	0,50	0,90	0,44

Fonte: Do autor (2017).

Em ambos os métodos as estimativas médias foram semelhantes, assim como desvio padrão para todos os parâmetros. Os intervalos de credibilidade apresentaram estimativas diferentes para os limites inferior e superior, no entanto mesma amplitude em ambas análises. Usando os intervalos como testes de significância dos parâmetros, podemos perceber que para o adulterante palha temos divergências nas análises. Para o método MCCM, o parâmetro linear β_1 foi não-significativo e uma vez que β_0 para esse adulterante também foi não-significativo, temos um preditor linear nulo, o que resulta em uma probabilidade de acerto constante $\pi = \frac{2}{3}$ independente da porcentagem de adulterante. Assim, pode-se variar a porcentagem de palha na adulteração que a probabilidade de acerto não se altera.

Por outro lado, na análise considerando a aproximação INLA, o parâmetro linear β_1 para o adulterante palha foi significativo, o que representa uma associação linear entre o preditor linear η e as porcentagens de adulteração. Visto que β_0 foi não-significativo, temos uma relação linear crescente para a probabilidade de acerto em relação às porcentagens dos adulterantes.

Tabela 3.8 – Limiares de detecção associados a cada adulterante considerando as abordagens MCCM e INLA

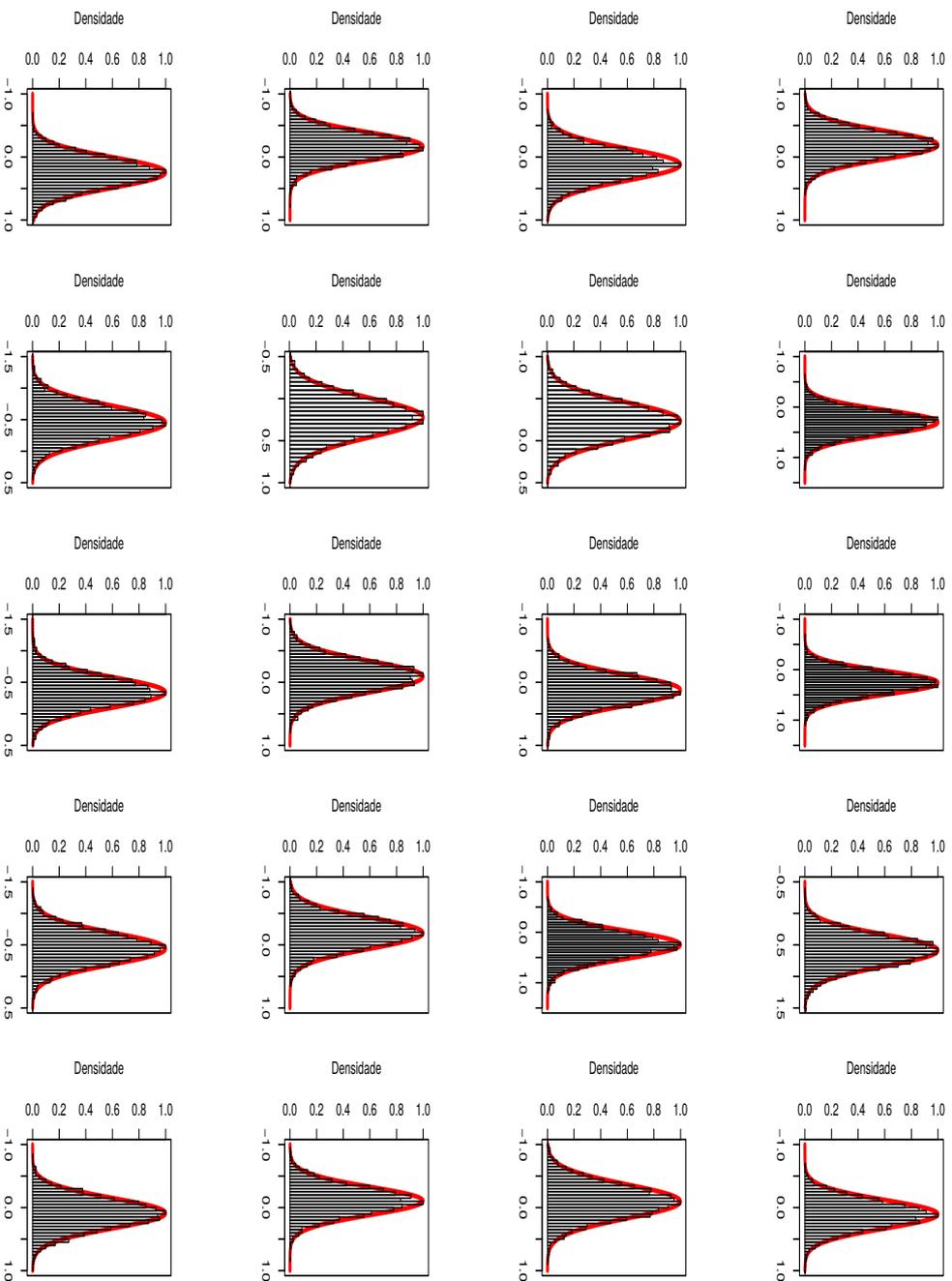
	limiar de detecção (%)	
	MCCM	INLA
casca	18,2	18,2
milho	15,4	15,7
palha	33,7	33,8

Fonte: Do autor (2017).

As análises considerando as abordagens MCCM e INLA apresentaram resultados semelhantes quanto a estimação dos limiares de detecção.

A Figura 3.5 ilustra os gráficos das densidades marginais a posteriori relacionadas aos provadores, sendo os histogramas gerados pelas estimativas do método MCCM e as curvas geradas através da aproximação INLA. Para todos os parâmetros associados aos provadores tivemos densidades praticamente iguais considerando MCCM e INLA.

Figura 3.5 – Histograma gerado pelas estimativas do método MCMC para os blocos e respectivas curvas de densidade geradas através da aproximação pelo método INLA.



Fonte: Do autor (2017).

A Tabela 3.9 apresenta as estimativas médias, os intervalos de credibilidade 95% (HPD) e desvio padrão (σ) para os parâmetros associados aos provedores considerando as análises MCCM e INLA.

Tabela 3.9 – Estimativas das médias, intervalos de credibilidade 95% (HPD) e desvio padrão (σ) para os parâmetros associados aos provedores considerando as abordagens MCCM e INLA

	MCCM				INLA			
	LI	MÉDIA	LS	σ	LI	MÉDIA	LS	σ
b_1	-0,98	-0,46	0,04	0,26	-1,00	-0,46	0,00	0,23
b_2	-0,94	-0,45	0,04	0,25	-0,95	-0,44	0,00	0,23
b_3	-0,79	-0,35	0,15	0,24	-0,80	-0,34	0,10	0,23
b_4	-0,68	-0,23	0,17	0,22	-0,60	-0,24	0,25	0,23
b_5	-0,61	-0,19	0,27	0,23	-0,60	-0,19	0,25	0,22
b_6	-0,69	-0,19	0,28	0,25	-0,70	-0,19	0,25	0,23
b_7	-0,60	-0,17	0,27	0,22	-0,60	-0,17	0,25	0,23
b_8	-0,54	-0,11	0,32	0,22	-0,55	-0,11	0,30	0,23
b_9	-0,64	-0,10	0,39	0,27	-0,70	-0,10	0,35	0,23
b_{10}	-0,57	-0,09	0,40	0,25	-0,60	-0,09	0,35	0,23
b_{11}	-0,40	0,09	0,53	0,24	-0,35	0,09	0,55	0,23
b_{12}	-0,31	0,11	0,57	0,23	-0,35	0,11	0,50	0,23
b_{13}	-0,37	0,13	0,61	0,25	-0,45	0,12	0,55	0,23
b_{14}	-0,36	0,13	0,58	0,24	-0,35	0,12	0,60	0,23
b_{15}	-0,20	0,23	0,70	0,23	-0,20	0,23	0,70	0,23
b_{16}	-0,24	0,26	0,71	0,25	-0,20	0,25	0,70	0,23
b_{17}	-0,29	0,26	0,78	0,27	-0,30	0,25	0,75	0,23
b_{18}	-0,19	0,27	0,74	0,24	-0,20	0,26	0,70	0,23
b_{19}	-0,17	0,32	0,80	0,25	-0,20	0,30	0,75	0,24
b_{20}	0,08	0,60	1,07	0,25	0,10	0,59	1,05	0,23

Fonte: Do autor (2017).

As estimativas associadas aos provedores foram praticamente idênticas para as médias, intervalos de credibilidade 95% e desvio padrão considerando os dois métodos, MCCM e INLA.

A Figura 3.6 ilustra as estimativas médias em ordem crescente e respectivos intervalos de credibilidade associados aos provedores para os dois métodos, MCCM e INLA. Os resultados foram praticamente iguais, alguns provedores estão abaixo da média geral dos demais, ou seja, no teste triangular esses provedores apresentam uma habilidade mais baixa de detecção de adulterantes em relação à média geral. Assim como alguns apresentam uma habilidade mais alta em relação à média. Além disso, as estimativas médias dos parâmetros associados aos provedores foram semelhantes.

Em termos de tempo computacional, verificou-se que o INLA foi pelo menos 10 ve-

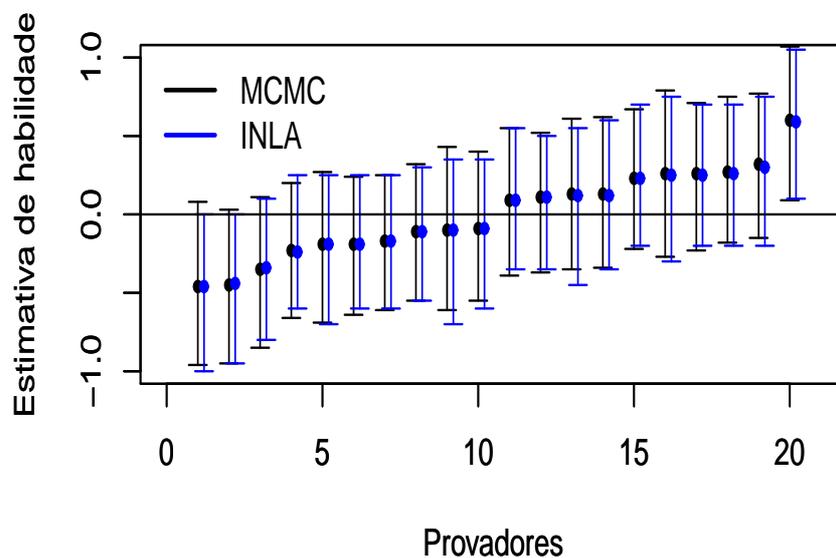


Figura 3.6 – Estimativa média e intervalo de credibilidade associado aos provedores para os métodos MCMC e INLA.

zes mais rápido que o MCMC. Tal velocidade deve escalar pela facilidade de paralelizar os programas, o que pode permitir o uso de inferência bayesiana em problemas em que até hoje não é considerada, como testes triangulares e modelos ordinais para escalas de preferência em alimentos, além de outras áreas de aplicação computacionalmente intensivas.

4 CONCLUSÕES

Neste trabalho apresentamos uma aplicação da aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA) em dados de teste triangular replicado, em um exemplo com adulteração de café. Em inferência bayesiana, em geral, podemos usar métodos de simulação, como o método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM), para obtenção das estimativas porém, esta técnica pode apresentar problemas de convergência ou um tempo de simulação elevado em modelos complicados. A aproximação INLA surge como alternativa, apresentando ótimos resultados em menor tempo computacional.

A modelo permitiu a estimação dos limiares de detecção para cada adulterante, detectando quais são mais e quais são menos detectáveis no café. Além disso, permitiu analisar, simultaneamente, o desempenho do painel de provadores, selecionando quais destes apresentaram uma habilidade de detecção acima da média geral. Este resultado pode ser usado para selecionar provadores para um futuro teste sensorial.

O estudo ilustrou o uso da aproximação INLA em testes triangulares replicados, sugerindo um modelo específico que não se encontra implementado no **R**.

REFERÊNCIAS

AKERKAR, R.; MARTINO, S.; RUE, H. Implementing Approximate Bayesian Inference for Survival Analysis using Integrated Nested Laplace Approximations. **Preprint Statistics**.n.3, 2010.

BARROSO, C. M.; BUENO FILHO, J. S. S. Análise bayesiana de testes triangulares: I-Amostragem Gibbs com dados aumentados (a ser publicado). 2017.

BATES, D. M.; WATTS, D. G. **Nonlinear Regression Analysis and its Applications**. New York: Wiley, 2007. 392p.

EIDSVIK, J.; MARTINO, S.; RUE, H. Approximate Bayesian inference in spatial generalized linear mixed models. **Scand. J. Statist.**, v.36, n.1, p.1-22, 2009.

GRILLI, L.; METELLI, S.; RAMPICHINI, C. Bayesian estimation with integrated nested Laplace approximation for binary logit mixed models. **Journal of Statistical computation and simulation**. Taylor e Francis, p.1-9, 2014.

KUNERT, J. MEYNER, M. One the triangle test with replications. **Food Quality and Preference**. Elsevier Science, v.10, p.477-482, 1999.

LAWLESS, H. T.; HEYMANN, H **Sensory evaluation of food: principles and practices**. 2nd ed. New York: Springer, 2010. 595 p.

MUFF, S.; RIEBLER, A.; HELD, L.; RUE, H.; SANER, P. Bayesian analysis of measurement error models using integrated nested Laplace approximations. **Journal of the Royal Statistical Society: Series C (Applied Statistics)**. v.64, n.2, p.231-252, 2015.

PRESS, S. J. **Subjective and Objective Bayesian Statistics**. New York: John Wiley e Sons, 2003. 559p.

RUE, H.; MARTINO, S.; CHOPIN, N. Approximate Bayesian inference for latent Gaussian models by using integrated nested Laplace approximations. **Journal of the Royal Statistical Society: Series B - Statistical Methodology**. v.71, n.2, p. 319-392, 2009.

TAVARES, K. M. **Detecção de adulteração em café riado torrado e moído por espectroscopia no infravermelho e análise sensorial**. 2012. 109 p. Dissertação (Mestrado em Ciência dos Alimentos) Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2012.

TAYLOR, B. M.; DIGGLE, P. J. INLA or MCMC? A tutorial and comparative evaluation for spatial prediction in log-Gaussian Cox process. **Journal of Statistical Computation and Simulation**. Taylor e Francis, v.84, n.10, p. 2266-2284, 2014.

APÊNDICE A

```
##### LEITURA #####
```

```
##### Pacotes #####
```

```
library(MASS)  
library(mvtnorm)  
library(coda)
```

```
##### Leitura dos dados #####
```

```
dados <- read.table("dados_cafe.csv",header=TRUE)  
attach(dados)
```

```
ya <- Acertos  
ye <- Erros  
n <- length(ya)  
m <- ya+ye  
y <- ya  
p <- ncol(X)  
q <- ncol(Z)
```

```
##### Grade de valores para theta #####
```

```
var <- seq(0.04,1,0.01)  
dominio <- log(var)  
precisao <- 1/var
```

```
##### Priori de theta #####
```

```
nub <- 5
```

```
s2b <- 1
```

```
Adulterante <- factor(Adulterante)
```

```
Prov <- factor(Provador)
```

```
Percm <- (Perc-25.5)/24.5
```

```
##### Matrizes de delimitamento #####
```

```
X <- model.matrix(~ -1+Adulterante*(I(Percm)))
```

```
Z <- model.matrix(~ -1+Prov)
```

```
##### FUNCOES #####
```

```
##### Newton Raphson #####
```

```
# Para cada vetor de theta temos uma moda x
```

```
NR.Camila <- function(x,theta){
  tau <- x[1:p]
  b <- x[(p+1):(p+q)]
  x.old <- x
  crit <- 1
  cont <- 0
  etac <- X%*%tau + Z%*%b
  H <- matrix(0,(p+q),(p+q))
  delta <- 0*x
  while(crit > 0.0001){
    x.old <- x
```

```

tau      <- x[1:p]
b        <- x[(p+1):(p+q)]
etac    <- X%%tau + Z%%b

pil      <- pnorm(etac)
pi2      <- 1-pil

aux1     <- (y/pil)-((m-y)/pi2)
aux2     <- exp(-0.5*etac^2)
fl       <- aux1*aux2

# Gradiente
gradtau  <- t(X)%*%fl - tau/10000
gradb    <- t(Z)%*%fl - b/theta
grad     <- c(gradtau,gradb)

# Hessiana

aux3     <- (y*exp(-etac^2))/(pi1^2)
aux4     <- (m-y)*(exp(-etac^2))/(pi2^2)
fl1      <- as.vector(aux1-aux3-aux4)
H        <- t(cbind(X,Z))%*%diag(fl1)%*%cbind(X,Z)
diag(H)[(p+1):(p+q)] <- diag(H)[(p+1):(p+q)] -
                                as.double(1/theta)
diag(H)[1:p] <- diag(H)[1:p] - 1/10000

Hi       <- solve(H) #solve
delta    <- as.double(Hi%%grad)
x        <- x - delta

crit     <- as.double(t(delta)%*%(delta))
cont     <- cont + 1

```

```

    }
    return(list(x=x,tau=tau,b=b,grad=grad,Hi=Hi,
               H=H,cont=cont))
  }

```

```
##### Vetor de modas para um theta especifico #####
```

```

moda <- function(theta){
  x <- solve(t(cbind(X,Z))%*%cbind(X,Z)+diag(p+q)/theta)
           %*%t(cbind(X,Z))%*%log((y+1)/(m+2))

  tau      <- x[1:p]
  b        <- x[(p+1):(p+q)]
  saida    <- NR.Camila(x,theta)
  x0       <- saida$x
  return(x0)
}

```

```
##### Aproximação gaussiana para a probabilidade
```

```
##### condicional completa de x #####
```

```

ap.gau.x <- function(vetorx, theta){
  x <- solve(t(cbind(X,Z))%*%cbind(X,Z)+diag(p+q)/theta)
           %*%t(cbind(X,Z))%*%log(y+1/(m+2))

  tau      <- x[1:p]
  b        <- x[(p+1):(p+q)]
  saida    <- NR.Camila(x,theta)
  Sigma    <- -as.matrix(saida$Hi)
  x0       <- as.double(saida$x)
  media    <- as.double(Sigma %*% saida$grad + x0)
}

```

```

lpix.thetay <- dmvnorm(vetorex,media,Sigma,log=TRUE)
return(lpix.thetay=lpix.thetay)
}

##### Verossimilhanca #####

vero <- function(vetorex){
  tau      <- vetorex[1:p]
  b        <- vetorex[(p+1):(p+q)]
  eta      <- X%*%tau + Z %*%b
  prob     <- pnorm(eta)
  vero     <- exp(sum(ya*log(prob)+ye*log(1-prob)))
  return(vero=vero)
}

##### Priori de theta #####

priori.theta <- function(theta){
  priori.theta <- theta^(-(2+nub)/2)*exp((-nub*s2b)/(2*theta))
  return(priori.theta=priori.theta)
}

##### Priori de x dado um valor de theta #####

priori.x <- function(theta,vetorex){
  tau      <- vetorex[1:p]
  b        <- vetorex[(p+1):(p+q)]
  pri.x    <- (theta^-(q/2))*exp(-sum((tau^2)/(20000)))*
              exp(-sum((b^2))/(2*theta))
}

```

```

    return(pri.x=pri.x)
}

##### Posteriori #####
Ptheta <- function(dominio){
  ap.g.x      <- 0*dominio
  vero2       <- 0*dominio
  p.theta     <- 0*dominio
  p.x         <- 0*dominio
  post.theta  <- 0*dominio
  for (i in 1:length(dominio)){
    ap.g.x[i]   <- ap.gau.x(matrizx0[,i], var[i])
    vero2[i]    <- vero(matrizx0[,i])
    p.theta[i]  <- priori.theta(var[i])
    p.x[i]      <- priori.x(var[i],matrizx0[,i])
    post.theta[i] <- (vero2[i]*p.theta[i]*p.x[i])/exp(ap.g.x[i])
  }
  return(post.theta=post.theta)
}

```

```
##### Distribuicoes de xi #####
```

```
## Calcula medias e variancias (ap. gaussiana)
```

```
## para cada gamma dado um theta especifico
```

```
med.var <- matrix(0,p+q,2)
```

```
Med.var <- function(theta){
```

```
  x <- solve(t(cbind(X,Z))%*%cbind(X,Z)+diag(p+q)/theta)
```

```
          %*%t(cbind(X,Z))%*%log(y+1/(m+2))
```

```
  tau      <- x[1:p]
```

```

b          <- x[(p+1):(p+q)]
saida     <- NR.Camila(x,theta)
Sigma     <- -as.matrix(saida$Hi)
x0        <- as.double(saida$x)
media     <- as.double(Sigma %*% saida$grad + x0)

for (i in 1:nrow(x)){
  aux1      <- cbind(media[i],Sigma[i,i])
  med.var[i,] <- aux1
}
return(med.var=med.var)
}

```

```

##### Considerando um valor especifico de gamma
##### calculamos a probabilidade condicional de xi
##### para uma grade de theta

```

```

d <- numeric(length(dominio))

prob.cond.tau5 <- function(tau){
  for (j in 1:length(dominio)){
    media <- M[j,1]
    vari <- M[j,2]
    d[j] <- dnorm(tau,media,sqrt(vari))
  }
  return(d)
}

```

```

#### Programa ####

```

```
rm(list=ls(all=T))

source("leitura_probit.R")
source("funcoes_probit.R")

##### Matriz de modas #####

# theta = variancia de provador
# var    = grade de valores para theta
# Para cada theta temos um vetor de modas

s = p+q    # número de parâmetros
modax <- matrix(c(0),s,length(dominio))

for (i in 1:length(dominio)){
  theta    <- var[i]
  modax[,i] <- moda(theta)
}
matrizx0 <- modax

##### Posteriori de theta #####

# Para cada theta temos um vetor de modas e para
# cada vetor de modas temos um valor para a densidade
# marginal de theta

resultado <- Ptheta(dominio)
length(resultado)
```

```
##### Grafico grade de theta versus Densidade #####

plot(var,resultado,xlab="theta", ylab="Densidade",
      type="p",xlim=c(0,1),pch=16,
      main="Densidade a posteriori de theta")

#### Calculo da média e desvio padrão das estimativas a
#### posteriori de theta #####

mediatau5 <- sum(resultado*var)/sum(resultado)
vartau5   <- sum(resultado*(var-mediatau5)^2)/(sum(resultado))
sdtau5    <- sqrt(vartau5)

##### Intervalo de credibilidade HPD para theta #####

peso      <- resultado/sum(resultado)
amostra   <- sample(var, 10000, replace = TRUE, prob = peso)
am        <- mcmc(amostra)
HPDinterval(am)

##### Funcao que calcula distribuicoes marginais para o
##### tratamento k #####

## Gerando uma grade de valores para os parametros associados
## aos coeficientes de regressão e aos provadores

LI        <- -1.5 # valor mínimo da grade de parametros
LS        <- 1.5  # valor máximo da grade de parâmetros
int       <- 0.01
tau.seq   <- seq(LI,LS,int)

##### Calculo da Densidade marginal a posteriori #####
```

```
## M = Matriz com as medias e variancias (aprox. gaussiana)
## para uma grade de valores de theta
```

```
## N = Matriz com as probabilidades a posteriori
## (aprox. gaussiana) para cada valor da grade de
## gamma considerando cada valor da grade de theta
```

```
## Selecciono cada coluna da matriz N (que se refere a
## um gamma especifico) e multiplico pela posteriori
## de theta (soma numerica) para encontrar a posteriori
## de gamma
```

```
Post.Marg <- function(tr){
  M <- matrix(0,length(dominio),2)
  N <- matrix(0,length(dominio),length(tau.seq))

  for (i in 1:length(dominio)){
    theta <- var[i]
    aux1 <- Med.var(theta)
    M[i,] <- aux1[tr,] # 5 referente ao tau5
    N[i,] <- dnorm(tau.seq,M[i,1],sqrt(M[i,2]))
  }

  soma <- t(N)%*%resultado
  return(soma=soma)
}
```

```
M.post.marg <- matrix(0,s,5)
Soma <- matrix(0,301,s)
par(mfrow=c(3,2))
```

```
for(k in 1:s){
  soma                <- Post.Marg(k)
  Soma[,k]           <- soma
  M.post.marg[k,1]   <- sum(soma*tau.seq)/sum(soma)
  M.post.marg[k,2]   <- sum(soma*(tau.seq-
                        M.post.marg[k,1])^2)/(sum(soma))
  M.post.marg[k,3]   <- sqrt(M.post.marg[k,2])
  peso               <- soma/sum(soma)
  amostra            <- sample(tau.seq, 100,
                              replace = TRUE, prob = peso)
  am                 <- mcmc(amostra)
  M.post.marg[k,4:5] <- HPDinterval(am)[1:2]
  plot(tau.seq,soma,main="",type="l",
        ylab="Densidade", xlab="", xlim=c(-1.5,1.5),
        col="red",lwd=3)
}
```

ANEXO A

Aproximação gaussiana

Seja $P(\gamma)$ uma função densidade de probabilidade e considere reescrevê-la da seguinte maneira

$$P(\gamma) = \exp\{f(\gamma)\}$$

A aproximação gaussiana considera uma expansão de Taylor até segunda ordem de $f(\gamma)$ em torno de γ_0

$$f(\gamma) \approx f(\gamma_0) + f'(\gamma_0)(\gamma - \gamma_0) + \frac{f''(\gamma_0)(\gamma - \gamma_0)^2}{2}$$

$$f(\gamma) \approx f(\gamma_0) + f'(\gamma_0)\gamma - f'(\gamma_0)\gamma_0 + \frac{f''(\gamma_0)}{2}(\gamma^2 - 2\gamma\gamma_0 + \gamma_0^2)$$

$$f(\gamma) \approx f(\gamma_0) + f'(\gamma_0)\gamma - f'(\gamma_0)\gamma_0 + \frac{f''(\gamma_0)\gamma^2}{2} - f''(\gamma_0)\gamma\gamma_0 + \frac{f''(\gamma_0)\gamma_0^2}{2}$$

Eliminando as constantes $f(\gamma_0)$, $f'(\gamma_0)\gamma_0$ e $\frac{f''(\gamma_0)\gamma_0^2}{2}$ obtemos

$$f(\gamma) \approx f'(\gamma_0)\gamma - f''(\gamma_0)\gamma_0\gamma + \frac{f''(\gamma_0)\gamma^2}{2}$$

$$f(\gamma) \approx \left(f'(\gamma_0) - f''(\gamma_0)\gamma_0\right)\gamma - \frac{(-f''(\gamma_0))\gamma^2}{2}$$

Seja

$$b(\gamma_0) = f'(\gamma_0) - f''(\gamma_0)\gamma_0$$

$$c(\gamma_0) = -f''(\gamma_0)$$

Então

$$f(\gamma) \approx -\frac{1}{2}c(\gamma_0)\gamma^2 + b(\gamma_0)\gamma$$

Retornamos à notação exponencial e a aproximação gaussiana para a densidade de x é dada por

$$\tilde{P}_G(\gamma) \propto e^{\left\{-\frac{1}{2}c(\gamma_0)\gamma^2 + b(\gamma_0)\gamma\right\}}$$

$$\tilde{P}_G(\gamma) \propto e^{\left\{-\frac{1}{2}c(\gamma_0)\gamma^2 + b(\gamma_0)\gamma - \frac{[b(\gamma_0)]^2}{2c(\gamma_0)} + \frac{[b(\gamma_0)]^2}{2c(\gamma_0)}\right\}}$$

$$\tilde{P}_G(\gamma) \propto e^{\left\{-\frac{1}{2}c(\gamma_0)\gamma^2 + b(\gamma_0)\gamma - \frac{[b(\gamma_0)]^2}{2c(\gamma_0)}\right\}}$$

$$\tilde{P}_G(\gamma) \propto e^{-\frac{1}{2}c(\gamma_0)\left(\gamma^2 - \frac{b(\gamma_0)\gamma}{\frac{c(\gamma_0)}{2}} + \frac{[b(\gamma_0)]^2}{[c(\gamma_0)]^2}\right)}$$

$$\tilde{P}_G(\gamma) \propto e^{-\frac{1}{2}c(\gamma_0)\left[\gamma - \frac{b(\gamma_0)}{c(\gamma_0)}\right]^2}$$

Essa expressão é o núcleo de uma distribuição normal com média $\frac{b(\gamma_0)}{c(\gamma_0)}$ e variância $c(\gamma_0)^{-1}$. Melhores aproximações são obtidas quando γ_0 é a moda da distribuição $P(\gamma)$.

5 CONCLUSÃO GERAL

Neste trabalho apresentamos uma análise de testes discriminativos comumente usados na ciência dos alimentos considerando um modelo hierárquico bayesiano, que leva em conta correlações existentes entre os efeitos de provadores. O experimento foi analisado considerando a abordagem bayesiana em duas técnicas distintas: método de Monte Carlo via cadeias de Markov (MCCM) com dados aumentados e Aproximação de Laplace aninhada integrada (INLA). Em inferência bayesiana, em geral, usamos os métodos de simulação, como MCCM, para obtenção das estimativas dos parâmetros porém, esta técnica pode apresentar problemas de convergência ou um tempo de simulação elevado em modelos complicados. A aproximação INLA surge como alternativa, apresentando ótimos resultados em menor tempo computacional.