



ALLANA LÍVIA BESERRA PAULINO

**MODELO MISTO VIA MÍNIMOS QUADRADOS PARA
DELINEAMENTOS DE BLENDS DE CAFÉS**

LAVRAS – MG

2018

ALLANA LÍVIA BESERRA PAULINO

**MODELO MISTO VIA MÍNIMOS QUADRADOS PARA DELINEAMENTOS DE
BLENDS DE CAFÉS**

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

Prof. Dr. Marcelo Ângelo Cirillo

Orientador

LAVRAS – MG

2018

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

Paulino, Allana Lívía Beserra.

Modelo misto via mínimos quadrados para delineamentos de blends de cafés / Allana Lívía Beserra Paulino. - 2018.

56 p.

Orientador(a): Marcelo Ângelo Cirillo.

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Lavras, 2018.

Bibliografia.

1. Modelos mistos. 2. Mínimos quadrados. 3. Blends de café. 4. Delineamentos de misturas. 5. Variáveis de processo. I. Cirillo, Marcelo Ângelo. . II. Título.

ALLANA LÍVIA BESERRA PAULINO

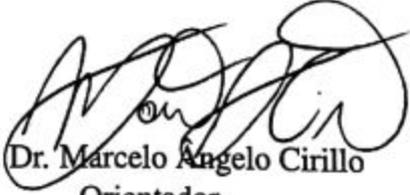
**MODELO MISTO VIA MÍNIMOS QUADRADOS PARA DELINEAMENTOS DE
BLENDS DE CAFÉS**

**MIXED MODEL VIA MINIMAL SQUARES FOR BLENDS OF COFFEE
DESIGN**

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

APROVADA em 16 de Fevereiro de 2018.

Prof^a. Dr^a. Carla Regina Guimarães Brighenti UFSJ-MG
Prof. Dr. Deive Ciro de Oliveira UNIFAL-MG


Prof. Dr. Marcelo Angelo Cirillo
Orientador

**LAVRAS – MG
2018**

*Aos meus pais, Lúcia de Fátima e Antônio Paulino.
Aos meus irmãos Lúcio, Alisson, Allen, Allan e à minha sobrinha Manuela.
À minha tia Maria de Fátima e à minha avó Maria.
À minha prima querida e amada Elza (in memoriam).*
DEDICO

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, meu criador e Senhor, pela graça da saúde e bênçãos concedidas em toda a minha vida.

Ao meu orientador, professor Dr. Marcelo Cirillo, pela paciência, dedicação e orientação durante o desenvolvimento deste trabalho.

A todos os professores da Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária da UFLA que me ajudaram, de alguma forma, no desenvolvimento deste trabalho.

A Universidade Federal de Lavras e ao Departamento de Estatística (DES) e seus funcionários.

À CAPES pela concessão da bolsa de mestrado para realização deste trabalho.

À minha família, meus pais Lúcia de Fátima, Antônio Paulino, aos meus irmãos, Lúcio, Alisson, Allen e Allan, à minha sobrinha Manuela, minha tia Maria de Fátima e minha prima Elza *in memoriam*, por acreditarem em mim, por seu amor, carinho e apoio.

Aos meus colegas de sala Édipo, Elianara, Isolina (Lina), Marcela, Matheus, Mohamed e Pablo. Obrigada pelos momentos de descontração e alegrias que vocês me proporcionaram durante o curso.

A todos os amigos e colegas que conquistei na UFLA, em especial, ao Carlos, Carlos (Carlão), Carol, Charles, Cristian, Cristina (Cris), Elias, Henrique, Ismael, Isolina (Lina), Jaqueline (Jack), Kelly, Laerte, Leila, Marcela, Nádia, Pablo, Sidcleide (Sid), e Victor pela convivência, conversas, brincadeiras e pela ajuda sempre que precisei.

A todos meus sinceros e eternos agradecimentos.

RESUMO

O presente estudo tem por objetivo propor um modelo misto em uma análise sensorial de quatro experimentos de blends de cafés especiais da espécie *Coffea Arabica*, representado por genótipos Bourbon Amarelo e Acaiá e não especiais definidos pelos cafés Canephora e Comercial. Cada experimento foi diferenciado em função do tipo de processamento: via seca e úmida e concentrações na bebida definida por 0,07 e 0,10 (m/v), em que essas quantidades representaram gramas de pó de café para cada 100 ml de água. Em todos os experimentos, as variáveis respostas foram caracterizadas pelos atributos sensoriais: Sabor, Amargor e Nota. Para implementação do modelo, considerou-se a abordagem dada pelo método de mínimos quadrados, por ser de fácil compreensão e implementação ao pesquisador. Os scripts foram desenvolvidos no software R e disponibilizados no pacote Blendstat. Concluiu-se que a agregação dos efeitos aleatórios dos experimentos contribuiu para a discriminação dos experimentos, nos quais os blends formados por cafés especiais da mesma procedência (altitude), genótipo e concentração foram similares ao atributo sabor, em ambas as formas de processamento, via seca e úmida.

Palavras-chave: Modelo misto. Mínimos quadrados. Blends de café. Delineamentos de misturas. Variável de processo.

ABSTRACT

The present study aims to propose a mixed model in a sensory analysis of four blends of special coffee *Coffea Arabica* experiments, represented by Yellow Bourbon and Acaiá genotypes and non-special ones defined by Canephora and Comercial coffees. Each experiment was differentiated according to the processing type: dry and wet, and beverage concentrations defined as 0.07 and 0.10 (m / v), in which these amounts represented grams of coffee powder per 100 ml of water. In all experiments, the response variables were characterized by the sensory attributes: Taste, Bitterness and Note. For the implementation of the model, we considered the approach given by the least squares method, because it is easy to understand and implement to the researcher. The scripts were developed in the R software and made available in the Blendstat package. It was concluded that the aggregation of the experiments random effects contributed to the discrimination of the experiments, in which the blends of special coffees with the same origin (altitude), genotype and concentration were similar for the flavor attribute in both forms of dry and humid via processing.

Keywords: Mixed model. Least squares. Coffee blends. Mix designs. Process variable.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 2.1 – Região experimental do planejamento látice-simplex para uma mistura de três componentes. | 15 |
| Figura 2.2 – Ilustração dos pontos experimentais com adição dos pontos axiais. | 16 |
| Figura 2.3 – Espaço experimental do planejamento centroide simplex para uma mistura de quatro componentes. | 19 |
| Figura 5.1 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via úmida para o componente CC (Conilon) | 39 |
| Figura 5.2 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via úmida para o componente CT (Café torrado) | 39 |
| Figura 5.3 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via úmida para o componente CC (Conilon) | 40 |
| Figura 5.4 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via úmida para o componente CT (Café torrado) | 41 |
| Figura 5.5 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends processado via úmida para o componente CT (Café torrado) | 41 |
| Figura 5.6 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends processado via úmida para o componente CC (Conilon) | 42 |
| Figura 5.7 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via seca para o componente CC (Conilon) | 43 |
| Figura 5.8 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via seca para o componente CT (Café torrado) | 44 |
| Figura 5.9 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via seca para o componente CC (Conilon) | 44 |
| Figura 5.10 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via seca para o componente CT (Café torrado) | 45 |
| Figura 5.11 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends processado via seca para o componente CC (Conilon) | 45 |

Figura 5.12 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends

processado via seca para o componente CT (Café torrado) 46

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 3.1 – Caracterização dos tratamentos utilizados na composição dos blends. . . . | 31 |
| Tabela 3.2 – Composição dos blends formados pelos cafés Bourbon (CEB), Comercial torrado (CT), Conilon (CC) e Acaiá (CEA). | 32 |
| Tabela 5.1 – Estimativas dos parâmetros do modelo misto para os blends processados via úmida | 38 |
| Tabela 5.2 – Estimativas dos parâmetros do modelo misto para os blends processado via seca | 42 |

SUMÁRIO

| | | |
|--------------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 10 |
| 2 | REFERENCIAL TEÓRICO | 12 |
| 2.1 | Metodologias estatísticas aplicadas na aceitação de consumidores em relação à qualidade de cafés especiais | 12 |
| 2.2 | Experimento e delineamento de misturas | 13 |
| 2.3 | Modelos de regressão para os delineamentos de misturas | 19 |
| 2.3.1 | Parametrização de Scheffé | 19 |
| 2.3.2 | Parametrização de Kronecker | 21 |
| 2.4 | Introdução das variáveis de processo no modelo de mistura | 22 |
| 2.5 | Aspectos gerais de um modelo misto | 24 |
| 2.6 | Modelo linear misto gaussiano | 25 |
| 2.6.1 | Estimação dos parâmetros de um modelo linear misto gaussiano | 26 |
| 3 | MATERIAL E MÉTODOS | 31 |
| 3.1 | Descrição do experimento utilizado para estudo da aceitabilidade dos provadores em relação aos <i>blends</i>. | 31 |
| 4 | METODOLOGIA | 34 |
| 4.1 | Implementação do Modelo Misto | 34 |
| 5 | RESULTADOS E DISCUSSÕES | 38 |
| 5.1 | Blends com cafés especiais processados via úmida | 38 |
| 5.2 | Blends com cafés especiais processados via seca | 42 |
| 6 | CONCLUSÃO | 48 |
| | ANEXO A – Perfis dos experimentos em relação aos blends com cafés especiais processados via úmida para os componentes CEB (Café especial Bourbon) e CEA (Café especial Acaiá) | 53 |
| | ANEXO B – Perfis dos experimentos em relação aos blends com cafés especiais processados via seca para os componentes CEB (Café especial Bourbon) e CEA (Café especial Acaiá) | 54 |
| | REFERÊNCIAS | 49 |

1 INTRODUÇÃO

O café é um dos produtos comerciais mais apreciados na economia mundial por ser conhecido como uma bebida estimulante e por oferecer ao consumidor aroma e sabor característicos. Sua planta pertence à família da Rubiácea e ao gênero *Coffea*, possuindo 103 espécies das quais somente *Coffea Arabica* Lineu e *Coffea Canephora* Pierre têm importância de produção mundial. Na produção brasileira, 71% são derivados *C. arabica* e o restante de *C. canephora* (FERRÃO et al., 2007).

Em ambas as espécies, a denominação de um café especial decorre desde a colheita, processamento, de acordo com a cultivar, de modo a considerar a procedência no que se refere à denominação de origem. Em termos comerciais, um produto dessa natureza envolve um custo a muitos consumidores, em relação aos cafés comerciais. Diante dessa situação, surge como alternativa a formulação de *blends*.

Dada a variação de preços do café no mercado, visou-se à formulação de blends de *C. arabica* ou *C. canephora*, no setor de cafés torrados e moídos, de acordo com as suas características e qualidades (MENDES, 1999; MOURA et al., 2007). O blend é a mistura de dois ou mais tipos de cafés que podem ser da mesma espécie ou de diferentes espécies e também podem vir a ser de diferentes regiões e safras (CARVALHO, 1998; FERNANDES et al., 2003).

Os blends são apreciados, não apenas na aceitação do público, mas também por proporcionar uma maior justificativa na redução de custos, especificamente, quando se trata de misturas envolvendo *C. canephora*, sendo esse de preço menor, em relação a outros grãos (MENDES, 2005). Dessa forma, notam-se uma expressiva capacidade de competição, no mercado e um maior rendimento industrial (IVOGLIO et al., 2008).

Em análises, envolvendo misturas de diferentes componentes como, por exemplo, em blends de café, cuja variação do conteúdo de uma matéria-prima não pode ser realizada, sem que haja uma alteração dos conteúdos das outras a técnica estatística mais apropriada é o planejamento de experimentos com misturas (VILLAFRANCA, 1999).

Contudo existem diversas circunstâncias cujos os componentes da mistura podem ser as quais admitem variáveis denominadas variáveis de processo, em que o delineamento é formado pela junção do delineamento associado às variáveis de mistura com um delineamento associado

às variáveis de processo, gerando um delineamento de mistura para cada combinação dos níveis das variáveis de processo (CIRILLO, 2015).

Decorrente da aplicabilidade na indústria de torração, para que a qualidade dos blends seja aprimorada outros fatores devem ser contemplados como o método de processamento, uma vez que o sabor da bebida e, naturalmente a qualidade do blend, é afetada (BORÉM et al., 2008; FRANCA; MENDONÇA; OLIVEIRA 2005; NIJSSEN et al., 1996).

Neste cenário, em se tratando da análise sensorial de blends, certamente, a composição química da bebida é alterada. Esse fato torna-se um complicador na análise sensorial de experimentos de blends formados por cafés de diferentes espécies e qualidades.

Conforme o exposto, o propósito é agregar uma nova proposta metodológica, na comparação de experimentos de blends formados por cafés especiais, representados pelos cafés Arábica e não especiais, sendo esses, o café *Canephora* e cafés comerciais. Este trabalho foi realizado com o objetivo de propor um modelo misto que contemple os parâmetros dos experimentos como efeito aleatório.

Em uma abordagem didática, a metodologia, apresentada na estimação dos parâmetros do modelo, é verificada na abordagem dada pelo método de mínimos quadrados a qual é pouca difundida na construção de modelos mistos, porém de fácil compreensão ao entendimento do pesquisador para fazer outras implementações.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Metodologias estatísticas aplicadas na aceitação de consumidores em relação à qualidade de cafés especiais

A complexidade da realização de uma análise sensorial que envolve a degustação de cafés especiais é caracterizada pelo fato de que, em geral, os consumidores não têm o hábito e experiência sensorial para discriminar esses cafés quanto aos comerciais.

Esse fato torna complexa a análise estatística dessas informações, uma vez que resultados discrepantes são suscetíveis de ocorrerem. Assim, surge a necessidade de estudar metodologias estatísticas que permitem discriminar a qualidade dos cafés, bem como a segmentação de mercado que represente os constituintes.

Diante do que foi exposto, mencionamos técnicas estatísticas recentes que foram aplicadas a fim de avaliar os perfis de consumidores treinados e não treinados na discriminação de cafés especiais em relação aos cafés comerciais. Nesse sentido, procede-se a um relato da literatura descrito a seguir.

Ferreira et al. (2016) propuseram uma modelagem probabilística de algumas distribuições pertencentes à classe das distribuições generalizadas de valores extremos, cujo experimento sensorial foi realizado através da avaliação de quatro tipos de cafés especiais distintos quanto às características sensoriais sabor, acidez, corpo e nota, produzidos com diferentes processos no preparo e altitudes, considerando um painel sensorial com consumidores treinados e não treinados.

Os resultados das probabilidades dessa distribuição evidenciaram que a análise sensorial dos cafés especiais, realizada por consumidores não treinados, sugere que eles são inaptos a distinguir os cafés especiais.

Liska et al. (2015) avaliaram um experimento sensorial relacionado a testes de aceitação com quatro tipos de cafés especiais, em dois grupos de consumidores: treinados e não treinados.

Os atributos sensoriais avaliados foram o aroma, corpo, doçura e nota final. De forma simultânea, utilizaram uma abordagem multivariada pela análise de discriminante de Fisher

convencional (LDA) e a análise de discriminante via algoritmo de boosting (Adaboost), com o propósito de obter uma regra de classificação que discriminasse tais consumidores.

Os critérios utilizados, na comparação das duas abordagens, foram sensibilidade, especificidade, taxa de falsos positivos e de falsos negativos e a acurácia dos métodos classificatórios.

Assim, por essa análise, concluiu-se que a maior taxa de acerto foi dos provadores treinados, 80,63% e, conseqüentemente, redução na taxa de falsos negativos, 19,37%.

Ossani et al. (2017) utilizaram a técnica de múltiplos fatores aplicados a dados categorizados, conhecida como MFACT, provenientes de um experimento sensorial realizado com diferentes grupos de consumidores, com o propósito de identificar similaridades entre preferências dos consumidores, em relação a quatro cafés especiais. Concluíram que o uso dessa técnica é adequada por discriminar os cafés especiais degustados pelos consumidores e que são produzidos em diferentes altitudes e processamentos.

Ramos et al. (2016) propuseram uma análise da classificação da qualidade do café Arábica Bourbon amarelo. O experimento consistiu de diferentes tipos de pontuações, obtidas pelas avaliações sensoriais, baseadas no protocolo da Specialty Coffee Association of America (SCAA). Com essas especificações, árvores de decisão foram construídas, resultantes da aplicação do método CHAID (detecção de interação automática do qui-quadrado). Além das características sensoriais do Bourbon Amarelo, consideraram-se as características ambientais da região da serra de Mantiqueira do Estado de Minas Gerais, onde os cafés foram produzidos.

Os resultados da análise mostraram diferenças sensoriais notáveis na bebida, em pontuações acima de 88 pontos, associadas a ambientes crescentes em altitudes de mais de 1200m.

Em se tratando de metodologias estatísticas aplicadas a blends, uma alternativa viável de ser aplicada consiste na modelagem e planejamento de misturas, a serem descritos detalhadamente na seção a seguir.

2.2 Experimento e delineamento de misturas

Um delineamento de mistura é caracterizado pela restrição unitária $\sum_{i=1}^q X_i = 1$, em que $X_i (i = 1, \dots, q)$ representa a i -ésima variável, em um total de q componentes.

A representação geométrica de um delineamento de misturas, segundo menciona Nepomucena et al (2013) apresentam um espaço, no qual a região experimental é determinada por um simplex, definido em um contexto geométrico como a generalização do conceito de triângulo em outras dimensões.

O arranjo dos pontos experimentais, nas arestas ou internos a esse triângulo, define os delineamentos, sendo o principal látice simplex (SCHEFFÉ, 1963), caracterizado pelo par ordenado $\{q, m\}$, sendo q o número de componentes e m o número total de pontos a serem alocados em um segmento do simplex. Com a especificação desse par, torna-se possível determinar o número total de pontos experimentais, pela combinação (2.1)

$$P = \binom{q+m-1}{m}. \quad (2.1)$$

Exemplificando a expressão acima, considera-se $q = 3$ e $m = 2$, resultando em $p = 6$ pontos experimentais

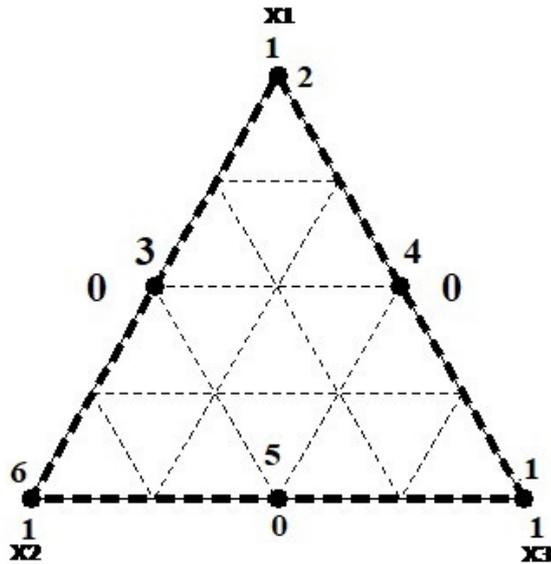
$$P = \binom{3+2-1}{2} = \binom{4}{2} = 6.$$

Assumindo o vetor $p = (0, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, 1)$ a cada permutação desses componentes, origina-se um ponto experimental. Desta forma, retornando ao exemplo, verificamos que os pontos experimentais, que formam o delineamento, correspondem às permutações $p = (0; 0, 5; 1)$. Logo, o delineamento resultante é definido em (2.2)

$$\begin{array}{c} X_1 \quad X_2 \quad X_3 \\ \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{array} \left[\begin{array}{ccc} 0,0 & 0,0 & 1,0 \\ 1,0 & 0,0 & 0,0 \\ 0,5 & 0,5 & 0,0 \\ 0,5 & 0,0 & 0,5 \\ 0,0 & 0,5 & 0,5 \\ 0,0 & 1,0 & 0,0 \end{array} \right]. \end{array} \quad (2.2)$$

A ordem da distribuição desses pontos pode ser de formas aleatórias, no entanto, são alocadas nas "arestas do triângulo", conforme ilustrada a Figura 2.1

Figura 2.1 – Região experimental do planejamento látice-simplex para uma mistura de três componentes.



A alocação dos pontos, no interior desse triângulo, é realizada pela adição dos pontos axiais. Com as coordenadas definidas por (2.3) (CIRILLO, 2015)

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{q+1}{2q}, \frac{1}{2q}, \frac{1}{2q}, \dots, \frac{1}{2q} \right) \\
 & \left(\frac{1}{2q}, \frac{q+1}{2q}, \frac{1}{2q}, \dots, \frac{1}{2q} \right) \\
 & \vdots \\
 & \left(\frac{1}{2q}, \frac{q+1}{2q}, \dots, \frac{1}{2q}, \dots, \frac{1}{2q}, \frac{q+1}{2q} \right)
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Retornando ao exemplo, assumindo $q=3$ componentes, os pontos axiais a serem obtidos são

$$\begin{aligned} & \left(\frac{3+1}{2 \times 3}, \frac{1}{2 \times 3}, \frac{1}{2 \times 3} \right) \\ & \left(\frac{1}{2 \times 3}, \frac{3+1}{2 \times 3}, \frac{1}{2 \times 3} \right) \\ & \left(\frac{1}{2 \times 3}, \frac{1}{2 \times 3}, \frac{3+1}{2 \times 3} \right). \end{aligned} \tag{2.4}$$

Com a inclusão desses pontos no delineamento, temos o delineamento completo dado em (2.5)

Figura 2.2 – Ilustração dos pontos experimentais com adição dos pontos axiais.

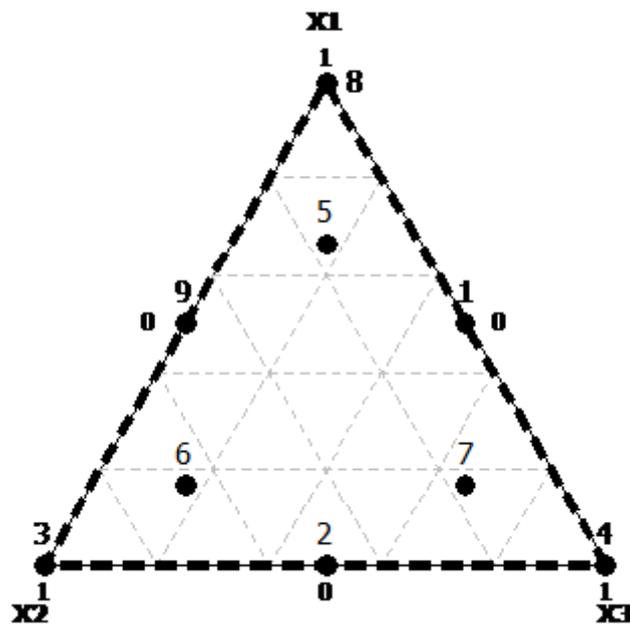
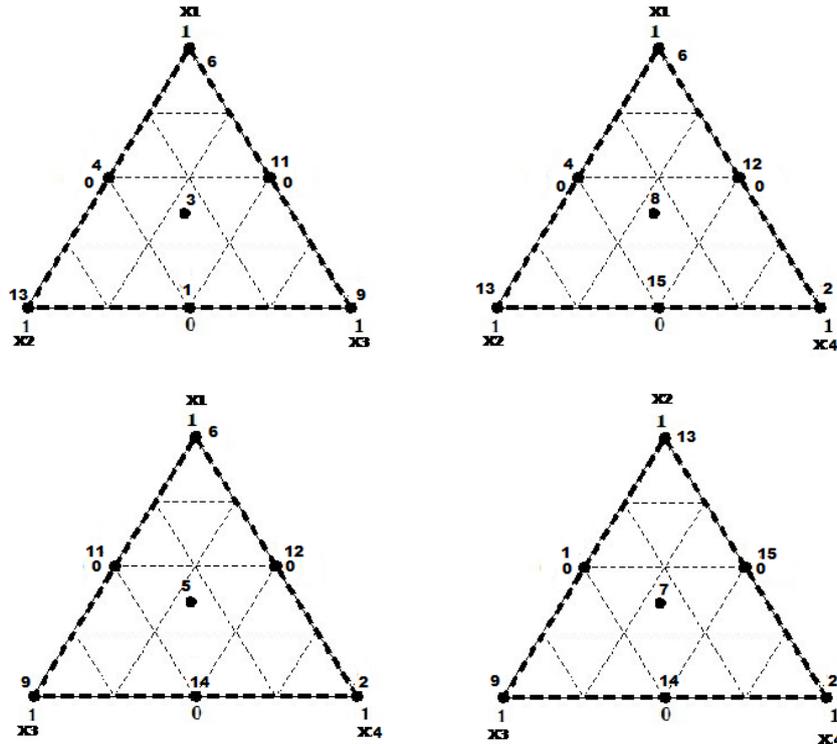


Figura 2.3 – Espaço experimental do planejamento centroide simplex para uma mistura de quatro componentes.



A alocação dos pontos axiais segue a mesma regra mencionada no látice, porém o número de pontos experimentais suportados por um delineamento é $2^q - 1$

2.3 Modelos de regressão para os delineamentos de misturas

Em ambos os delineamentos mencionados, nota-se que covariáveis, representados pelos componentes, são dependentes. Essa dependência decorre da imposição da restrição unitária $\sum_{i=1}^q X_i = 1$, portanto, o uso convencional do método de mínimos quadrados não é aplicado à estimação dos parâmetros, uma vez que a matriz inversa não será estimada. Algumas parametrizações são encontradas na literatura sendo as principais a parametrização de Scheffé (2.7) e Kroecker (2.11).

2.3.1 Parametrização de Scheffé

O entendimento do uso dessa parametrização inicia-se pela definição do modelo linear.

Considere, por exemplo, apenas $q = 3$ componentes puros, p pontos, conforme a expressão (2.7)

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \beta_3 X_{3i} + \varepsilon_i \quad (i = 1, \dots, p). \quad (2.7)$$

Nota-se, que em (2.8), o efeito do intercepto está confundido com os demais parâmetros. Impondo a restrição unitária $\sum_{i=1}^q X_i = 1$, no intercepto, o modelo fica reescrito por

$$\begin{aligned} Y_i &= (X_{1i} + X_{2i} + X_{3i})\beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \beta_3 X_{3i} + \varepsilon_i = \\ &= \beta_0 X_{1i} + \beta_0 X_{2i} + \beta_0 X_{3i} + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \beta_3 X_{3i} = \\ &= \underbrace{(\beta_0 + \beta_1)}_{\beta_1^*} X_{1i} + \underbrace{(\beta_0 + \beta_2)}_{\beta_2^*} X_{2i} + \underbrace{(\beta_0 + \beta_3)}_{\beta_3^*} X_{3i} \end{aligned}$$

logo, o modelo paramétrico é dado por

$$Y_i = \beta_1^* X_{1i} + \beta_2^* X_{2i} + \beta_3^* X_{3i} + \varepsilon_i \quad \text{para } (i = 1, \dots, p) \quad (2.8)$$

O procedimento, para a realização da parametrização, segundo Draper e Pukelsheim (1998) requer os seguintes passos:

1. Substitui o parâmetro β_0 por $\beta_0(X_1 + X_2 + X_3)$ uma vez que $X_1 + X_2 + X_3 = 1$;
2. Reescreva $X_1 = 1 - X_2 - X_3$; $X_2 = 1 - X_1 - X_3$ e $X_3 = 1 - X_1 - X_2$
3. Substitua os termos X_i em X_i^2 . Exemplificando, para X_1 tem-se

$$X_1^2 = (1 - X_2 - X_3) \times (1 - X_2 - X_3) = 1 - X_2 - X_3 - X_2(1 - X_2 - X_3) - X_3(1 - X_2 - X_3).$$

De forma análoga, segue para X_2^2 e X_3^2

4. Aplicando essas operações algébricas, na equação do modelo, reagrupando os termos, de modo que os coeficientes β_{ik} sejam substituídos por β_{ik}^* , o modelo quadrático resultante é dado por

$$Y_i = \beta_1^* X_1 + \beta_2^* X_2 + \beta_3^* X_3 + \beta_{12}^* X_1 X_2 + \beta_{13}^* X_1 X_3 + \beta_{23}^* X_2 X_3 + \varepsilon. \quad (2.9)$$

Em se tratando do modelo quadrático, dado o mesmo exemplo, isto é, p pontos e $q = 3$ componentes, generalizando para qualquer número de componentes, a equação é dada por

$$Y_i = \sum_{j=1}^3 \beta_j^* X_{ij} + \sum_{i=1}^3 \sum_{k=1}^3 \beta_{ik}^* X_{ij} X_{kj} + \varepsilon_i (i = 1, \dots, p). \quad (2.10)$$

2.3.2 Parametrização de Kronecker

Na parametrização de Kronecker, a restrição é multiplicar cada $X_i (i = 1, \dots, q)$. Dessa forma o termo X_1 é substituído por $X_1(X_1 + X_2 + X_3)$. De forma análoga, realiza-se a mesma operação para X_2 e X_3 , logo, os componentes são redefinidos pelas expressões (2.12)

$$\begin{aligned} X_1 &= X_1^2 + X_1X_2 + X_1X_3 \\ X_2 &= X_2^2 + X_1X_2 + X_2X_3 \\ X_3 &= X_3^2 + X_1X_3 + X_2X_3 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Com as devidas substituições algébricas aplicadas em (2.11), os coeficientes β_{ij}^* são renomeados por $\beta_{i'j'}$, originando o modelo quadrático de Kronecker dado por

$$Y_i = \beta_{11}X_1^2 + \beta_{22}X_2^2 + \beta_{33}X_3^2 + \beta_{12}X_1X_2 + \beta_{13}X_1X_3 + \beta_{23}X_2X_3 + \varepsilon_i (i = 1, \dots, p) \quad (2.12)$$

Nepomucena et al. (2013), em um experimento proposto, para otimizar misturas na extração da polpa de pequi, compararam as parametrizações de Scheffé e de Kronecker e concluíram que a melhoria, no condicionamento da matriz $\mathbf{X}'\mathbf{X}$, traz como vantagens a redução dos erros padrão dos coeficientes estimados e reduz a correlação entre as estimativas.

O modelo de Kronecker é obtido, por meio de substituições, realizadas diretamente no modelo (2.6). Mantendo a ilustração para três componentes ($q = 3$), temos:

$$Y_i = \beta_1X_1 + \beta_2X_2 + \beta_3X_3 + \beta_{12}X_1X_2 + \beta_{13}X_1X_3 + \beta_{23}X_2X_3 + \varepsilon_i \quad (2.13)$$

reportamos que na parametrização de Scheffé, inicialmente a restrição unitária era imposta no intercepto em um modelo quadrático.

Em ambos os modelos a contextualização das misturas, abordadas neste trabalho correspondem às variedades de cafés e suas respectivas proporções.

2.4 Introdução das variáveis de processo no modelo de mistura

Com a especificação do delineamento de mistura, associado ao modelo estimado segundo uma das parametrizações estimadas, a introdução de uma covariável, interpretada como um fator externo que interage nas composições das misturas, é definida como uma variável de processo.

A incorporação desta variável no modelo, de acordo com Prescott (2004), é feita pela combinação dos modelos referentes às variáveis que compõem a mistura e às variáveis de processo, respectivamente, representadas por $Q(\beta, X)$ e $Q(\alpha, W)$.

Assim, enunciamos as componentes sistemáticas, em função dessas terminologias, de modo que

$$Q(\beta, X) = \sum_{i=1}^q \beta_i X_i + \sum_{i < j} \beta_{ij} X_i X_j \quad (2.14)$$

$$Q(\alpha, W) = \alpha_0 + \sum_{i=1}^n \alpha_i W_i + \sum_{i=1}^n \alpha_{ii}^2 W_i + \dots \quad (2.15)$$

Observa-se que a especificação da componente $Q(\alpha, W)$ é arbitrária, não necessariamente seguindo a mesma especificação de $Q(\beta, X)$. Em outras palavras, $Q(\beta, X)$ poderá assumir termos quadráticos, enquanto $Q(\alpha, W)$ será descrito por um termo linear incluindo até mesmo termos de interação.

Dado essas especificações, a combinação das duas componentes resulta no modelo de mistura com a inclusão da variável de processo. Desta forma, escrevemos

$$Q(\gamma, X, W) = Q(\beta, X) + Q(\alpha, W)$$

O desenvolvimento desse modelo parte do pressuposto de que exista uma relação da variável de processo (W) com as variáveis de mistura (γ). Para um melhor entendimento,

consideremos o exemplo, assumindo duas variáveis de processo W_1 e W_2 . Seja

$$Q(\beta, X) = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \varepsilon$$

e

$$Q(\alpha, W) = \alpha_0 + \alpha_1 W_1 + \alpha_2 W_2 + \alpha_{12} W_1 W_2.$$

Assim,

$$Q(\gamma, X, W) = \beta_1 Q(\alpha, W) X_1 + \beta_2 Q(\alpha, W) X_2 + \beta_3 Q(\alpha, W) X_3 + \varepsilon$$

Dada as devidas operações algébricas, com a substituição de $Q(W, \alpha)$ e reescrevendo o modelo com a notação, sugerida por Cornell (2002), na qual assume $\gamma_i^0 = \alpha_0 \beta_i$; $\gamma_i^1 = \alpha_1 \beta_i \dots$ e $\gamma_{SR}^\lambda = \alpha_\lambda \beta_{SR}$, em que $\lambda \in \{1, 2, 12\}$ e $SR \in \{1, 2, 3, 12, 13, 23, 123\}$, resulta no modelo

$$Q(\gamma, X, W) = \sum_{i=1}^3 \gamma_i^0 X_i + \sum_{i=1}^3 \gamma_i^1 W_i X_i + \sum_{i=1}^3 \gamma_i^2 W_i X_i + \sum_{i=1}^3 \gamma_i^{12} W_1 W_2 X_i + \varepsilon_i. \quad (2.16)$$

Incluindo os termos $\beta_{12} X_1 X_2$, $\beta_{13} X_1 X_2$ e $\beta_{23} X_2$ em $Q(\beta, X)$ e realizando as operações algébricas, de modo que

$$Q(\gamma, X, W) = \beta_1 Q(\alpha, W) X_1 + \beta_2 Q(\alpha, W) X_2 + \beta_3 Q(\alpha, W) X_3 + \beta_{12} Q(\alpha, W) X_1 X_2,$$

e mantendo a mesma notação, proposta por Cornell (2002), o modelo $Q(\gamma, X, W)$ (2.16), fica acrescido pelos termos:

$$\sum_{i \leq k}^3 \sum_{j \leq k}^3 \gamma_{ij}^0 X_i X_j + \sum_{i \leq k}^3 \sum_{j \leq k}^3 \gamma_{ij}^1 W_1 X_i X_j + \sum_{i \leq k}^3 \sum_{j \leq k}^3 \gamma_{ij}^2 W_2 X_i X_j + \sum_{i \leq k}^3 \sum_{j \leq k}^3 \gamma_{ij}^{12} W_1 W_2 X_i X_j \quad (2.17)$$

Por fim, incluindo a interação tripla $\beta_{123} X_1 X_2 X_3$ em $Q(\beta, X)$, mantendo a mesma notação o modelo final $Q(\gamma, X, W)$, no qual é formado pela soma dos efeitos principais, interações duplas e triplas resultam em:

$$Q(\gamma, X, W) = \sum_{i=1}^3 \gamma_i^0 X_i + \sum_{i < j}^3 \sum_{k < l}^3 \gamma_{ijkl}^0 X_i X_j X_k X_l +$$

$$\begin{aligned}
& + \left[\sum_{i=1}^3 \gamma_i^1 X_i + \sum_{i<j} \gamma_{ij}^1 X_i X_j + \gamma_{123}^1 X_1 X_2 X_3 \right] W_i \\
& + \left[\sum_{i=1}^3 \gamma_i^2 X_i + \sum_{i<j} \gamma_{ij}^2 X_i X_j + \gamma_{123}^{12} W_2 X_1 X_2 X_3 \right] W_2 \\
& + \left[\sum_{i=1}^3 \gamma_i^{12} X_i + \sum_{i<j} \gamma_{ij}^{12} X_i X_j + \gamma_{123}^{12} X_1 X_2 X_3 + \right] W_1 W_2 + \varepsilon_i
\end{aligned}$$

em que ε_i corresponde ao erro experimental de modo que $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$.

Importante resaltar que a abordagem da interpretação e inclusão das variáveis de processo é restrita à regressão simplex (seção 2.2) e suas parametrizações.

No contexto deste trabalho, a variável de processo, representada pela concentração $0,07(m/v)$ e $0,10(m/v)$, será considerada como uma covariável de efeito fixo na construção do modelo misto a ser proposto na metodologia.

Uma nota importante a ser destacada é que, embora os modelos mistos possam ser estendidos para a classe dos modelos lineares generalizados, neste referencial, será apresentado apenas o modelo linear misto gaussiano sendo objeto de estudo deste trabalho.

2.5 Aspectos gerais de um modelo misto

Em síntese, um modelo misto é reconhecido pela presença de parâmetros que correspondem a fatores com efeitos fixos e outros aleatórios. Uma das vantagens de se trabalhar com modelos mistos, é que ele permite a predição de efeitos aleatórios (multiníveis) na presença de efeitos fixos. O modelo misto pode ser usado para modelar dados complexos agrupados ou longitudinais, e dados com múltiplas fontes de variação (DEMIDENKO, 2013).

Os modelos mistos podem ser linear, linear generalizado e não linear. Aqui, porém, será estudado o modelo linear misto gaussiano.

2.6 Modelo linear misto gaussiano

O modelo linear misto gaussiano, assume distribuição normal em seus efeitos aleatórios e erros (JIANG, 2007) e podem ser representados matricialmente por

$$\tilde{Y} = \mathbf{X}\tilde{\beta} + \mathbf{Z}\tilde{\lambda} + \tilde{\varepsilon} \quad (2.18)$$

em que,

\tilde{Y} é um vetor ($n \times 1$) de observações;

\mathbf{X} é a matriz $n \times (p + 1)$ de covariáveis dos efeitos fixos (conhecida) ;

$\tilde{\beta}$ é o vetor $(p + 1) \times 1$ de coeficientes de regressão de efeitos fixos desconhecidos;

\mathbf{Z} é a matriz ($n \times q$) dos efeitos aleatórios (conhecida);

$\tilde{\lambda}$ é o vetor ($q \times 1$) de efeitos aleatórios desconhecidos;

$\tilde{\varepsilon}$ é o vetor ($n \times 1$) de erros aleatórios.

A simplificação desse modelo, resulta em alguns modelos particulares a ser enuciado a seguir. **Modelo de efeitos aleatórios unidirecionais:** um modelo é chamado modelo de efeito aleatório, se o único efeito fixo for uma média desconhecida. Sendo assim, supõe-se que as observações y_{ij} , $i = 1, \dots, m$, $j = 1, \dots, k_i$ satisfaz em

$$y_{ij} = \mu + \lambda_i + \varepsilon_{ij}$$

para todo i e j , em que μ refere-se a uma média desconhecida, $\lambda_i, i = 1, \dots, m$ são os efeitos aleatórios, que são independentemente distribuídos por uma $N(0, \sigma^2)$, sendo os ε_{ijs} normalmente distribuídos $N(0, \tau^2)$. Naturalmente as variâncias σ^2 e τ^2 são desconhecidas.

Para expressar o modelo em termos matriciais, consideramos \mathbf{X} e \mathbf{Z} , matrizes de covariáveis de efeitos fixos e aleatórios respectivamente, adequados, no qual $\tilde{\lambda} \sim N(0, \sigma^2 I_m)$ e $\tilde{\varepsilon} \sim N(0, \tau^2 I_n)$ com $n = \sum_{i=1}^m k_i$. Um caso especial é quando $k_i = k$ para todos os i grupos indicados pelo i -ésimo fator, configurando o caso balanceado. Pode-se mostrar que, neste caso, o modelo pode ser expressado (2.18) com $X = 1_m \otimes 1_k = 1_{mk}$, $Z = I_m \otimes 1_k$, em que \otimes denota o produto de Kronecker.

Modelo de efeitos aleatórios bidirecional : Considerando como exemplo o caso de uma observação por célula. Assim, as observações y_{ij} com $i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, k$ satisfazem

$$y_{ij} = \mu + \xi_i + \eta_j + \varepsilon_{ij} \quad (2.19)$$

para todo i, j , ξ_i com $i = 1, \dots, m$, η_j com $j = 1, \dots, k$, são efeitos aleatórios independentes tais que $\xi_i \sim N(0, \sigma_1^2)$, $\eta_j \sim N(0, \sigma_2^2)$, e ε_{ij} são erros independentemente distribuídos por $N(0, \tau^2)$.

Supondo, ainda, que os efeitos aleatórios e os erros sejam independentes. Esse modelo, também, pode ser expresso, em termos matriciais conforme expressão (2.18). Observa-se que este modelo é diferente do exemplo unidirecional, no sentido de que, neste caso, as observações podem ser divididas em blocos independentes, ao passo que não existe tal divisão no caso unidirecional.

2.6.1 Estimação dos parâmetros de um modelo linear misto gaussiano

Na estimativa dos parâmetros do modelo linear misto gaussiano, os métodos mais usuais referem-se à máxima verossimilhança (MV) e máxima verossimilhança restrita (REML). Inicialmente, considera-se que a variável dependente é distribuída por uma distribuição normal multivariada especificada em

$$\tilde{y} \sim N_P(\mathbf{X}\tilde{\beta}, \mathbf{V}) \quad (2.20)$$

visto que $Var(\tilde{\varepsilon}) = E(\tilde{\varepsilon}\tilde{\varepsilon}') = \mathbf{R}$ e incorporando a variância residual, temos

$$\mathbf{V} = Var(\tilde{y}) = Var(\mathbf{X}\tilde{\beta} + \mathbf{Z}\tilde{\lambda} + \tilde{\varepsilon}) = \mathbf{ZGZ}' + \mathbf{R};$$

$$E(\tilde{y}) = E(\mathbf{X}\tilde{\beta} + \mathbf{Z}\tilde{\lambda} + \tilde{\varepsilon}) = \mathbf{X}\tilde{\beta};$$

logo os parâmetros da distribuição normal multivariada, associada a Y , ficam definidos por

$$\tilde{y} \sim N(\mathbf{X}\tilde{\beta}; \mathbf{ZGZ}' + \mathbf{R}).$$

Sendo sua densidade de probabilidade completamente especificada em

$$f(Y) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\mathbf{V}|^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\tilde{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta})' \mathbf{V}^{-1} (\tilde{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta}) \right\},$$

em que n é a dimensão de Y . A função log-verossimilhança é dada por

$$l(\tilde{\beta}, \sigma) = c - \frac{1}{2} \log(|\mathbf{V}|) - \frac{1}{2} (\tilde{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta})' \mathbf{V}^{-1} (\tilde{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta}) \quad (2.21)$$

em que σ representa o vetor de todos os componentes de variâncias (envolvidas em \mathbf{V}), e c refere-se a uma constante. Ao diferenciar a log-verossimilhança com relação aos parâmetros, obtemos

$$\frac{\partial l}{\partial \tilde{\beta}} = \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \tilde{y} - \mathbf{X}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X} \tilde{\beta}, \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial l}{\partial \sigma^2} = \frac{1}{2} \left\{ (\tilde{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta})' \mathbf{V}^{-1} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \sigma^2} \mathbf{V}^{-1} (\tilde{y} - \mathbf{X}\tilde{\beta}) - \text{tr} \left(\mathbf{V}^{-1} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \sigma^2} \right) \right\}. \quad (2.23)$$

O procedimento numérico, envolvido na obtenção das estimativas da máxima verossimilhança (MV), consiste em resolver o sistema com a matriz das variâncias estimadas por (MV). Uma alternativa para obter $\hat{\beta}$ é, por meio de métodos de mínimos quadrados, conforme é verificado pela substituição em (2.24). Evidentemente, assume \mathbf{X} como uma matriz inversível.

$$\begin{cases} \partial l / \partial \tilde{\beta} = 0 \\ \partial l / \partial \sigma = 0 \end{cases}$$

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}' \hat{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}' \hat{\mathbf{V}}^{-1} \tilde{y}, \quad (2.24)$$

sendo $\hat{\mathbf{V}} = \mathbf{V}\hat{\sigma}$, isto é, \mathbf{V} com os componentes de variância envolvidos substituídos por suas estimativas de máxima verossimilhança. Assim, uma vez que o (EMV) de σ é encontrado, o (EMV) de β pode ser calculado pela expressão (2.24). Em relação ao (EMV) de σ , dado em (2.23), (JIANG, 2007), mostra-se que ele satisfaz

$$\tilde{y}' \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \sigma^2} \mathbf{P} \tilde{y} = \text{tr} \left(\mathbf{V}^{-1} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \sigma^2} \right) \quad (2.25)$$

em que

$$\mathbf{P} = \mathbf{V}^{-1} - \mathbf{V}^{-1}\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{V}^{-1} \quad (2.26)$$

portanto, o procedimento inicial, implica em primeiramente resolver (2.25) para $\hat{\delta}$ e então calcular $\hat{\beta}$ por (2.24).

Outra abordagem proposta por Swamy (1970), trata-se de um modelo no qual apenas o efeito fixo é exposto, conforme a equação

$$\underbrace{y_i}_{(n \times 1)} = \underbrace{X_i}_{(n \times T)} \underbrace{\beta_i}_{(T \times 1)} + \underbrace{\varepsilon_i}_{(n \times 1)} \quad i=1,2,\dots,t \quad (2.27)$$

em que possui n observações em cada uma das t unidades individuais, sendo que os y_i e os X_i são observados para $i = 1, 2, \dots, t$. A matriz $X_i (i = 1, 2, \dots, t)$ contém observações dos p regressores não aleatórios e $X_{itp} (t = 1, 2, \dots, T; i = 1, 2, \dots, P)$ e β_i e ε_i são vetores aleatórios não observados.

Assim, assume-se que para $i, j = 1, 2, \dots, T$ possui

$$E(\varepsilon_i) = 0, \quad E(\varepsilon_i \varepsilon_j') = \begin{cases} \sigma_{ii} I & \text{com } i = j \\ 0 & \text{com } i \neq j \end{cases} \quad (2.28)$$

$$E(\beta_i) = \tilde{\beta} \quad (2.29)$$

$$E(\beta_i - \tilde{\beta})(\beta_j - \tilde{\beta})' = \begin{cases} \tilde{\lambda} & \text{com } i = j \\ 0 & \text{com } i \neq j \end{cases} \quad (2.30)$$

$$\beta_i \text{ e } \varepsilon_j \text{ são independentes} \quad (2.31)$$

β_i e β_j para $i \neq j$ são independentes, sendo $\beta_i = \tilde{\beta} + \lambda_i (i = 1, 2, \dots, T)$, em que $\tilde{\lambda}$ é um vetor $T \times 1$ de elementos aleatórios.

Os pressupostos de (2.27) e (2.28) equivalem a dizer que $E(\lambda_i \lambda_j') = 0$ é

$$E(\lambda_i \lambda_j') = \begin{cases} \tilde{\lambda} & \text{com } i = j \\ 0 & \text{com } i \neq j \end{cases} \quad (2.32)$$

respectivamente.

A suposição de independência sugere que λ_i e λ_j para $i \neq j$ são independentes, portanto, pode-se escrever a equação em sua forma matricial

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_T \end{bmatrix} \beta + \begin{bmatrix} Z_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & Z_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & Z_T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_T \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

ou como

$$\tilde{y} = \mathbf{X}\tilde{\beta} + \mathbf{Z}\tilde{\lambda} + \tilde{\varepsilon} \quad (2.34)$$

em que $\tilde{y} = [y_1, y_2, \dots, y_T]'$, $\mathbf{X} = [X_1, X_2, \dots, X_T]'$, $\mathbf{Z} = [Z_1, Z_2, \dots, Z_T]'$, $\tilde{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_T]'$, $\tilde{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_T]'$. Sob os pressupostos de (2.28)-(2.31), o vetor de perturbação $\mathbf{Z}\tilde{\lambda} + \tilde{\varepsilon}$ tem matriz de covariância

$$\mathbf{V}(\theta) = \begin{bmatrix} X_1 \Delta X_1' + \sigma_{11} I & 0 & \dots & 0 \\ 0 & X_2 \Delta X_2' + \sigma_{22} I & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & X_N \Delta Z_N' + \sigma^{NN} I \end{bmatrix}_{NT \times NT} \quad (2.35)$$

O σ_{ii} é a variância do termo de perturbação da i -ésima unidade. Os pressupostos (2.28) e (2.30) sugerem que os vetores do coeficiente de regressão β_i são aleatórios e não correlacionados, mas seguem distribuição com média $\tilde{\beta}$ e matriz de covariância Δ . Neste ponto, diante de alguns questionamentos observados por Hildreth e Houck (1968) e Wald (1947), em relação aos pressupostos (2.28)-(2.32), dado que Δ e σ_{ii} são desconhecidos. Os autores sugerem as

estimativas

$$s_{ii} = \frac{y_i' M_i y_i}{T - \Lambda} \quad (2.36)$$

em que $M_i = I - X_i(X_i'X_i)^{-1}X_i$. Um estimador imparcial de Δ é dado por

$$\hat{\Delta} = \frac{S_b}{N-1} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_{ii} (X_i'X_i)^{-1} \quad (2.37)$$

em que

$$S_b = \sum b_i b_i' - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N b_i \sum_{i=1}^N b_i'$$

e

$$b_i = (X_i'X_i)^{-1}X_i'X_i$$

3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Descrição do experimento utilizado para estudo da aceitabilidade dos provadores em relação aos *blends*.

Para a formulação dos *blends*, foram utilizados cafés com diferentes padrões de qualidade, considerando as proporções dos genótipos de cafés especiais Bourbon Arábica (*CEB*) e Acaiá (*CEA*), além dos cafés Conilon (*CC*) comercial torrado (*CT*). Desta forma, quatro experimentos foram realizados, considerando os cafés processados via seca e úmida, além das concentrações da bebida definida nas porcentagens de 0,07 e 0,10 (m/v), caracterizando *blends* com bebidas fracas e fortes. Uma descrição resumida dos experimentos encontra-se na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Caracterização dos tratamentos utilizados na composição dos *blends*.

| Experimento | Genótipo | Altitude | Concentração % (m/v) |
|----------------------------|-----------------|------------------|----------------------|
| Em processamento via seca | | | |
| 1 | Bourbon Amarelo | acima de 1200 m | 7 |
| 2 | Bourbon Amarelo | acima de 1200 m | 10 |
| 3 | Acaiá | abaixo de 1100 m | 7 |
| 4 | Acaiá | abaixo de 1100 m | 10 |
| Em processamento via úmida | | | |
| 1 | Bourbon Amarelo | acima de 1200 m | 7 |
| 2 | Bourbon Amarelo | acima de 1200 m | 10 |
| 3 | Acaiá | abaixo de 1100 m | 7 |
| 4 | Acaiá | abaixo de 1100 m | 10 |

Dadas essas concentrações, o preparo das amostras foi feito utilizando água potável a 93°C sem adição de açúcar. O tempo de extração foi de 4 minutos, empregando o método de preparo e filtração. Dessa maneira, foram evitados quaisquer riscos relacionados a reações alérgicas ou ao aumento da taxa de glicose nos indivíduos avaliadores pertencentes às amostras de consumidores comuns, respeitando-se as normas de higiene impostas pelo comitê de ética sob o protocolo de CAAE: 14959413.1.0000.5148.

Com o propósito de inferir o efeito da concentração da bebida definida nas porcentagens 0,07 e 0,10 m/v (35g/500 ml), em que 0,07 (m/v) significa 7 gramas de pó de café (m

de massa) para cada 100 ml de água (v de volume), o mesmo a 0,10, os experimentos foram avaliados conjuntamente, considerando as composições descritas na (Tabela 3.2). Dessa forma, a identificação dos blends na análise conjunta, segue a codificação na amostra ($k = 1, \dots, 36$), referindo-se aos blends analisados nos experimentos 1, 2, 3 e 4. Quanto ao contexto dos blends, trata-se de um produto a ser comercializado, o café da espécie canephora, sendo tratado, doravante por Conilon, conforme sugere a descrição da Tabela 3.1, em função do tipo de processamento.

Tabela 3.2 – Composição dos blends formados pelos cafés Bourbon (CEB), Comercial torrado (CT), Conilon (CC) e Acaia (CEA).

| Experimento 1 | | | | | Experimento 3 | | | | |
|---------------|-------|-------|-------|-------|---------------|-------|-------|-------|-------|
| Amostra (K) | CEB | CT | CC | CEA | Amostra (K) | CEB | CT | CC | CEA |
| 1 | 1,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 19 | 1,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| 2 | 0,670 | 0,330 | 0,000 | 0,000 | 20 | 0,670 | 0,330 | 0,000 | 0,000 |
| 3 | 0,340 | 0,330 | 0,330 | 0,000 | 21 | 0,340 | 0,330 | 0,330 | 0,000 |
| 4 | 0,500 | 0,500 | 0,000 | 0,000 | 22 | 0,500 | 0,500 | 0,000 | 0,000 |
| 5 | 0,500 | 0,000 | 0,500 | 0,000 | 23 | 0,500 | 0,000 | 0,500 | 0,000 |
| 6 | 0,340 | 0,660 | 0,000 | 0,000 | 24 | 0,340 | 0,660 | 0,000 | 0,000 |
| 7 | 0,340 | 0,000 | 0,660 | 0,000 | 25 | 0,340 | 0,000 | 0,660 | 0,000 |
| 8 | 0,000 | 1,000 | 0,000 | 0,000 | 26 | 0,000 | 1,000 | 0,000 | 0,000 |
| 9 | 0,000 | 0,000 | 1,000 | 0,000 | 27 | 0,000 | 0,000 | 1,000 | 0,000 |
| Experimento 2 | | | | | Experimento 4 | | | | |
| Amostra (K) | CEB | CT | CC | CEA | Amostra (K) | CEB | CT | CC | CEA |
| 10 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 1,000 | 28 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 1,000 |
| 11 | 0,000 | 0,330 | 0,000 | 0,670 | 29 | 0,000 | 0,330 | 0,000 | 0,670 |
| 12 | 0,000 | 0,333 | 0,330 | 0,340 | 20 | 0,000 | 0,330 | 0,330 | 0,340 |
| 13 | 0,000 | 0,500 | 0,000 | 0,500 | 31 | 0,000 | 0,500 | 0,000 | 0,500 |
| 14 | 0,000 | 0,000 | 0,500 | 0,500 | 32 | 0,000 | 0,000 | 0,500 | 0,500 |
| 15 | 0,000 | 0,660 | 0,000 | 0,340 | 33 | 0,000 | 0,660 | 0,000 | 0,340 |
| 16 | 0,000 | 0,000 | 0,660 | 0,340 | 34 | 0,000 | 0,000 | 0,660 | 0,340 |
| 17 | 0,000 | 1,000 | 0,000 | 0,000 | 35 | 0,000 | 1,000 | 0,000 | 0,000 |
| 18 | 0,000 | 0,000 | 1,000 | 0,000 | 36 | 0,000 | 0,000 | 1,000 | 0,000 |

Cada experimento foi executado, em sessões distintas com intervalos de 24 horas, em virtude do número excessivo de avaliações. O grupo de indivíduos avaliadores, em um experimento de teste, foi composto por cinco provadores qualificados, para serem considerados aptos a diferenciar as amostras nos experimentos sensoriais. Cada avaliador degustou cerca de 20

ml de bebida preparada, a partir dos blends formulados, na temperatura de, aproximadamente, 65°C, servidos em copos descartáveis.

Após a degustação de cada blend, o avaliador registrou sua avaliação em fichas apropriadas. Os blends foram avaliados recebendo notas que variaram de 0 a 10 para as características qualitativas da bebida: sabor, amargor e nota final, representando a impressão global da qualidade descrita pelos avaliadores. Ressalta-se que a justificativa do modelo gaussiano, em função dessas variáveis, é pautada pelo fato de que as respostas foram obtidas em uma escala contínua.

Por questões metodológicas, ao considerar a implementação do modelo misto, cada componente, respectivamente, foi numerado por X_1 , X_2 , X_3 e X_4 .

4 METODOLOGIA

4.1 Implementação do Modelo Misto

A estimação do modelo misto foi realizada, por meio do método de mínimos quadrados, seguindo o procedimento sugerido por Kalirajan (1990). A entrada inicial dos dados é feita, inicialmente, a cada experimento, indexado por $t = 1, \dots, 4$ e $r = 1$ e 2 , referindo-se, respectivamente, às concentrações estabelecidas no t -ésimo experimento. Seguindo essas especificações, X_1, \dots, X_4 correspondem às variáveis de misturas (Tabela 3.2), às variáveis, Z_1, \dots, Z_4 correspondem à matriz de incidência, dada a seguir (4.2), que identificam os experimentos como parâmetros no modelo.

$$S_t = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 & X_3 & X_4 : C_r \\ Z_1 & Z_2 & Z_3 & Z_4 : C_r \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 1 & 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & 0 & 1 & 0 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 & 0 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \end{bmatrix}. \quad (4.2)$$

Em seguida, obtiveram-se as estimativas de mínimos quadrados ordinários de Y_i ($i = 1, 2, 3$) representando, respectivamente, as respostas associadas aos atributos, sabor, amargor e nota, conforme a expressão (4.3).

$$\hat{\theta}_i = (S'_i S_i)^- S'_i Y_{it} \quad (4.3)$$

sendo $(S'_i S_i)^-$ a inversa generalizada formada pela partição das matrizes dada a seguir

$$(S'_i S_i)^- = \begin{bmatrix} S_i^{11} & S_i^{12} \\ S_i^{21} & S_i^{22} \end{bmatrix},$$

em que S_i^{22} é a matriz de informação correspondente aos efeitos aleatórios associados à matriz de delineamento, representada em Z .

As estimativas conjuntas dos parâmetros do modelo foram feitas, seguindo o procedimento adotado por Swamy (1971), de modo a considerar as restrições paramétricas, em relação

à matriz de covariância dos parâmetros e informação dos efeitos aleatórios. Assim, as estimativas de mínimos quadrados generalizados são obtidas em (4.4)

$$\hat{\theta} = (S'V^{-1}S)^{-1}S'V^{-1}Y_i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (4.4)$$

em que

$$V = \begin{bmatrix} Z_1\hat{\Delta}Z_1' + \sigma^2I & & & \\ & Z_2\hat{\Delta}Z_2' + \sigma^2I & & \\ & & Z_3\hat{\Delta}Z_3' + \sigma^2I & \\ & & & Z_4\hat{\Delta}Z_4' + \sigma^2I \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

Em (4.5) temos a variância de cada experimento, definida em (4.6) em que n é o número total de pontos experimentais, p é o número de covariáveis de efeito fixo e q o número de variáveis aleatórias.

As estimativas iniciais para σ^2 e Δ foram dadas, respectivamente, por

$$\hat{\sigma}_t^2 = \frac{[(Y_t - S_t\hat{\theta}_t)'(Y_t - S_t\hat{\theta}_t)]}{(n - p - q)} \quad (4.6)$$

e a matriz de covariância global das estimativas dos parâmetros do modelo estimado em (4.7)

$$\hat{\Delta} = \frac{1}{T-1} \left[\sum_t (\hat{\theta}_t - \bar{\theta})'(\hat{\theta}_t - \bar{\theta}) \right] - \frac{1}{T} [\sum \sigma_t^2 S_t^2]. \quad (4.7)$$

Nota-se que o primeiro termo referiu-se às covariâncias das estimativas dos parâmetros do modelo ajustado para cada experimento ($t = 1, \dots, 4$), e o segundo termo à informação dos efeitos aleatórios, sendo $\bar{\theta}$ representado por

$$\bar{\theta} = \frac{1}{T} \sum \hat{\theta}_t. \quad (4.8)$$

Entretanto, seguindo as recomendações de Kalirajan (1990) a matriz dos pesos foi corrigida, aplicando o teorema da composição do valor singular,

$$V = M\tilde{\Delta}M \quad (4.9)$$

de modo que, sendo M uma matriz de vetores ortogonais e $\tilde{\Delta}$ uma matriz diagonal composta por autovalores de $\tilde{\Delta}$, logo, V foi redefinido por

$$V = \begin{bmatrix} Z_1\tilde{\Delta}Z_1' + \sigma^2I & & & \\ & Z_2\tilde{\Delta}Z_2' + \sigma^2I & & \\ & & Z_4\tilde{\Delta}Z_4' + \sigma^2I & \\ & & & Z_4\tilde{\Delta}Z_4' + \sigma^2I \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

e substituído na expressão (4.4), logo, o modelo misto foi dado pela equação

$$y_{ijrt} = \sum_{j=1}^4 \beta_j X_j + \theta C_r + \sum_{t=1}^4 \lambda_t Z_t + \varepsilon_{ijrt}$$

especificando a X_j -ésima componente ($j = 1, \dots, 4$), na r -ésima concentração ($r = 1$ e 2), caracterizando os efeitos fixos, os parâmetros dos efeitos aleatórios foram representados por γ_t ($t = 1, \dots, 4$) e ε_{ijrt} o erro aleatório distribuído com $\varepsilon_{ijrt} \sim N(0, \hat{\sigma}_t^2)$.

Com base nos valores preditos, procedeu-se à construção do gráfico dos perfis dos experimentos em função de cada componente, no qual o efeito da variável de processo foi dada como covariável, de modo a simplificar o ajuste do modelo de regressão simplex, conforme relatado na seção (2.4).

Para a realização das análises, foi elaborado scripts no software R (R CORE TEAM, 2017), disponível no pacote BLENDSTAT.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 Blends com cafés especiais processados via úmida

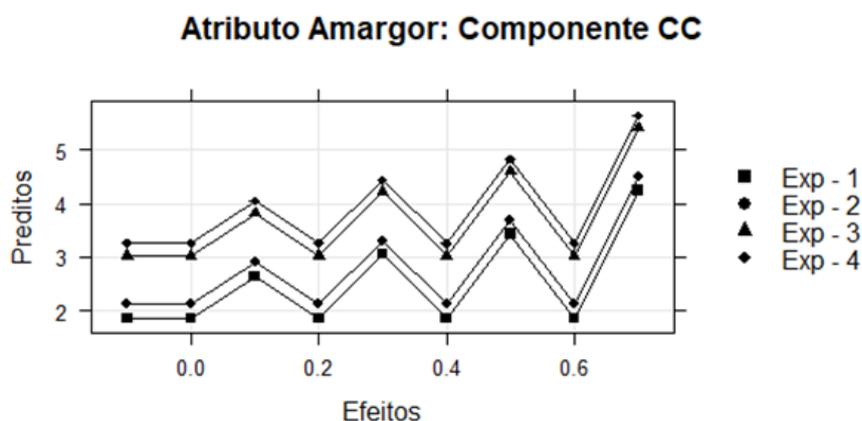
Os resultados descritos na Tabela 5.1 indicam as estimativas dos parâmetros do modelo misto, considerando os blends processados via úmida. Desta forma, com base nos valores preditos, o trace plot foi feito por experimentos, em função dos quatro componentes envolvidos na composição dos blends. Contudo, ressaltamos a discussão dos resultados nos componentes CC (Conilon) e CT (Café comercial torrado), visto que esses cafés não foram tratados como especiais. Os gráficos dos efeitos dos cafés especiais CEB (Bourbon Amarelo) e CEA (Acaíá), seguem anexos em que a interpretação é análoga aos resultados apresentados nessa seção.

Tabela 5.1 – Estimativas dos parâmetros do modelo misto para os blends processados via úmida

| Estimativas dos parâmetros do modelo fixo | | | |
|---|---------|------|-------|
| Parâmetros | Amargor | Nota | Sabor |
| CEB (β_1) | 1,99 | 4,27 | 4,06 |
| CT (β_2) | 4,75 | 0,38 | 0,2 |
| CC (β_3) | 2,38 | 1,38 | 1,19 |
| CEA (β_4) | 0,81 | 4,05 | 4,3 |
| CONC (θ) | 0,87 | 0,83 | 0,79 |
| Estimativas dos parâmetros dos efeitos Aleatórios | | | |
| EXP 1 (λ_1) | 1,79 | 2,92 | 3,05 |
| EXP 2 (λ_2) | 2,05 | 2,79 | 2,93 |
| EXP 3 (λ_3) | 2,93 | 2,59 | 2,2 |
| EXP 4 (λ_4) | 3,16 | 1,78 | 1,57 |

Seguindo as especificações dos experimentos (Tabela 3.1), os resultados referentes ao comportamento dos experimentos, em relação ao componente CC (Conilon), considerando o atributo amargor (Figura 5.1), observou-se que os experimentos, codificados em 2 e 3, apresentaram respostas médias similares, ao passo que os experimentos 1 e 4 evidenciaram respostas concordantes reportando à Tabela 3.1, dada a especificação desses experimentos, entende-se que os valores preditos para o amargor não foram influenciados pela presença dos cafés Bourbon ou Acaíá, bem como a procedência dos genótipos e a concentração utilizada na formulação dos blends.

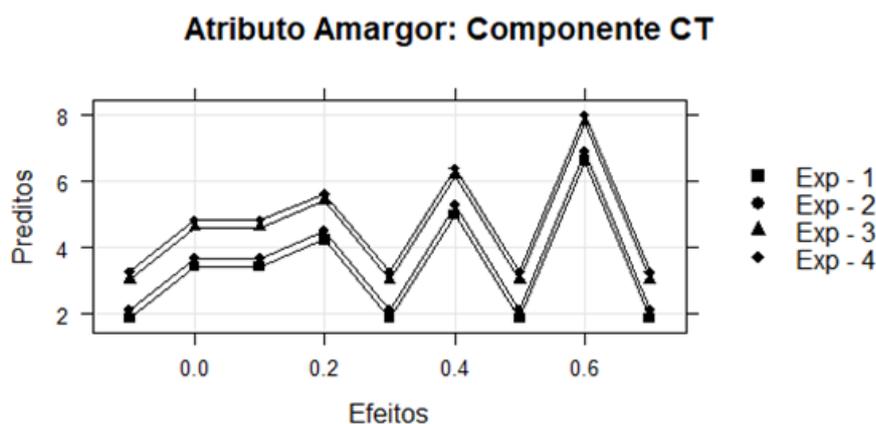
Figura 5.1 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via úmida para o componente CC (Conilon)



Em se tratando do componente CT (Café torrado), por meio da Figura 5.2, observou-se a mesma similaridade entre os experimentos. Ressalta-se que, para blends com proporções superiores à média, o efeito dos experimentos produziu um efeito antagônico na resposta Amargor.

Em outras palavras, nota-se que as respostas referentes ao atributo amargor, quando comparada aos componentes CT (Café torrado) e CC (Conilon) não são correlacionadas.

Figura 5.2 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via úmida para o componente CT (Café torrado) .



No tocante ao atributo sabor, mais especificamente ao componente CC (Conilon), a similaridade entre os experimentos é mais pronunciada em relação aos experimentos 1 e 2, ou seja, independente da concentração, os blends que formados pela composição do café especial Bourbon Amarelo apresentam valores preditos superiores e idênticos, aos demais blends.

Vale ressaltar que esses cafés foram produzidos em regiões de altitude acima de 1200m.

Sendo assim, os resultados obtidos foram concordantes com Ramos et al. (2016), ao utilizarem um procedimento de mineração de dados, mais especificamente a árvores de decisão construída pelo método CHAID. Os autores concluíram que as características sensoriais da bebida do café arábica puro estão associadas a faixas de altitudes com menos influência nas formas de processamento consideradas.

Tais resultados foram também evidenciados no componente CT(Café torrado), ao observar a Figura 5.4. Entretanto, destaca-se um comportamento bem diferenciado, quando se comparam os experimentos 3 e 4, possivelmente, ocasionado por diferentes concentrações utilizadas na composição dos blends, dado que esses blends são formados por cafés do mesmo genótipo e produzidos na mesma altitude.

Figura 5.3 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via úmida para o componente CC (Conilon)

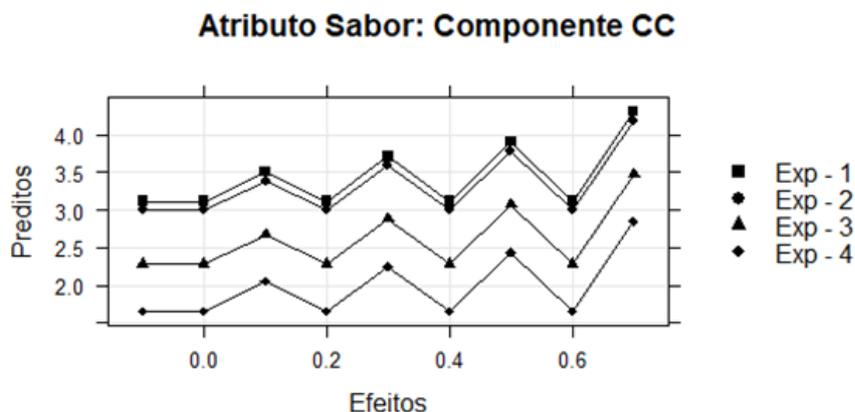
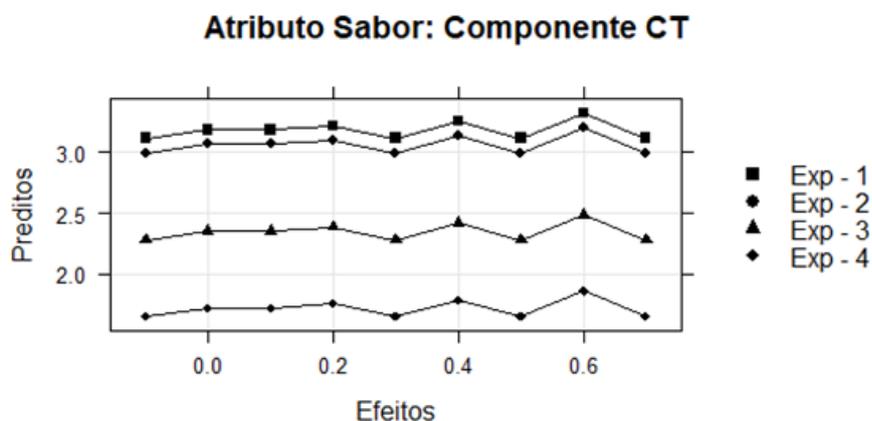


Figura 5.4 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via úmida para o componente CT (Café torrado) .



Em um aspecto mais geral, a influência dos blends e dos atributos sensoriais relatados anteriormente, conduziram a uma similaridade entre os experimentos 1,2 e 3 para o componente CT (Café torrado) e CC (Conilon), conforme visto na figura 5.6. Assim, referindo-se à especificação dos experimentos, para esse atributo, o experimento cujo genótipo a ser utilizado na composição do blend foi dado pelo Acaiá, produzido em altitude abaixo de 1.100m e utilizado em uma composição de 0,10 (m/v), mostrou-se heterogêneo em relação aos demais, apresentando novamente respostas antagônicas.

Figura 5.5 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends processado via úmida para o componente CT (Café torrado) .

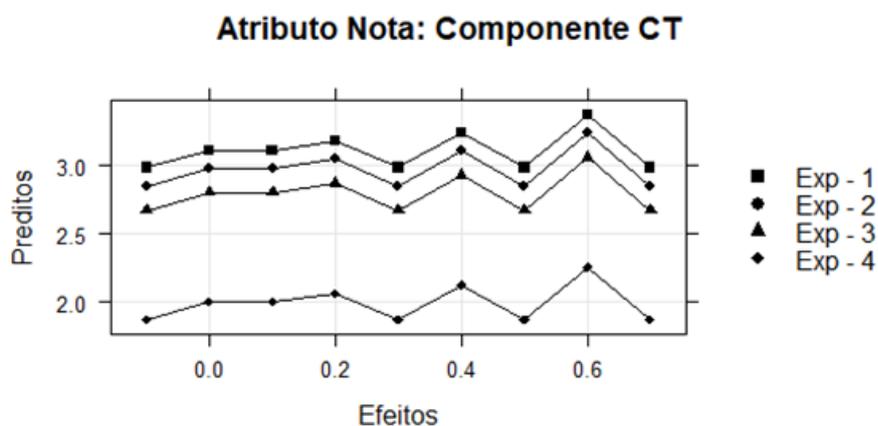
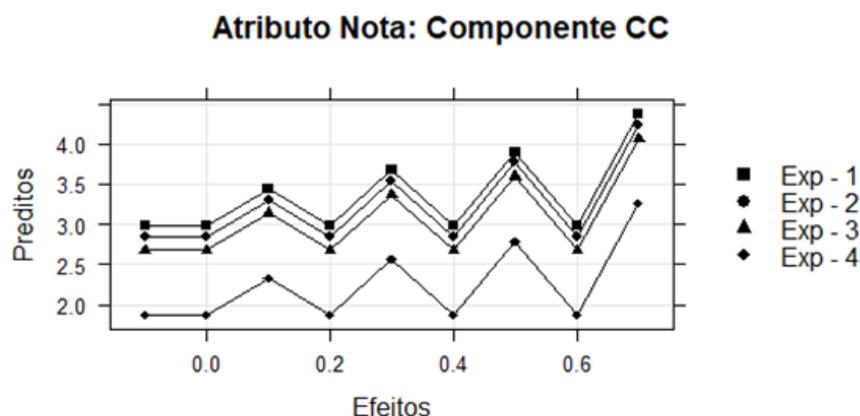


Figura 5.6 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends processado via úmida para o componente CC (Conilon)



5.2 Blends com cafés especiais processados via seca

Os resultados descritos na Tabela 5.2 correspondem às estimativas dos parâmetros do modelo misto ajustado para os atributos: Amargor, Nota e Sabor, considerando os cafés especiais processados via seca.

Tabela 5.2 – Estimativas dos parâmetros do modelo misto para os blends processado via seca

| Estimativas dos parâmetros do modelo fixo | | | |
|---|---------|------|-------|
| Parâmetros | Amargor | Nota | Sabor |
| CEB (β_1) | 0,58 | 4,31 | 4,48 |
| CT (β_2) | 4,9 | 0,22 | 1,17 |
| CC (β_3) | 2,87 | 1,12 | 0,91 |
| CEA (β_4) | 0,14 | 4,63 | 4,12 |
| CONC (θ) | 0,73 | 0,86 | 0,91 |
| Estimativas dos parâmetros dos efeitos Aleatórios | | | |
| EXP 1 (λ_1) | 2,17 | 2,45 | 2,17 |
| EXP 2 (λ_2) | 1,68 | 3,11 | 3,17 |
| EXP 3 (λ_3) | 3,26 | 1,56 | 1,77 |
| EXP 4 (λ_4) | 1,38 | 3,17 | 3,59 |

Em se tratando do atributo amargor, dado o componente CC (Conilon), por meio da Figura 5.7, notou-se que o experimento 3, com especificação dada pelo genótipo Acaiá, produzido em altitude abaixo de 1100m e formulado com baixa concentração, mostrou-se heterogêneo em relação aos demais blends, caracterizados nos experimentos (2)- (4). De forma análoga, essa característica, também, foi observada, em relação ao componente CT (Café Tor-

rado), ao observar os resultados ilustrados na Figura 5.8, mostrando uma concordância nos resultados experimentais para esse atributo.

Comparando esses resultados com os observados em relação aos mesmos componentes e atributo, para os cafés processados via seca, nota-se uma diferenciação na heterogeneidade dos experimentos. Ribeiro et al. (2014) mencionam que, para os cafés puros, essa diferença não deve ser atribuída somente à forma de processamento, mas também à ocorrência de fermentações indesejáveis. Outro resultado de destaque refere-se ao fato de que cafés produzidos pela via seca resultam em qualidade inferior aos cafés produzidos por via úmida (VILELA, 2002).

De maneira, em geral, mesmo considerando os parâmetros do modelo, como os experimentos descritos por efeitos aleatórios, naturalmente, ocorrem oscilações entre os valores preditos, comparando ambas as formas de processamento poderão ser supostamente explicáveis.

Figura 5.7 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via seca para o componente CC (Conilon)

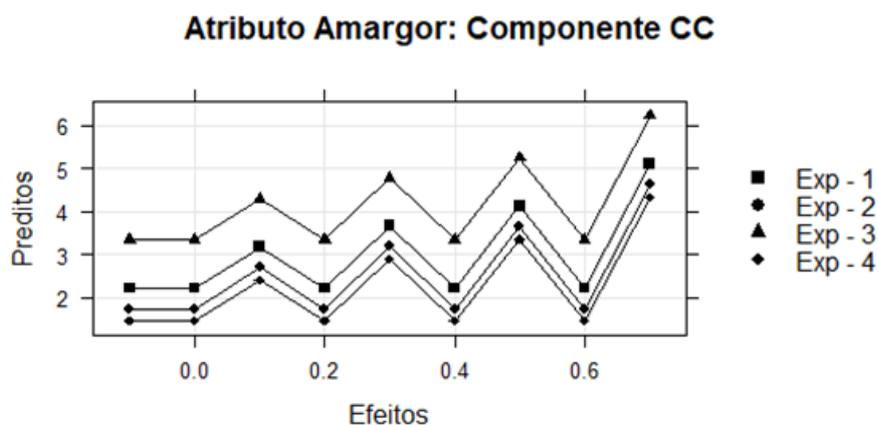
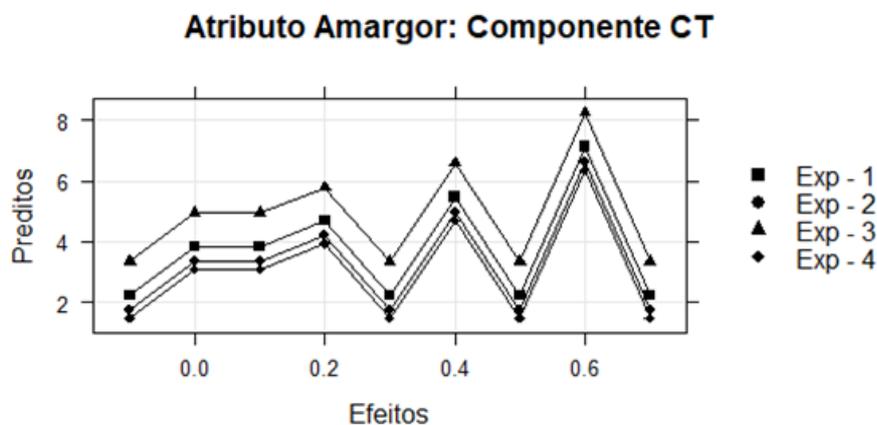


Figura 5.8 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo amargor dos blends processado via seca para o componente CT (Café torrado)



Referente ao atributo sensorial Sabor, as curvas plotadas nas Figuras 5.9 e 5.10 evidenciaram que os experimentos com diferentes cafés especiais não foram discriminados já que os resultados indicaram que os experimentos com os genótipos Acaia e Bourbon apresentaram respostas similares. Nesse contexto, pequenas diferenças, observadas na discriminação desses grupos, são concordantes com os resultados de Ossani et al. (2017), na realização de uma análise da qualidade de cafés especiais puros, em que os autores mencionam que a similaridade entre Acaias e/ou Bourbons, supostamente, poderá ser explicada pela composição química dos grãos de café, podendo ser influenciada por fatores genéticos e ambientais e condições de manejo pré e pós colheita. Além disso, para a detecção dessa similaridade, foram contempladas as diferentes altitudes e concentrações.

Figura 5.9 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via seca para o componente CC (Conilon)

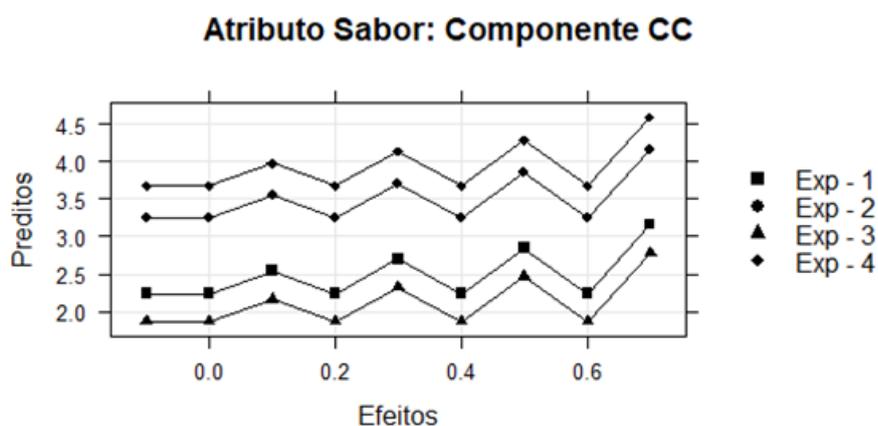
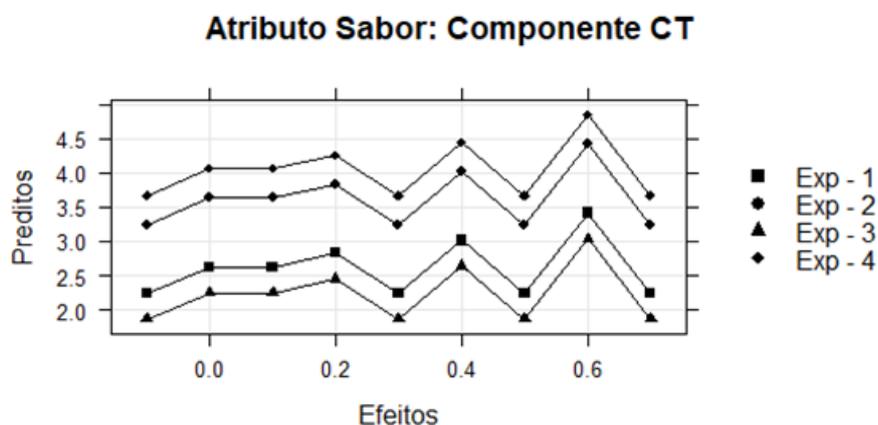


Figura 5.10 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo sabor dos blends processado via seca para o componente CT (Café torrado)



No que diz respeito à nota sensorial, os resultados referentes ao componente CC (Conilon), ilustrados na Figura 5.11, evidenciaram um comportamento de similaridade entre os experimentos (2) e (4). Esse fato confirma as mesmas características observadas em relação ao componente CT (Café Torrado), portanto, há evidências de que a nota, representando a impressão global, foi influenciada pelo efeito do atributo amargor, visto que os cafés especiais não foram discriminados para esse atributo.

Figura 5.11 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends processado via seca para o componente CC (Conilon)

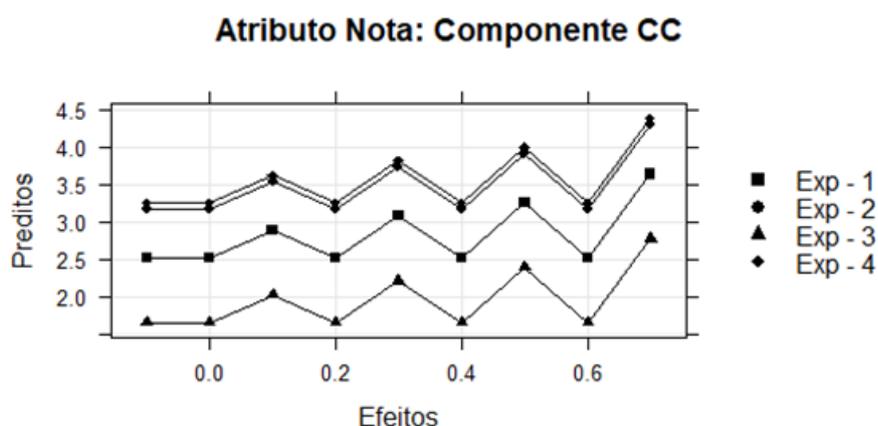
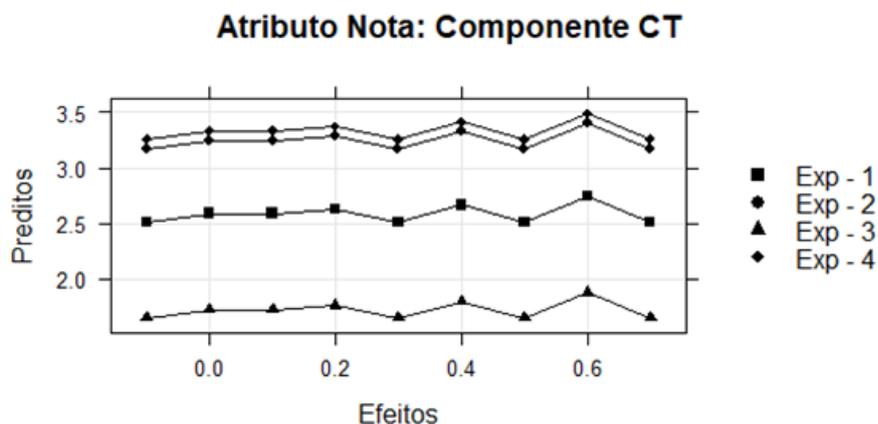


Figura 5.12 – Trace plot em função dos experimentos para o atributo nota dos blends processado via seca para o componente CT (Café torrado)



Outro resultado, cabível de ser ressaltado, é dado na comparação dos atributos, avaliados neste trabalho, em relação ao componente CT (Café Torrado), por os experimentos apresentarem comportamentos diferenciados, com a mesma característica de similaridade entre os experimentos observados em relação ao componente CT (Conilon) (Figura 5.11).

Nessa ótica, supostamente, esses resultados podem ser explicados por Monteiro et al. (2010), os quais afirmam que o tipo de torra (clara, média ou escura) interfere muito na intensidade de características sensoriais da bebida como sabor e nota final, impressão global, bem como sua aceitação pelo consumidor.

Conforme assinalado, há efeitos antagônicos observados em relação às respostas advindas do modelo que contemplou efeitos aleatórios aos experimentos. Nessa perspectiva, há relatos na literatura, discutidos por Moura et al. (2007), sobre um modelo linear com efeitos fixos, de que a influência do tempo e temperatura de torração sobre as características sensoriais do café arábica puro, de que o aumento linear do tempo e temperatura causam efeitos significativos e negativos no sabor e efeitos significativos para o amargor.

Mediante a essa afirmação, deve-se tomar cautela, para estender essa conclusão aos blends de cafés formados por esses componentes, já que, neste trabalho, diferentes tempos e temperaturas não foram contemplados na modelagem estatística.

Considerações:

Nos anexos A e B, o comportamento dos experimentos, quanto aos cafés especiais Acaia (CEA) e Bourbon (CEB) e em relação aos atributos: Sabor, Amargor e Nota são apresentados. Ressalta-se que, na sua interpretação, os efeitos cuja "trajetória" é constante, indicam que o experimento foi caracterizado pela ausência do café, especial, portanto, torna-se justificado o efeito constante em relação a cada atributo.

6 CONCLUSÃO

A implementação de um modelo misto que contemplou os efeitos aleatórios dos experimentos, permitiu discriminar experimentos, nos quais, os blends foram formados por cafés especiais da mesma procedência (altitude), genótipo e concentração, para os atributos Sabor, cujos cafés especiais foram processados via seca e úmida. Algumas similaridades dos experimentos foram observadas em relação a concentração (m/v) utilizadas na composição dos blends.

Em síntese, o tipo de processamento não apresentou diferença expressivas na identificação da similaridade entre os experimentos.

Os resultados obtidos, em geral, evidenciaram que a preferência dos blends incluindo os diferentes cafés especiais, repercutiu em respostas não correlacionadas para os componentes CC (Canephora) e CT (Café Torrado).

REFERÊNCIAS

- BORÉM, F.M. et al. Qualidade do café natural e despulpado após secagem em terreiro e com altas tempestades. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v.32, n.5, p.1609–1615, set./out. 2008.
- CARVALHO, V.D. **Cafeicultura Empresarial: produtividade e qualidade**. 1998. 73 p. Monografia (Especialização "LatoSensu") - Universidade Federal de Lavras, Lavras, 1998.
- CIRILLO, M.A. **Otimização na Experimentação: Aplicações as Engenharias e Ciências Agrárias**. Lavras: Ed. UFLA, 2015. 226 p.
- CORNELL, J.A. **Experiments with Mixtures: Designs, Models, and the Analysis of Mixture Data**. New York: John Wiley & Sons, 2002. 680 p.
- DEMIDENKO, E. **Mixed Models: Theory and Applications with R**. New York: John Wiley & Sons, 2013. 754 p.
- DRAPER, N.R.; PUKELSHEIM, F. Mixture models based on homogeneous polynomials. **Journal Statistics Planning and Inference**, Elmsford, v.71, p.303-331, 1998.
- FERNANDES, S.M et al. Constituintes químicos e teor de extrato aquoso de cafés arábica (*Coffea arabica* L.) e conillon (*Coffea canephora* Pierre) torrados. **Ciência e Agrotecnologia**, Lavras, v.27, n.5, p.1076-1081, out. 2003.
- FERRÃO, R.G et al. **Café Conilon**. Vitória: INCAPER, 2007. 702 p.
- FERREIRA, H.A et al. Selecting a probabilistic model applied to the sensory analysis Of specialty coffees performed with consumer. **IEEE Latin America Transactions**, Amsterdam, v.14, n.3, p.1507-1512, 2016.
- FRANCA, A.S.; MENDONÇA, J.C.F.; OLIVEIRA, S.D. Composition of green and roasted coffees of different cup qualities. **LWT-Food Science and Technology**, London, v.38, n.7, p.709-715, Nov. 2005.
- HILDRETH, C.; HOUCK, J.P. Some estimators for a linear model with random coefficients. **Journal of the American Statistical Association**, Washington, v.63, n.322, p.584-595, June 1968.

IVOGLIO, M.G et al. Divergência genética entre progênies de café robusta. **Bragantia**, Campinas, v.67, n.4, p. 823 - 831, out./dez. 2008.

JIANG, J. **Linear and Generalized Linear Mixed Models and their Applications**. Amsterdam: Springer Science & Business Media, 2007. 257 p.

KALIRAJAN, K.P. On the estimation of a regression model with fixed and random coefficients. **Journal of Applied Statistics**, Sheffield, v.17, n.2, p.237-244, 1990.

LISKA, R.G et al. Evaluation of sensory panels of consumers of specialty coffee beverages using the boosting method in discriminant analysis. **Semina: Ciências Agrárias**, v.36, n.6, Dec. 2015.

MENDES, L. C. **Estudos para determinação das melhores formulações de blends de café arábica (C. arábica) com café robusta (C. canephora Conilon) para uso no setor de cafés torrados e moídos espresso**. 2005. 186p. Tese (Doutorado em Tecnologia de Alimentos) - Faculdade de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

MENDES, L. C. **Otimização do processo de torrefação do café robusta (*Coffea canephora Conillon*) para formulação de Blends com café Arábica (*Coffea arabica*)**. 1999. 111p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1999.

MONTEIRO, M. A. M.; MINIM, V. P. R.; DA SILVA, A. F. CHAVES, J.B P. Influência da torra sobre a aceitação da bebida café. **Revista Ceres**, Viçosa, v.57, n.2, p. 45-150, mar./abr. 2010.

MOURA, S. C. S. R. et al. Influência dos parâmetros de torração nas características físicas, químicas e sensoriais do café Arábica puro. **Brazilian Journal of Food Technology**, Campinas, v.10, n.1, p.17-25, 2007, jan./mar. 2007.

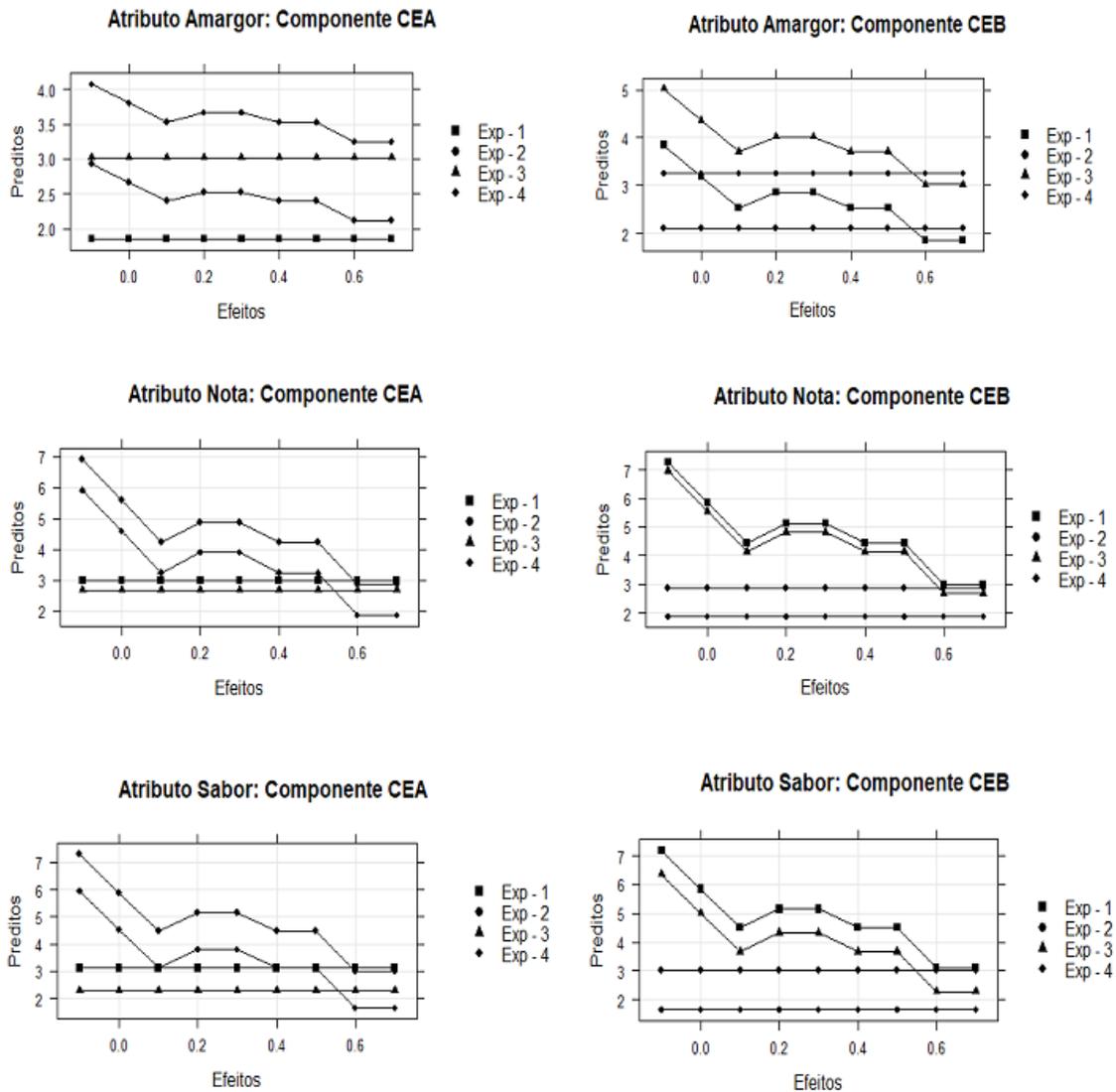
NEPOMUCENA, T.M.; SILVA, A.M.; CIRILLO, M.A. Modelos ridge em planejamento de misturas: uma aplicação na extração da polpa de pequi. **Química Nova**, São Paulo, v.36, n.1, p.159-164, 2013.

- NIJSSEN, L.M et al. **Compostos voláteis em alimentos: dados qualitativos e quantitativos.** Zeist: Instituto Central de Nutrição e Pesquisa de Alimentos, 1996.
- OSSANI, P.C et al. Qualidade de cafés especiais: uma avaliação sensorial feita com consumidores utilizando a técnica MFACT. **Revista Ciência Agronômica**, Fortaleza, v.48, n.1, p.92-100, ja./mar. 2017.
- PRESCOTT, P. Modelling in mixture experiments including interactions with process variables. **Quality Technology & Quantitative Management**, Taiwan, v.1, n.1, p.87-103, 2004.
- R CORE TEAM. **R: A Language and Environment for Statistical Computing.** R Foundation for Statistical Computing. Vienna: R Core Team, 2017. 2673 p.
- RAMOS, M.F et al. Discrimination of the sensory quality of the *Coffea arabica* L.(cv. Yellow Bourbon) produced in different altitudes using decision trees obtained by the CHAID method. **Journal of the Science of Food and Agriculture**, London, v.96, n.10, p.3543-3551, Aug. 2016.
- RIBEIRO, B.B.; MENDONÇA, L.M.V.L.; ASSIS, G.A.; MENDONÇA, J.M.A.; MALTA, M.R.; MONTANARI, F.F. Aceitação química e sensorial de blends de *Coffea canephora* Pierre e *Coffea Arábica* L. **Coffea Science**, Lavras, v.9, n.2, p.178-186, abr./jun. 2014.
- SCHEFFÉ, H.J. Simplex-centroid design for experiments with mixtures. **Journal of the Royal Statistics Society B**, London, v.20, p.344-360, 1958.
- SCHEFFÉ, H.J. The simplex-centroid design for experiments with mixtures. **Journal of the Royal Statistical Society. Series B**, London, v.25, n.2, p.235-263, 1963.
- SWAMY, P.A.V.B. Efficient inference in a random coefficient regression model. **Econometrica: Journal of the Econometric Society**, Chicago, v.38, n.2, p.311-323, Mar. 1970.
- SWAMY, P.A.V.B. **Statistical Inference in Random Coefficient Regression Models.** Amsterdam: Springer Science & Business Media, 1971. 209 p.
- VILLAFRANCA, R.R. **Diseño de experimentos para la optimización de mezclas.** Castellon: ATC, 1999.

VILLELA, T.C. **Qualidade do café cereja despulpado, desmucilado, descascado e natural, durante o processo de secagem.** 2002. 69 p. Dissertação (Mestrado em Ciência dos Alimentos)-Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2002.

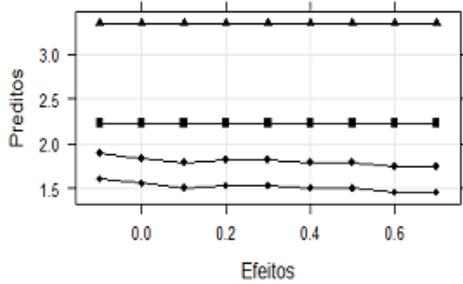
WALD, A. A note on regression analysis. **The Annals of Mathematical Statistics**, Ithaca, v.18, n.4, p.586-589, Dec. 1947.

ANEXO A – Perfis dos experimentos em relação aos blends com cafés especiais processados via úmida para os componentes CEB (Café especial Bourbon) e CEA (Café especial Acaiá)

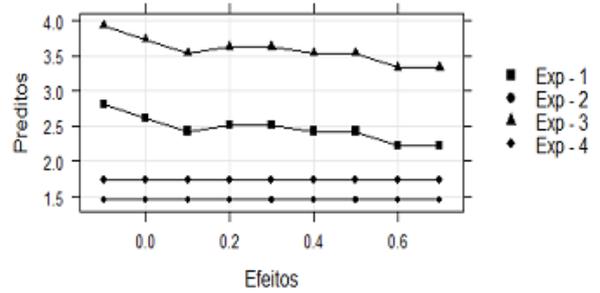


ANEXO B – Perfis dos experimentos em relação aos blends com cafés especiais processados via seca para os componentes CEB (Café especial Bourbon) e CEA (Café especial Acaiá)

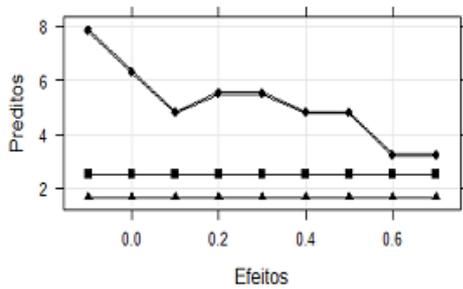
Atributo Amargor: Componente CEA



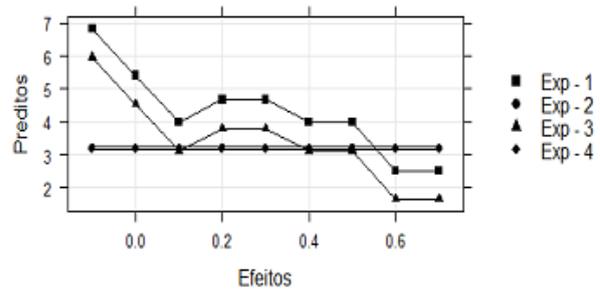
Atributo Amargor: Componente CEB



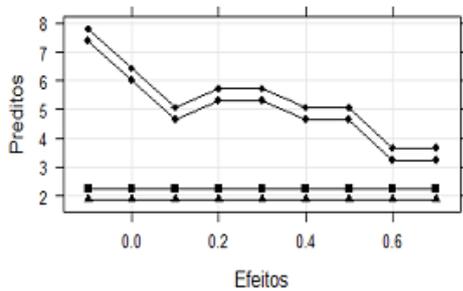
Atributo Nota: Componente CEA



Atributo Nota: Componente CEB



Atributo Sabor: Componente CEA



Atributo Sabor: Componente CEB

