

NOTA IMPORTANTE:

La entidad sólo puede hacer uso de esta norma para si misma, por lo que este documento NO puede ser reproducido, ni almacenado, ni transmitido, en forma electrónica, fotocopia, grabación o cualquier otra tecnología, fuera de su propio marco.

ININ/ Oficina Nacional de Normalización

NORMA CUBANA

NC

ISO 13301: 2007
(Publicada por la ISO en 2002)

**ANÁLISIS SENSORIAL—METODOLOGÍA—GUÍA GENERAL
PARA MEDICIÓN DE LAS UMBRALES DE DETECCIÓN DE
OLOR, SABOR Y GUSTO POR UN PROCEDIMIENTO DE
SELECCIÓN FORZADA ENTRE TRES ALTERNATIVAS
(3-AFC).
(ISO 13301:2002, IDT)**

**Sensory analysis—Methodology—General guidance for measuring odour, flavour
and taste detection thresholds by a three-alternative forced-choice (3-AFC)
procedure**

ICS: 67.240

1. Edición Diciembre 2007
REPRODUCCIÓN PROHIBIDA

Oficina Nacional de Normalización (NC) Calle E No. 261 Vedado, Ciudad de La Habana. Cuba. Teléfono: 830-0835 Fax: (537) 836-8048; Correo electrónico: nc@ncnorma.cu; Sitio Web: www.nc.cubaindustria.cu



Cuban National Bureau of Standards

Prefacio

La Oficina Nacional de Normalización (NC), es el Organismo Nacional de Normalización de la República de Cuba y representa al país ante las organizaciones internacionales y regionales de normalización.

La elaboración de las Normas Cubanas y otros documentos normativos relacionados se realiza generalmente a través de los Comités Técnicos de Normalización. Su aprobación es competencia de la Oficina Nacional de Normalización y se basa en las evidencias del consenso.

Esta Norma Cubana:

- Ha sido elaborada por el NC/CTN 47 Análisis sensorial en el que están representadas las siguientes entidades:
 - Instituto de Investigaciones para la Industria Alimenticia (IIIA) – MINAL
 - Centro Nacional de Inspección de la Calidad (CNICA) – MINAL
 - Unión Láctea – MINAL
 - Unión de vegetales – MINAL
 - Unión cárnica – MINAL
 - Unión confitera – MINAL
 - Unión Molinera – MINAL
 - Asociación cervecera (ACER)– MINAL
 - Unión de bebidas y refrescos - MINAL
 - Instituto de Farmacia y Alimentos (IFAL) – Universidad de la Habana
 - Centro de Investigaciones pesqueras (CIP) – MIP
 - Laboratorio Cuba Control S.A
 - Gerencia Santa Cruz. Cuba Ron S.A
 - Formatur (Mintur)
 - Instituto Medicina veterinaria – MINAGR
 - Instituto Nacional de Higiene de los Alimentos INHA- MINSAP
 - Oficina Territorial de Normalización (OTN)
 - Instituto de Investigaciones de Normalización (ININ)
 - Oficina Nacional de Normalización ONN
- Es una adopción idéntica por el método de traducción de la Norma Internacional ISO 13301:2002 .Metodología-Guía general para medición de los umbrales de detección de olor, sabor y gusto por un procedimiento de selección forzada entre tres alternativas (3-AFC).

© NC, 2007

Todos los derechos reservados. A menos que se especifique, ninguna parte de esta publicación podrá ser reproducida o utilizada en alguna forma o por medios electrónicos o mecánicos, incluyendo las fotocopias, fotografías y microfilmes, sin el permiso escrito previo de:

Oficina Nacional de Normalización (NC)

Calle E No. 261, Vedado, Ciudad de La Habana, Habana 4, Cuba.

Impreso en Cuba.

Índice

INTRODUCCIÓN	5
1. ALCANCE	7
2. REFERENCIAS NORMATIVAS	8
3. TÉRMINOS Y DEFINICIONES	8
4. PRINCIPIOS	9
4.1 Procedimientos experimentales	9
4.2 Procesamiento de los datos	10
5. PROCEDIMIENTOS EXPERIMENTALES	10
5.1 Preparación de las muestras	10
5.2 Selección de las concentraciones del estímulo	11
5.3 Presentación de las muestras	12
5.4 Entrenamiento de los catadores	12
5.5 Selección de catadores	13
5.6 Diseño del experimento	14
6.1 Modelos matemáticos y estadísticos	17
6.2 Inspección preliminar de los datos	17
6.3 Procedimiento de máxima verosimilitud para ajustar los datos a un modelo logístico y estimar los límites del error	18
6.4 Interpretación de los resultados	19
6.5 Otras p_d que no sean 0,5	20
6.6 Estimación del mejor estimado del umbral (BET)	20
6.7 Presentación de los resultados	21
ANEXO A	23

NC-ISO 13301: 2007

© NC

ANEXO B

24

BIBLIOGRAFÍA

38

0 Introducción

El concepto de “umbral” tiene un amplio uso en el análisis sensorial y es a menudo usado en la literatura sobre estudios sensoriales de alimentos y bebidas. Los datos de los umbrales sensoriales a estímulos químicos se usan en estudios sensoriales en dos formas principales: como medida de la sensibilidad de un catador o grupo de catadores a un estímulo específico, y como medida de la propiedad de una sustancia química para evocar una respuesta sensorial en los catadores. En la primera, el valor del umbral se toma como una descripción de la ejecución de un catador; en la última, como una medida de una propiedad de la sustancia.

El término “umbral” lo introdujeron los psicofísicos del siglo 19 usándolo para denotar una concentración de estímulo tal, que por encima puede ser detectado y por debajo no (ver Figura 1a).

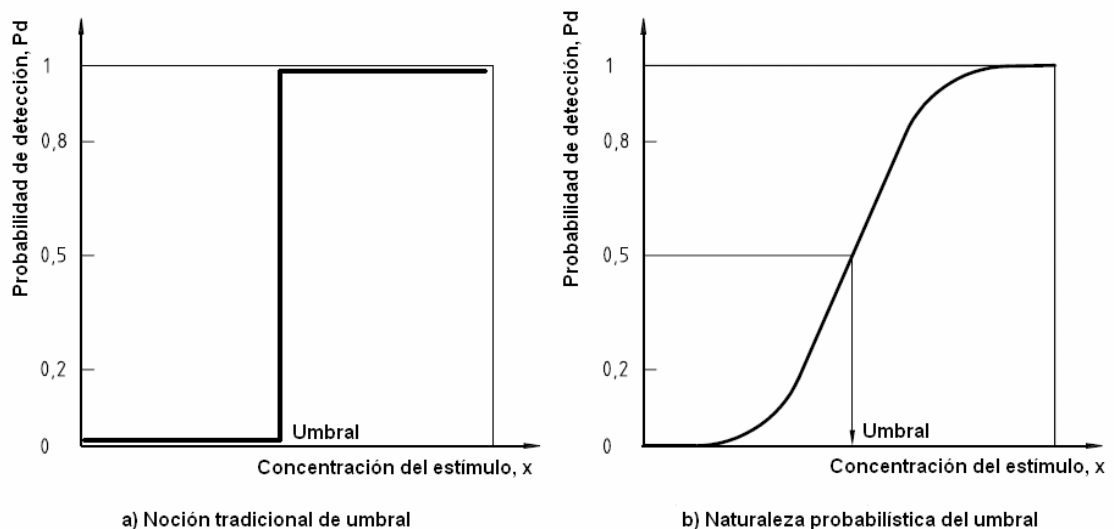


Figura 1. Noción tradicional y probabilística de la naturaleza del umbral

Sin embargo, en la práctica el gráfico de la probabilidad de detección¹ contra la intensidad del estímulo es siempre un arco (ver Figura 1b), y a partir de esto es conveniente asumir, para fines de cálculo, que el umbral fluctúa por lo que una concentración particular de un estímulo lo excede en algunas ocasiones pero no en otras. El umbral puede entonces obtenerse como estimado de la mediana de estos valores momentáneos, es decir, como la concentración del estímulo para la cual la probabilidad de detección es 0,5. El umbral definido de esta forma tiene analogías con los niveles medios del efecto usados en ramas de la biología, como farmacología y toxicología relacionadas con los efectos de químicos u organismos.

¹ Esta norma internacional está basada en el uso del método 3-AFC de presentación del estímulo, y la probabilidad de detección, p_d , está modelada como $p_d = 1,5x p_c - 0,5$, donde p_c es la probabilidad de una selección correcta. Esto es estrictamente un “modelo supuesto” de la conducta de los catadores. No es un modelo psicométrico del proceso de decisión del catador, tal como el modelo de detección de la señal, que también pudiera ser aplicado, ver Macmillan y Creelman [13].

Cuando el umbral de detección de una sustancia particular en aire o agua es medido en más de un laboratorio, los valores reportados abarcan a menudo dos o tres órdenes de magnitud o más (Devos et al (6), Fazzalari (10), van Gemert et al (14)). Este rango es mayor que el que puede esperarse de un error experimental único o de diferencias en el procesamiento de los datos, pero esto probablemente responda a las diferencias en el concepto de umbral entre los laboratorios y a las diferencias en el procedimiento experimental. Devos et al (6) sugiere un procedimiento para la estandarización de umbrales de detección en aire.

Los usuarios necesitan conocer que la determinación de los umbrales de detección requieren más esfuerzo experimental que lo que se dijo al inicio. Los resultados experimentales demuestran que en pruebas repetidas los umbrales individuales observados tienden a decrecer y la diferencia entre individuos tiende a decrecer de la misma forma. Las pruebas de umbral son a menudo una actividad no familiar y los catadores mejoraran su sensibilidad según se acostumbren a la sustancia y al mecanismo de prueba. El procedimiento 3-AFC requiere que el catador pueda reconocer el estímulo. Los programas de entrenamiento requieren esfuerzo, pero producirán información necesaria acerca del rango de detección parcial de cada catador. Los resultados mejoran cuando el experimentador logra presentar las concentraciones adaptadas al rango de cada catador, ver 6.3.

ANÁLISIS SENSORIAL—METODOLOGÍA—GUÍA GENERAL PARA MEDICIÓN DE LAS UMBRALES DE DETECCIÓN DE OLOR, SABOR Y GUSTO POR UN PROCEDIMIENTO DE SELECCIÓN FORZADA ENTRE TRES ALTERNATIVAS (3-AFC)

1. Alcance

Esta norma brinda una guía para:

- la obtención de datos sobre la detección de un estímulo químico que evoca respuestas de olor, sabor y gusto por un procedimiento 3-AFC (selección forzada entre 3 alternativas), y
- el procesamiento de los datos para estimar el valor del umbral y sus límites de error y otros estadísticos relacionados con la detección de los estímulos.

Típicamente el procedimiento será usado en uno de los dos modos siguientes:

- la investigación de la sensibilidad de los catadores a un estímulo específico; o
- la investigación de la habilidad de una sustancia química para estimular los sentidos quimiorreceptores.

(aunque los experimentos pueden comprender los dos modos).

Como ejemplos del primer modo podemos incluir estudios de diferencias entre la sensibilidad de individuos o entre poblaciones específicas de individuos y el efecto de la edad, género, condición fisiológica, enfermedad, administración de drogas y condiciones ambientales sobre la sensibilidad. Como ejemplos del segundo modo podemos incluir:

- los estudios en la química del sabor y el impacto de sustancias químicas específicas sobre el sabor de los alimentos,
- clasificación de sustancias químicas por su impacto en el ser humano si está presente en el medio,
- estudios sobre la relación entre la estructura molecular y la capacidad de una sustancia química para actuar como un estimulante,
- el aseguramiento de la calidad de efluentes gaseosos y del agua, alimentos y bebidas y
- los estudios sobre el mecanismo del olfato.

En ambos modos la forma en la cual la probabilidad de una respuesta correcta cambia con la intensidad de un estímulo, es decir, la pendiente de la curva dosis/respuesta, puede ser un aspecto importante de estudio tanto como el valor umbral, y los procedimientos de procesamiento de datos descritos aquí brindan esa información.

Esta norma está enfocada al requerimiento de los datos y los procedimientos computacionales. En cuanto a la validez de los datos el texto se restringe a reglas y precauciones generales. Esta no diferenciará entre umbral de detección y de diferencia; fundamentalmente, los procedimientos miden un umbral de diferencia puesto que la muestra de prueba es comparada con una muestra de referencia. Usualmente la muestra de referencia no contiene el estímulo bajo investigación, pero no se excluye un diseño experimental en el cual la referencia pueda contener el estímulo, o

puede no conocerse si la referencia contiene el estímulo. Las guías sugeridas en esta norma miden un umbral de reconocimiento como está definido en la norma ISO 5492. No se aborda la estandarización de métodos para la determinación de la calidad del aire como la norma europea en preparación (9).

2. Referencias Normativas

Los siguientes documentos normativos contienen disposiciones las cuales, a través de referencias en el texto, constituyen disposiciones de esta Norma Internacional. Para las referencias fechadas no se aplican enmiendas o revisiones posteriores de cualquiera de estas normas. Sin embargo, parte de los convenios basados en esta norma internacional son animar a investigar la posibilidad de aplicación de las ediciones más recientes de los documentos normativos que se citan a continuación. Para las referencias no fechadas, aplicar la última edición del documento normativo referido. Los miembros de ISO e IEC mantienen registros de las normas internacionales actualmente válidas.

NC-ISO 5992: 1992, Análisis sensorial - Vocabulario

NC-ISO 6658: 1985, Análisis sensorial – Metodología – Guía general

NC-ISO 8586-1: 1993, Análisis sensorial – Guía general para la selección, entrenamiento y seguimiento de los jueces – Parte 1: Selección de catadores

NC-ISO 8586-2: 1994, Análisis sensorial – Guía general para la selección, entrenamiento y seguimiento de los jueces – Parte 2: Expertos

ISO 8589: 1989, Sensory analysis - General guidance for the design of test rooms

3. Términos y definiciones

Para los propósitos de esta norma se aplican los términos y definiciones de la ISO 5492 y los siguientes:

3.1

estímulo

sustancia que puede o no causar una sensación, detectable por uno o más de los sentidos, dependiendo de la cantidad presente

3.2

medio

cualquier material usado para disolver, diluir, dispersar o sorber un estímulo cuyo umbral está siendo medido

3.3

muestra de referencia

porción del medio que al que no se adiciona el estímulo

3.4

muestra de prueba

porción del medio al cual se le adiciona el estímulo en una concentración conocida

3.5 prueba de selección forzada entre 3 alternativas (3 – AFC)

prueba discriminatoria en la cual al catador se le presentan 3 muestras, una de las cuales es la muestra de prueba que contiene un estímulo nominado familiar al catador y las otras 2 son referencias y en la cual el catador debe indicar cual es la muestra de prueba

3.6**presentación**

conjunto de tres muestras formando una prueba 3 – AFC

3.7**modelo de umbral**

modelo de detección sensorial donde el estímulo presentado en un experimento particular es detectado (resultando en una respuesta correcta) o no detectado (resultando en una respuesta dada al azar)

3.8**modelo de detección de la señal**

modelo de detección sensorial donde el estímulo presentado en un experimento particular brinda algún nivel de evidencia de su presencia

Nota: La evidencia contribuye a la decisión de un catador sobre la presencia o ausencia del estímulo.

3.9**umbral de detección**

la menor intensidad de un estímulo sensorial que tiene una probabilidad de detección de 0.5 bajo las condiciones de prueba, calculada a partir del modelo de umbral

3.10**umbral individual**

umbral de detección de un catador único

3.11**umbral promedio**

promedio (cuyo tipo puede ser especificado, por ejemplo, la media aritmética, la media geométrica o la mediana) de umbrales individuales

3.12**umbral de grupo a partir de datos agrupados**

estimado obtenido usando la suma de los resultados de un grupo particular de catadores, en cada concentración del estímulo como entrada, cuando se ajusta el modelo estadístico.

4. Principios**4.1 Procedimientos experimentales**

El estímulo es presentado en el medio a una concentración específica y se le da a los catadores junto con un par de muestras de referencia. Al juez se le pide seleccionar la muestra que contiene el estímulo o que tiene una mayor concentración de este. El catador está obligado a hacer una selección. Es un requerimiento de la prueba 3 – AFC que el catador sea capaz de reconocer el estímulo.

Generalmente el estímulo es disuelto en aire o agua. Es poco probable que se use otro medio gaseoso diferente al aire en pruebas con catadores humanos, pero pueden ser usados otros solventes diferentes al agua como medios líquidos o sólidos tales como soluciones en agua u otros solventes o sólidos, por ejemplo, alimentos, para diluir el estímulo como dicta el experimento. Es esencial que el medio sea homogéneo de modo que las muestras de referencia sean idénticas y las mismas en todas las presentaciones.

El estímulo es presentado a varias concentraciones. Las concentraciones son replicadas un número de veces suficientes para lograr la precisión deseada del umbral y los parámetros del modelo matemático. La naturaleza de las réplicas dentro de los catadores, entre catadores y combinaciones de los dos está establecida por el diseño experimental del estudio.

4.2 Procesamiento de los datos

La respuesta a una evaluación es un resultado binario – la muestra seleccionada por el catador será la muestra de prueba (selección correcta) o una de las de referencia (selección incorrecta). En cada presentación de cada concentración del estímulo se suma el número de selecciones correctas y forma, junto con el número total de presentaciones y la concentración del estímulo, los datos a ser procesados para obtener los estadísticos derivados. El modelo estadístico se basa en que el número de selecciones correctas a una concentración particular proviene de una distribución binomial.

Para la prueba 3 – AFC, el umbral es la concentración del estímulo en la cual la proporción de respuestas correctas es 2/3, es decir, 50% por encima de la selección correcta por azar. Los datos, como proporciones de selecciones correctas, pueden simplemente ser registrados e interpolados para derivar este punto, pero un estimado más exacto del umbral y sus límites, puede obtenerse si se ajusta el modelo matemático a los datos. En esta guía se usa el modelo logístico y es ajustado por el procedimiento de máxima verosimilitud, o alternativamente, por el procedimiento de mínimos cuadrados. El ajuste estima los dos parámetros del modelo, uno el parámetro de locación, el otro el parámetro de la forma. El primero coloca la curva ajustada sobre el continuo del estímulo, el segundo determina la pendiente de la curva. La curva ajustada permite otros estimados de las proporciones de detección diferentes al 50 %.

El modelo más simple a ajustar es aquel en el cual la distribución de la proporción de selecciones correctas provenga de una distribución única, aproximadamente normal. Este puede ser el caso típico donde los datos provienen de réplicas dentro de cada catador individual. Puede ajustarse adecuadamente entonces una función logística simple, esto es, una con un único par de valores para los parámetros de la curva. Esto no es poco común puesto que la sensibilidad a químicos no está normalmente distribuida, o incluso simétricamente distribuidas, entre jueces. Para algunos estímulos químicos las distribuciones son distintamente bimodales, pero desviaciones de una distribución normal son difíciles de demostrar a menos que las mediciones se hagan con una muestra grande de catadores, comúnmente más de 100. Una función logística simple no dará un ajuste adecuado para datos provenientes de una distribución que se desvíe significativamente de una distribución normal, pero el modelo matemático puede extenderse para acomodar estos casos.

5. Procedimientos experimentales

5.1 Preparación de las muestras

5.1.1 Precauciones generales

Vea NC/ISO 6658. Asegúrese de que el estímulo y el medio son estables durante todo el estudio y no son tóxicos ni alergénicos. Cerciérese de que ellos son representativos para los propósitos del estudio, por ejemplo, los gases de escape pueden variar con el proceso que los genera y las sustancias químicas pueden requerir purificación para eliminar sabores extraños o irritantes de la molécula a ser estudiada. Prepare una cantidad suficientemente grande y homogénea para el estímulo y el medio para asegurar que los catadores reciban presentaciones idénticas con excepción de la concentración del estímulo y su posición en el conjunto. Prepare las muestras de forma que cumplan con la NC/ISO 6658: 1985. Use recipientes que no absorban el químico de prueba o contribuyan a olores o gustos. Asegúrese de que la presencia o ausencia del estímulo no pueda ser detectada visualmente o por algún otro medio que no sean los sentidos químicos. Guarde la muestra lejos de la luz o el calor cuando no esté en uso.

5.1.2 Gases

Recoja y prepare los estímulos y el medio en vasijas tales como balones o botellas cubiertas con teflón - (PTFE). Si los estímulos son gases inodoros que contienen una impureza olorosa, llene la vasija y los tubos y válvulas asociadas varias veces con una muestra fresca para saturar las paredes. Por la misma razón, y para evitar cambios de volumen, mantenga una temperatura constante cercana a la que será usada cuando se presenten los gases a los catadores. Use tubos cubiertos – PTFE de superficie interior lisa y válvulas libres de puntos de cambios de presión inesperados.

5.1.3 Líquidos

Para estímulos que van a presentarse en un medio acuoso, asegúrese de que se obtenga una dilución completa y que se mantenga durante el experimento. Para sustancias parcialmente hidrófobas prepare la primera etapa de dilución en etanol o etilenglicol purificado con carbón activado para eliminar olores extraños. Note que el agua destilada y el alcohol absoluto a menudo contienen olores fuertes por ello, use productos alimenticios primarios y purifique con carbón activado si se requiere. Presente una sustancia totalmente hidrófoba en un solvente no acuoso tal como parafina líquida inodora o ftalato de dinonilo y evite recipientes plásticos tal que la sustancia pueda disolverse en el polímero. Cuando prepare la serie de diluciones tenga presente que la mayor dilución, o sea, la que tiene la mayor proporción del estímulo puede variar por absorción de las paredes de la vasija. Prepare cada dilución, siempre que sea posible, con microjeringas o equivalentes, directamente de la solución madre y evite preparar la dilución siguiente a partir de la muestra precedente.

5.1.4 Sólidos

El medio de interés es por lo regular un alimento como queso, pescado o carne. A menos que exista una técnica con que el sólido pueda ser disuelto y reconstituido, divida finamente o desmenúcelo antes de adicionar el estímulo en un solvente apropiado, mezcle bien y espere hasta que el químico se difunda dentro de la matriz antes de preparar las muestras para la presentación a los catadores. Codifique cada alícuota, por ejemplo, con números aleatorios de 3 dígitos.

5.2 Selección de las concentraciones del estímulo

Presente una serie de presentaciones 3-AFC de las cuales cada una difiera de la anterior aproximadamente por un factor X. Guíese por el tamaño aceptable del error del umbral estimado: por lo regular escoja $x \approx 3-5$ para estudios de aproximación y $x \approx 2$ para mayor precisión. Para cada catador, escoja un diseño de experimentación que pueda resultar en la definición del arco del modelo logístico en los puntos distribuidos alrededor de su rango de detección parcial. Los

puntos datos más efectivos son los correspondientes al 45% a 90% de selecciones correctas en la prueba, es decir $p_d = 0.18$ a 0.85 .

Para economizar muestras y tiempo de los catadores, comenzar localizando el rango de concentración de interés para cada catador usando un factor X grande. Observe que estas pruebas iniciales pueden servir también para demostrar los mecanismos de la prueba y para enseñar a los catadores como reconocer el estímulo cuando está por encima de su rango de detección parcial.

Proceda con el conjunto definitivo de presentaciones 3-AFC en concentraciones ajustadas a cada catador usando un factor X bajo. Si sobre la marcha se encuentra que los datos no están adecuadamente definidos en el arco del catador, administrar niveles de concentración adicionales hasta que se logre esa definición. Pida a los catadores regularmente que describan la naturaleza del estímulo detectado, de manera que los proteja de lapsos de memoria. La interrogación también puede cubrir una serie de respuestas correctas por azar y no por detección; por ejemplo, una vez cada 27 pruebas puede ocurrir una serie de 3 selecciones correctas por azar.

5.3 Presentación de las muestras

5.3.1 Preparación

Presentar las muestra a catadores sentados en cabinas (ver ISO 8589) y observar las buenas prácticas sensoriales como se describe en NC/ISO 6658. Codifique las muestras con números aleatorios de 3 dígitos o póngalas en una forma preordenada, por ejemplo, una al lado de la otra frente al catador de manera que la primera muestra esté a la izquierda y use una conducta idéntica en la hoja de cata o respuestas. Para evitar sesgos posicionales, balancear las 3 combinaciones de órdenes de presentación, AAB, ABA, BAA entre los catadores. Instruya al catador para evitar la fatiga sensorial mediante la ingestión de la cantidad mínima de cualquier muestra que tenga una concentración por encima del umbral y de dejando un tiempo suficiente para la recuperación del catador entre una muestra y otra.

5.3.2 Gases

Presente las muestras usando un olfatómetro tal como los descritos en [8] y [12].

5.3.3 Líquidos

Presente químicos no volátiles disueltos en agua purificada o en un solvente insípido Use recipientes que no absorban las sustancias químicas, por ejemplo, beakers de vidrio de 100 ml. llenos a un cuarto de su volumen. Presente los químicos volátiles en recipientes taponados con una boca conveniente para olfatear o beber a sorbos, o recipientes cerrados flexibles, por ejemplo, botellas estrechas de 250 ml. convenientes para liberar un volumen moderado de espacio de cabeza o líquido en los orificios nasales o en la boca, vea [4], [7] y [11]. Si el medio es una bebida, use el tipo de recipiente habitual para la evaluación sensorial de ese producto.

5.3.4 Sólidos

Si el medio es un alimento, presente las muestras en la forma usual en que se evalúa este producto.

5.4 Entrenamiento de los catadores

Para la mayoría de los propósitos, el umbral de interés es el de un observador informado, entrenado mediante la exposición repetida para detectar la sustancia en cuestión siempre y cuando su presencia sea perceptible. La familiarización con la sustancia es también un requerimiento de la prueba 3 - AFC. Un entrenamiento inadecuado puede extender artificialmente el rango de umbral hasta 1-2 órdenes de magnitud. Con un sobreentrenamiento puede ocurrir una extensión artificial, precisamente cuando los catadores comienzan a descubrir la muestra tratada por diferencias no solo de sabor. Si el umbral que se busca es el de un observador casual, por ejemplo, un agente de aviso de gas en la casa, pueden usarse catadores no entrenados y una distracción moderada (por ejemplo, ruido) y sustituir la prueba triangular o de comparación pareada por la prueba 3 – AFC.

Un programa de entrenamiento puede ser la presentación monádica de los estímulos en altas concentraciones, después en 2 o más concentraciones para que el catador las ordene y después una prueba 3 - AFC para localizar su rango de detección parcial. Observe que el umbral inicial decrece con la práctica y tiende a estabilizarse después de 3 a 5 pruebas y que los catadores individuales pueden diferir entre si en su sensibilidad básica a la sustancia en cuestión por un factor de 2 o 3 órdenes de magnitud, o más.

5.5 Selección de catadores

5.5.1 General

Para lograr los objetivos de la investigación, seleccione los catadores siguiendo las guías dadas en NC/ISO 8586-1 e NC/ISO 8586 – 2.

5.5.2 Umbral individual

La prueba puede hacerse, por ejemplo, para comparar el umbral de un individuo con un valor de la literatura, con un valor previamente determinado bajo circunstancias diferentes, o con su propio umbral para otras sustancias. La prueba puede hacerse para diagnosticar anosmia o hiperosmia, ageusia o hiperageusia.

5.5.3 Distribución de umbrales

El experimentador puede desear conocer la distribución de los umbrales dentro de una población. El grupo probado puede ser una muestra sacada de una población extensa, o pueden ser todos los miembros de una población seleccionada, por ejemplo, los miembros de un panel. La selección de la población está fuera del alcance de esta norma, pero el experimentador debe definir cuidadosamente la población o la muestra de la población bajo estudio. Para la presentación de los resultados ver 6.7.

5.5.4 Medición de los umbrales del estímulo.

El valor de umbral grupo o promedio para un estímulo es válido solo para el panel de jueces usados en los experimentos y el experimentador debe tener cuidado al extrapolar los resultados fuera de este panel. El experimentador debe seleccionar el panel según los objetivos y propósitos de las mediciones. Por ejemplo, un estudio de propiedades organolépticas de un conjunto de sustancias químicas puede llevarse a cabo usando un pequeño panel de jueces seleccionados, mientras que un estudio sobre las propiedades de un saborizante potencial puede requerir un panel grande representativo de una población particular.

El número de jueces y el número de presentaciones necesarias para lograr una precisión requerida de los estimados son asuntos que deben considerarse de conjunto. Cuando se usa un número

pequeño de jueces será necesario replicar las presentaciones de los jueces para generar datos suficientes, mientras que para un panel grande pudiera ser adecuada una única presentación en cada concentración o quizás solo algunas.

5.6 Diseño del experimento

5.6.1 Umbral individual

El rango de concentraciones mas efectivo para estimar los parámetros del modelo logístico es entre 45% y 90% de selecciones correctas. Dentro de este rango, quien determina principalmente la precisión de los estimados es el número total de presentaciones asumiendo que ellas están irregularmente balanceadas alrededor del umbral. La tabla 1 muestra los factores para los límites de error aproximados relativos al estimado del umbral, en unidades de la concentración original, vea también el anexo A.

Tabla 1. Guía para determinar el número de presentaciones requeridas para una precisión deseada de un estimado del umbral

Número total de presentaciones	40	60	80	100	120	160	200
Límites de error relativos al umbral	2,5	2,2	2,0	1,8	1,7	1,6	1,5

Los límites se obtienen respectivamente dividiendo y multiplicando el estimado del umbral por el factor en la tabla 1; por ejemplo, si el umbral obtenido con 80 presentaciones fue 2,4 ppm (2.4 ml/m³), los límites deben ser de 1,2 ppm a 4,8 ppm. La precisión se incrementa solo ligeramente hasta las 200 presentaciones y probablemente no mejore con un esfuerzo adicional. La estrategia secuencial es efectiva. Después de unas pocas presentaciones replicadas en cada concentración, ajustar el modelo logístico y calcular el umbral y sus límites de error. Lleve a cabo más réplicas en concentraciones dentro del rango más efectivo determinado a partir del modelo logístico ajustado y repita hasta obtener la precisión deseada.

5.6.2 Distribución de los umbrales

Replique las mediciones en 5.6.1 en los jueces seleccionados. Muestre los resultados en un histograma o en gráfico de frecuencias acumulativa. Reporte el umbral promedio como la media aritmética, geométrica o la mediana, o si la distribución parece ser bimodal o multimodal intente resolver el número de modas. Para el procesamiento de los datos vea la cláusula 6.

5.6.3 Medición del umbral de un estímulo para un grupo de jueces

5.6.3.1 General

En la selección del diseño experimental, observe que la variación en la sensibilidad entre catadores es probablemente varias veces mayor que dentro del mismo catador. Esto conlleva a la aplicabilidad práctica de que el valor central resultante para el grupo es probablemente mayor si las réplicas provienen de aumentar el número de catadores en la prueba, que si se incrementa el número de presentaciones por catador.

5.6.3.2 Umbral grupo de datos asociados

Es mejor ajustar solo un modelo logístico único a los datos agrupados, usando todos los datos en cada concertación dada como entradas del modelo, que ajustar modelos logísticos a los datos de cada juez de forma separada. Observe que este número mayor de datos obtenidos al agrupar los

datos individuales permiten obtener un mejor ajuste para obtener el umbral del grupo - asociado, el cual es el umbral de detección definido en 3.9. Vea la discusión en 6.5 y los ejemplos B.2 y B.4 en el anexo B. Use esta técnica cuando las diferencias entre individuos no son parte del diseño experimental, por ejemplo, en la clasificación de sustancias químicas de acuerdo a sus importancias como contaminantes o impurezas sensoriales.

5.6.3.3 Umbral promedio

Replique las mediciones en 5.6.1 en los catadores seleccionados. Disponga los resultados en un histograma como el que se muestra en la Figura 2, o en un gráfico de frecuencias acumulativas. Use esta técnica cuando las diferencias entre individuos forman parte del objetivo del estudio, por ejemplo, si se estudia el impacto de un componente de sabor o un contaminante o una impureza sensorial sobre una población particular.

En la Figura 2 los dos primeros histogramas muestran las mismas 443 personas. El último histograma es con solo 222 jueces, aunque la escala fue aumentada el doble para poder comparar. El paso de dilución "0" representa la solución saturada para cada sustancia olorosa y por tanto el mayor umbral (de Amoore [3]).

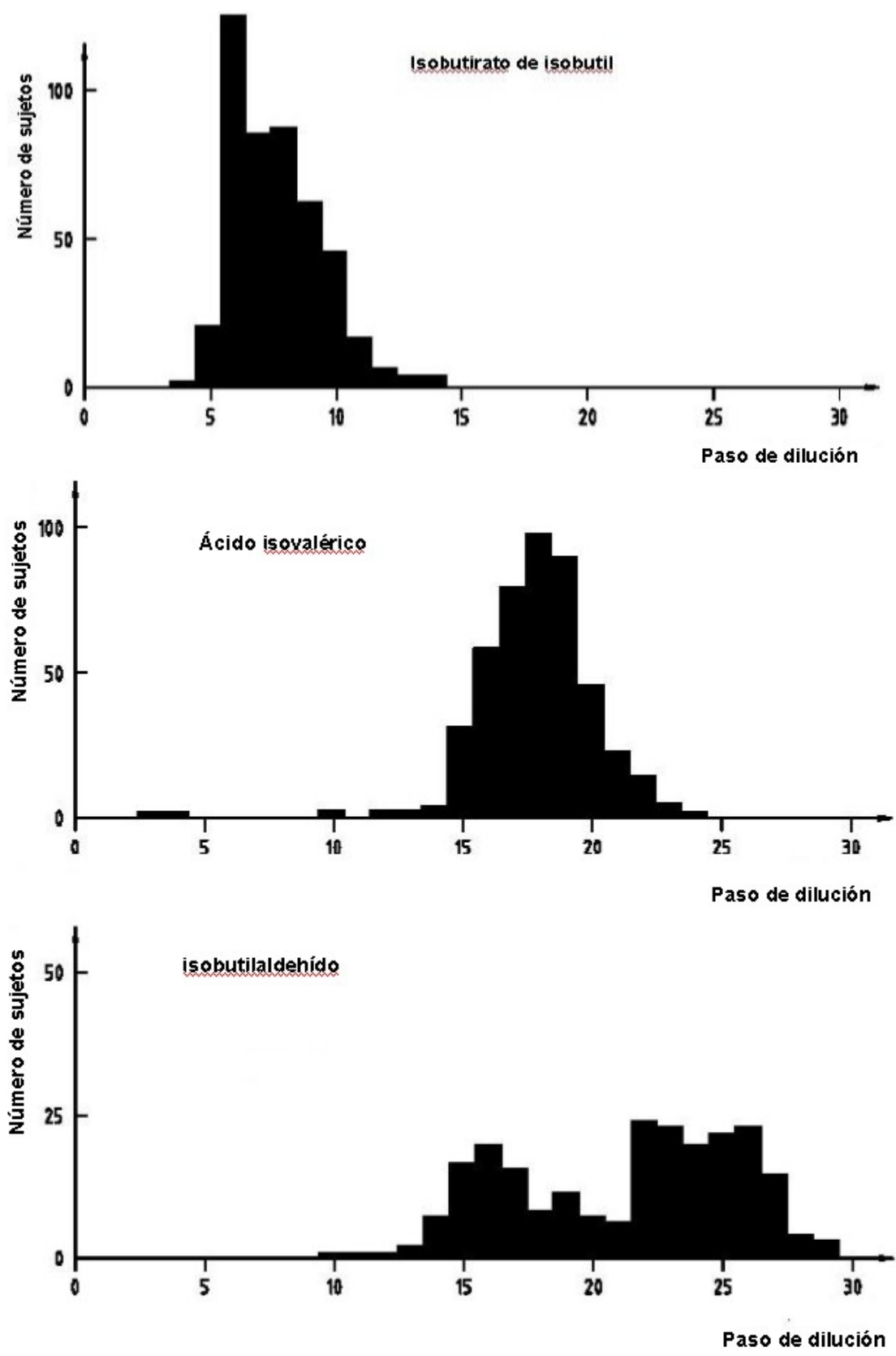


Figura 2. Distribuciones de los umbrales olfativos en la población

6. Procesamiento de datos

6.1 Modelos matemáticos y estadísticos

En una tarea 3-AFC, la probabilidad de que una respuesta seleccionada de forma aleatoria sea correcta es $1/3$, o aproximadamente 0.33 puesto que solo una de las 3 posibles selecciones es la correcta. De acuerdo al modelo umbral, la probabilidad de una respuesta correcta, p_c , está por lo tanto relacionada con la probabilidad de detección, p_d , mediante la ecuación (1)

$$p_c = p_d + \frac{1}{3}(1 - p_d) = \frac{2}{3}p_d + \frac{1}{3} \quad (1)$$

puesto que el estímulo es detectado y se da una respuesta correcta en una proporción, p_d , de experimentos mientras que en la proporción restante, $1 - p_d$, los catadores pueden no detectar el estímulo y adivinar por casualidad con una probabilidad de $1/3$. Como el umbral se define como la concentración del estímulo para la cual $p_d = 0,5$, de aquí sigue que es el valor para el cual $p_c = 0,67$.

La cantidad p_c es dato observado, mientras p_d es una inferencia a partir del modelo umbral. Aquí es de interés la ecuación inversa:

$$p_d = 1,5p_c - 0,5 \quad (2)$$

Cuando la proporción de selecciones correctas, p_c , en una serie de pruebas de diferencia repetidas varias veces en cada una de las distintas concentraciones del estímulo, es planteada contra las concentraciones, los puntos se aproximan a un arco. Si p_c se convierte a p_d por la ecuación (2), el gráfico de p_d forma otro arco (vea la Figura 1b) con asíntotas en 0 y 1 para concentraciones del estímulo suficientemente bajas y altas. En el caso de sensibilidad a sustancias químicas, la intensidad es usualmente expresada como el logaritmo de la concentración o dilución.

El arco que relaciona p_d a la concentración puede modelarse mediante la distribución normal acumulativa o, más convenientemente, por la distribución logística acumulativa, cuya ecuación puede escribirse:

$$p_c = \frac{\frac{2}{3}}{1 + e^{b(t-x)}} + \frac{1}{3} \quad (3)$$

donde x denota la concentración del estímulo y los coeficientes t y b dependen de los datos. Cuando $x = t$ $p_d = 0,5$ por lo que t es el valor umbral del estímulo. El parámetro b determina el tamaño del cambio en x requerido para producir un cambio particular en p_d y por tanto determina la pendiente del arco.

6.2 Inspección preliminar de los datos

6.2.1 Preparación

Haga una inspección preliminar de los datos, numéricamente o mediante el gráfico de la proporción de respuestas correctas p_c , contra el logaritmo de la concentración. Note si los resultados parecen conformar un arco y si las concentraciones probadas se ubican por encima y

por debajo del umbral estimado, como deben estar para que el estimado sea preciso. Obtenga más datos si este no fuera el caso. Estime el umbral visualmente y decida si este es suficientemente preciso para los propósitos que se requiere. Si este no fuera el caso, proceda a ajustar el modelo usando la transformación logito descrita en 6.2.2, o use el procedimiento de máxima verosimilitud descrito en 6.3 y detallados en los ejemplos B.2 a B.4.

6.2.2 Estimación preliminar del umbral y la pendiente usando la transformación logito

El logito es equivalente al familiar probito excepto que el último está basado en la distribución normal acumulativa. Transforme p_d a su forma logito mediante la fórmula y combine (4) con la ecuación (2) para expresar L_d en términos de p_c :

$$L_d = \log_e \left(\frac{p_d}{1-p_d} \right) \quad L_d = \log_e \left(\frac{p_c - \frac{1}{3}}{1-p_c} \right) \quad (4)$$

Sustituyendo (3) en (5) se obtiene la expresión:

$$L_d = b(t - x) \quad (5)$$

Observe que L_d aumenta linealmente con la intensidad del estímulo si p_c conforma bien un arco logístico. En este punto decida si completar los cálculos usando los datos transformados o no transformados. El gráfico no transformado de p_c versus $\log x$ es casi lineal en su rango medio y para el propósito de localizar el umbral, el cual es el punto donde $p_c = 2/3$, la transformación provee una pequeña ventaja sobre el arco ajustado visualmente o la línea recta ajustada numéricamente al rango medio de los datos de p_c .

Para la escala transformada, el umbral es el logaritmo de la concentración en la cual $L_d = 0$. Estime su valor a partir de ajustar una línea recta visualmente o ajustando una línea de regresión numéricamente. Note que los valores transformados cerca de las asíntotas pueden ser erráticos debido a que pequeños cambios en las proporciones tienen efectos grandes en estas regiones. Por lo tanto, ignore los valores de p_c por debajo de 0,43 o por encima de 0,9 (valores transformados de L_d por debajo de 1,75 o por encima de 1,75) cuando ajuste la línea a la nube de puntos a menos que el interés del investigador esté en esta región, vea 6.5. Note también que el gráfico transformado permite una interpretación directa de los parámetros de la ecuación (3) en la que t es la intensidad del estímulo (en log de la concentración) a la cual $L_d = 0$ mientras que b es la pendiente de la línea recta.

6.3 Procedimiento de máxima verosimilitud para ajustar los datos a un modelo logístico y estimar los límites del error

6.3.1 General

El principio del procedimiento de máxima verosimilitud para ajustar el modelo logístico es encontrar los valores de los parámetros t y b para los cuales los datos son más probables que cualquiera otros valores de los parámetros. El procedimiento puede llevarse a cabo y los límites de error estimados con la ayuda de programas de computación hechos con este propósito², o quizás es más conveniente, hacer uso del procedimiento de hoja de cálculo descrito en los ejemplos B.2 a

² GLIM [1] y SAS son ejemplos. Esta información se da para la conveniencia de los usuarios de esta norma internacional y no constituye un endoso de estos productos.

B.4 .El procedimiento de máxima verosimilitud encuentra, por ejemplo, el limite superior como un valor de t tal que exista una probabilidad de 0,05 de que el estimado sea mayor que él.

6.3.2 El parámetro b

Este determina la pendiente de la línea ajustada. Para un catador individual, esto indica la habilidad de discriminación para cambios en la intensidad del estímulo y está relacionado a índices como la razón Weber o el exponente en la ley de potencia de Stevens. Los individuos difieren en b como lo hacen con el umbral y es de interés tanto los valores de b como su distribución en la población. Alguien con un alto valor de b (una pendiente empinada) es sensible a pequeños cambios en intensidad y puede ser particularmente efectivo en tareas relacionadas con el control de calidad o el monitoreo. El conocimiento de los valores individuales de b puede ser tan importante como el del umbral cuando estamos seleccionando catadores.

6.3.3 Intervalos de confianza para los parámetros estimados

El intervalo de confianza para un estimado puede considerarse como el rango de valores dentro del cual es posible que pueda estar el valor real. Mientras mas estrecho es el intervalo, más confianza tenemos sobre el estimado. La exactitud del estimado puede mejorarse incrementando la cantidad de datos total y escogiendo concentraciones uniformemente espaciadas en un rango de $0,25x$ a $4x$ la concentración umbral.

6.4 Interpretación de los resultados

El umbral puede determinarse para una gran variedad de propósitos y este documento no provee una guía sobre el diseño experimental para propósitos particulares. Cuando interprete los resultados y compare los umbrales, tenga en cuenta como han sido recolectados y analizados los datos y el nivel de confianza a tener en los estadísticos derivados .

Los resultados más simples de interpretar son aquellos obtenidos por un único catador. El modelo logístico ajustado es la función psicofísica del catador y los estadísticos derivados pueden ser comparados entre catadores o entre sustancias dentro de un mismo catador.

Los datos de diferentes catadores o de diferentes sustancias pueden ser comparados mediante extensiones del modelo para una función logística única. Otros diseños pueden conllevar réplicas de las presentaciones sobre varios paneles que representan diferentes grupos poblacionales. Comparaciones entre paneles para una sustancia pueden acompañarse de técnicas de análisis de varianza estándares usando los estimados t y b de los catadores individuales como entradas, asumiendo que todos se obtuvieron de la misma forma, usando el mismo número de presentaciones. Si los datos han sido agrupados como en 5.6.3.2 los estimados agrupados resultantes de t y b pueden usarse para describir las diferencias entre sustancias o entre paneles.

Las distribuciones de los umbrales sobre los catadores pueden desviarse ampliamente de la normal. Comenzar con el examen de los resultados en un histograma (vea la Figura 2) o en un ploteo de probabilidad normal o logístico. Si es evidente kurtosis o bimodalidad, calcule el umbral promedio apropiado, por ejemplo, las medianas cuando hay kurtosis o los promedios múltiples cuando hay bi o multimodalidad.

Los umbrales individuales pueden estimarse a partir de diseños experimentales en los cuales cada catador hace al menos una prueba en cada intensidad, vea el ejemplo B.1. El experimentador puede entonces calcular tanto el umbral medio como el umbral de grupo a partir de datos agrupados, y examinar la distribución de los umbrales. Note que los umbrales individuales estimados por tal diseño serán muy imprecisos, mientras que un umbral de grupo puede tener mejor precisión. Por ejemplo, un diseño que incorpore dos experimentos para cada

uno de 50 catadores en 5 intensidades proveerá 500 datos para la estimación del umbral de grupo, pero solo 10 datos para estimar cada umbral individual.

El umbral de grupo a partir de datos agrupados y sus límites de error, pueden ser estimados a partir de datos derivados de un diseño en el cual cada catador evalué justamente una presentación a una concentración, pero más a menudo los diseños requerirán que los jueces hagan al menos una prueba en cada concentración. La población usualmente exhibe rangos amplios de umbrales individuales para una sustancia. Para un individuo, un rango de concentración de 100- veces alcanzara típicamente un rango de p_d desde 0,05 a 0,95 pero el umbral individual para un número de catadores puede a menudo alcanzar un rango de concentración de 10.000- veces. Un rango de concentraciones de 100- veces presentado a un grupo de catadores significará que para algunos catadores, quizás un número sustancial, el rango de prueba entero estará cerca de una de las asíntotas de la función psicofísica de cada individuo. Resultados cerca de las asíntotas tienen muy poca contribución a la estimación de t y b , puesto que en el caso de datos agrupados, individuos con alta o baja sensibilidad tendrán un peso bajo en la estimación de los parámetros. Si esto es indeseable no deben usarse datos agrupados, o los individuos de interés deben enfatizarse deliberadamente mediante una ponderación asimétrica.

El proceso de ajuste de los datos asume que la distribución de los umbrales conforma un modelo logístico, y cualquier desviación de esta distribución se mostrará como una falta de ajuste de los datos a la línea calculada. La falta de ajuste puede probarse usando los procedimientos estadísticos de bondad de ajuste, pero es poco probable que sean detectadas desviaciones del modelo logístico en otro diseño que no sea un diseño experimental que incorpore mas de 10 concentraciones sobre un rango de mas de 500- veces y un total de algunos cientos de presentaciones sobre este rango. Si la prueba de bondad de ajuste revela una falta de ajuste significativa deben ser considerados otros modelos que no sean la función logística única. Lo más simple será la adición de una segunda función logística con un valor diferente del parámetro t , y posiblemente para el parámetro b también, para una proporción de catadores. Este será un modelo adecuado para distribuciones bimodales y con kurtosis.

6.5 Otras p_d que no sean 0,5

Un regulador puede desear poner un límite para una sustancia fétida en aire que se puede ser detectada un 5% de ocasiones, o un desarrollador de sabores puede desear determinar la concentración de un sabor agregado a una comida que se puede ser detectado un 95% de las ocasiones en que el alimento es probado. Estos niveles del efecto pueden ser calculados a partir de la curva logística encontrando la intensidad del estímulo correspondiente a valores de L_d de -2.94 y 2.94 respectivamente, con el requerido valor de L_d encontrado a partir de las ecuaciones (4) y (5).

Si serán determinados valores altos o bajos, el investigador debe asegurar que haya una cantidad adecuada de datos en la región de interés para que las intensidades pertinentes queden dentro del rango para el cual fueron obtenidos los datos. No podrán hacerse, con seguridad, extrapolaciones más allá del rango estudiado.

6.6 Estimación del mejor estimado del umbral (BET)

Este procedimiento abreviado, vea [2] y el ejemplo B.1, puede describirse como un método riesgoso e impreciso de obtención de una estimación grosera del umbral de un panel, está basado en el modelo de umbral, definición 3.7. En la prueba 3 - AFC existe una probabilidad de 1/3 de hacer una selección correcta en concentraciones por debajo del umbral y una probabilidad de 1.0 en concentraciones por encima de este. El procedimiento es económico en cuanto al tiempo de los catadores pues solo se hace una presentación por concentración a cada catador. Como consecuencia, puede incluirse un gran número de jueces.

Tabule los datos en orden ascendente de la concentración (o en orden descendente de la dilución, como en el ejemplo). Revise los datos durante la corrida completa de éxitos mientras incrementa la concentración. Calcule el BET como la media geométrica de la mayor concentración fallada y la próxima mayor concentración. Por ejemplo, en el caso del catador 1 el BET es $\sqrt{135 \times 45} = 78$

Este algoritmo no puede usarse si existe una corrida completa de selecciones correctas o cuando existe una selección incorrecta de la mayor concentración, jueces 6 y 4 en el ejemplo. El procedimiento recomendado es continuar la comprobación a las concentraciones extendidas apropiadas, de otro modo pueden adoptarse las convenciones siguientes. Si la selección a la concentración más alta es incorrecta, asuma que la concentración inmediata superior será correcta y calcule el BET de acuerdo con esto. Si se tiene una corrida completa de selecciones correctas, asuma la concentración inferior inmediata como incorrecta.

Calcular el BET para el grupo como la media geométrica de las BET individuales. Una medida conveniente de la variación entre individuos la desviación estándar de los \log_{10} , como en el ejemplo. El BET resultante puede estar sesgado debido a que la probabilidad de una selección al azar es de 1/3 y de 2 o 3 selecciones al azar es 1/9 y 1/27. El procedimiento es riesgoso debido a que con solo una presentación por catador una muestra por encima del umbral puede perderse por confusión o inexperiencia con el estímulo o los mecanismos de la prueba. La desviación estándar de los valores logarítmicos puede ser subestimada si el BET cae cerca de los extremos del rango de concentraciones presentadas y también si son probadas pocas concentraciones.

6.7 Presentación de los resultados

Los informes sobre pruebas de umbral deben incluir la siguiente información:

- a) Todas las condiciones de prueba, tales como naturaleza y fuente de las muestras, el método de muestreo, la selección del medio (diluyente), el equipamiento y las pruebas físicas iniciales bajo las cuales las muestras fueron presentadas a los catadores;
- b) Concentraciones o regímenes de flujo usados, temperatura y otras condiciones de las muestras;
- c) Instrucciones y hojas de cata dadas a los jueces;
- d) Factor de dilución para cada paso;
- e) Número de réplicas de las presentaciones a cada juez;
- f) Composición del panel con respecto a la edad, sexo y experiencia; puede ser útil alguna información adicional, por ejemplo, familiaridad con el estímulo evaluado, salud, hábito de fumar, uso de dentaduras, tiempo transcurrido desde la última comida, etc. Ningún asesor se identificará por el nombre ni el informe permitirá a un lector familiarizado con el panel referirse a un juicio particular de algún miembro del panel;
- g) Si el tamaño del conjunto de datos no es muy grande, informe los resultados en forma de tablas con el número de presentaciones y selecciones correctas de las concentraciones usadas, como en la tabla B.1. Informe los valores estimados de los umbrales, tanto individuales como los del grupo, y sus límites de error;

- h) Si se buscó la distribución de los umbrales en la población, informar los umbrales individuales y, como es apropiado, los estadísticos derivados tales como la media y la varianza y las medidas de desviación de la distribución normal;
- i) Si se recurrió a un agrupamiento, informe el umbral del grupo a partir de los datos agrupados y sus límites. Note en el informe que el agrupamiento de la varianza dentro de cada juez (pequeña) con la varianza entre jueces (grande) puede afectar el cálculo de los límites.

Anexo A (Informativo)

Número estimado de catadores requeridos para un grado de precisión dado

Los valores de los umbrales obtenidos con el procedimiento descrito en esta norma son altamente poco confiables debido a la variabilidad de la respuesta humana a un estímulo. La tabla A.1 muestra ejemplos provenientes de la práctica de la precisión (\pm desviación estándar) que puede esperarse en situaciones similares.

Tabla A.1 – Precisión comúnmente obtenible, en función del tamaño del panel y el número (n) de presentaciones

Nº	Grupo de prueba	Propósito	Ejemplos de números de pruebas 3 – AFC presentadas	Ejemplos de precisión observada
1	Una persona	Se necesita conocer si la persona presenta anosmia a la sustancia X	1 presentación en cada una de 8 concentraciones n = 8	\pm 2- a 5- veces
2	Una persona	Se desea conocer la sensibilidad a la sustancia X de un embotellador de agua saborizada	6 presentaciones en cada una de 6 concentraciones n = 36	\pm 50 % a 100 %
			10 presentaciones en cada una de 8 concentraciones n = 80	\pm 20 % a 50 %
3	Un panel de 8 miembros	Se desea comparar la sensibilidad de dos paneles	1 presentación en cada una de 6 concentraciones n = 48	\pm 1- a 3-veces
			6 presentaciones en cada una de 8 concentraciones n = 384	\pm 20 % a 50 %
4	4 paneles de 8 jueces seleccionados para representar a una población	Se quiere conocer el nivel umbral de una sustancia X como contaminante	1 presentación en cada una de 6 concentraciones N = 192	\pm 50 % a 200 %
			6 presentaciones en cada una de 6 concentraciones N = 1152	\pm 20 % a 50 %
5		Se quiere determinar el nivel de X indetectable por el 95 % de la población	Como la anterior más pruebas repetidas con el 25% más sensible de 4 x 8 personas N \approx 1800	\pm 40 % a 100 %

La relación entre la precisión y el número de pruebas 3 – AFC es independiente del tipo de umbral que se busca, por ejemplo, un fabricante de refresco de naranja que desea asegurar que cierto ingrediente particular pueda ser detectado por el 95 % de la población necesitará aproximadamente 1800 presentaciones de prueba. El número requerido es altamente dependiente de la variabilidad dentro de la población, sin embargo, una población compuesta por grupos ampliamente diferentes, por ejemplo, muchas personas jóvenes y mayores pueden requerir un número mucho mayor para lograr una precisión dada.

Anexo B (Informativo)

Ejemplos

B. 1 Ejemplo B.1: Procedimiento abreviado usando BET - Umbral de olor de una muestra de gas de chimenea

B.1.1 General

El ejemplo ilustra el procedimiento abreviado BET para obtener un valor aproximado cercano al umbral. Se muestra la forma más simple del procedimiento: un pequeño número de catadores (nueve) probaron las 6 concentraciones escogidas solo una vez, y no se hicieron extensiones de la prueba para otras concentraciones a los jueces 4 y 6. El procedimiento correcto hubiera sido probar, por ejemplo, al catador 6 en diluciones 3-, 9- y 27- veces mayores, etcétera hasta que ocurra un fallo y sea confirmado. Pueden obtenerse mejoras en la precisión replicando el procedimiento completo.

B.1.2 Procedimiento experimental

Fueron preparadas 6 concentraciones diferentes de gas de chimenea en aire libre de olores. Cada una de estas muestras se presentó en conjunto con otras 2 muestras libre de olores. La concentración se incrementó por un factor de 3 por cada paso de concentración. Participaron 9 catadores seleccionados aleatoriamente de la población. Cada uno procedió a probar las muestras desde la menor a la mayor concentración, indicando en cada paso cuál muestra era diferente de las otras 2. Los resultados se presentan en la Tabla B.1.

Tabla B.1 – Ejemplo B.1: Umbral de olor de gas de chimenea

Juez	Razón de dilución (incremento de la concentración →)						Valor	Log ₁₀ del valor
	3645	1215	405	135	45	15		
1	0	+	+	0	+	+	78	1,89
2	+	0	+	+	+	+	701	2,85
3	0	+	0	0	+	+	78	1,89
4	0	0	0	0	+	0	9	0,94
5	+	0	0	+	+	+	234	2,37
6	+	+	+	+	+	+	6313	3,80
7	0	+	+	0	+	+	78	1,89
8	+	0	0	+	+	+	234	2,37
9	+	0	+	+	+	+	701	2,85
Sum de Log ₁₀ 8							$\sum \log_{10}$	20,85
Umbral BET promedio = media geométrica								2,32
Desviación estándar de los valores Log ₁₀								209
"0" indica que el juez seleccionó la muestra incorrecta del conjunto de 3								
"+" indica que el juez seleccionó la muestra correcta								

B.1.3 Cálculos

Ver referencia [2] en la bibliografía. Se encontraron los BET (la mejor estimaron del umbral) para cada catador como la media geométrica de la mayor concentración fallada y la concentración

inmediata superior. Se asumió que el juez 4 señaló correctamente la muestra en las concentraciones más bajas (1 a 5) y que el juez 6 falló en las diluciones superiores a las presentadas en la tabla (1 a 10935). La suma de los logaritmos de los valores BET resultantes fue de 20,85 con un promedio de 2,32, la razón de dilución de 1 a 209. La desviación estándar de los valores log, una medida de la dispersión de los umbrales, fue calculada a mano derecha de la columna. El valor 0,81 indica una gran diferencia entre catadores, pero note que el valor real puede ser todavía mayor dado que el rango fue reducido por no probar el experimentador los jueces 4 y 6 en concentraciones extendidas.

B. 2 Ejemplo B.2: Umbral proveniente de datos agrupados – Ajuste del arco mediante el procedimiento de máxima verosimilitud versus procedimiento de mínimos cuadrados – Umbral de olor a diesel en trucha

B.2.1 General

El ejemplo ilustra el principio del procedimiento de máxima verosimilitud y presenta un método para encontrar los parámetros del umbral y sus límites usando una hoja de cálculo, aplicado a una gran base de datos de 18 evaluaciones 3 – AFC en 9 concentraciones desigualmente espaciadas, vea B.2.3. Para comparar, en B.2.4 se aplica el procedimiento de mínimos cuadrados a los mismos datos.

B.2.2 Experimento

Fue probada una muestra de aceite diesel para conocer su potencial para contaminar una trucha expuesta a agua que contenga el aceite [5]. La trucha fue expuesta al aceite diesel en varias concentraciones y después de 24 h de exposición fue troceada y evaluada contra un control no expuesto por un panel de 18 jueces experimentado. La Tabla B.2 resume las fórmulas usadas en la hoja de cálculo, y la Tabla B.3 muestra los datos experimentales y la hoja de trabajo para ajustar el modelo logístico.

Tabla B.2 – Fórmula usadas en la hoja de cálculo para la estimación de los parámetros del modelo logístico, y de los límites de error del estimado del umbral

Columna	Fórmula
B	@LN(A3)
E	+D3/C3
F	(2/3)/(@EXP(G\$18*(F\$18-\$B3))+1)+1/3
G	+\$D3*@LN(F3)+(\$C3-\$D3)*@LN(1-F3)
H	(2/3)/(@EXP(I\$18*(H\$18-\$B3))+1)+1/3
I	+\$D3*@LN(H3)+(\$C3-\$D3)*@LN(1-H3)
J	(2/3)/(@EXP(K\$18*(J\$18-\$B3))+1)+1/3
K	+\$D3*@LN(J3)+(\$C3-\$D3)*@LN(1-J3)

B.2.3 Resultados y cálculos por máxima verosimilitud

El principio del procedimiento de máxima verosimilitud para la estimación de los parámetros del modelo es encontrar los valores de los parámetros que producen el máximo valor de la función de verosimilitud (ecuación B.1). Los programas en hojas de cálculo a menudo contienen funciones que pueden encontrar el máximo o mínimo de una función y puede ser conveniente usarlo para ajustar el modelo logístico a datos 3 – AFC. Además del hecho de que las hojas de cálculo son

ampliamente usadas por el personal de computación en los laboratorios, y más que un paquete estadístico, existen algunas ventajas en el uso de hojas de cálculo en lugar de los paquetes estadísticos. Los mecanismos del proceso son fáciles de entender por cualquier persona no familiarizada con las operaciones básicas de una hoja de cálculo, y el operador no necesita adquirir conocimientos de lenguajes de programación o convenciones de sofisticados paquetes estadísticos. La determinación de los parámetros y los límites prosigue fácilmente con conjuntos de datos con un número razonable de observaciones – 50 o más – las cuales están esparcidas alrededor del umbral, pero una ventaja de las hojas de cálculo sobre los paquetes estadísticos o programas específicos es que el trabajo de ajuste del procedimiento es más transparente para el operador y esto puede ser una ventaja cuando se ajustan conjuntos de datos menos ideales.

Los comandos para encontrar el máximo o mínimo de la función se llaman de formas diferentes en diferentes hojas de cálculo y en el ejemplo presentado aquí se usa la función Optimizar del paquete QuattroPro³. Equivalentes en Excel y Lotus 1-2-3 es Solver.

En la Tabla B.3, las columnas A a D contienen los datos experimentales. A tiene la concentración de aceite diesel en agua (C) en ml/m³, y la columna B los logaritmos, en este caso logaritmos naturales (aunque se pueden usar logaritmos con otras bases) de las concentraciones [ln(C)]. Las intensidades de los estímulos no necesitan estar en una serie geométrica igualmente espaciada, o en cualquier otro espaciamiento particular. Esto es conveniente, aunque no necesario, para ordenarlos por concentración.

Las columnas C y D contienen respectivamente los números de presentaciones (n) en cada concentración y los correspondientes números de selecciones correctas (r). No es un requerimiento que el número de jueces sea el mismo en cada concentración como aquí. La columna E registra la proporción de selecciones correctas (P_{obs}) aunque estos valores no figuran en los cálculos siguientes.

Las columnas F y G contienen los cálculos del ajuste logístico. El modelo logístico está definido por los parámetros b y t y para valores dados de los parámetros de proporción esperada de evaluaciones correctas pueden ser calculados. La verosimilitud es la probabilidad de obtener la proporción observada asumiendo un modelo con los valores dados de los parámetros. La probabilidad conjunta sobre todos los datos es el producto de las probabilidades en cada concentración. Es más conveniente trabajar con el logaritmo de las verosimilitudes, cuando la verosimilitud conjunta es la suma de los logaritmos de las verosimilitudes y el logaritmo de la probabilidad está dado por la expresión:

$$\sum_{i=1}^{i=N} r_i \ln(P_{est})_i + (n_i - r_i) \ln(1 - P_{est})_i \quad (B.1)$$

donde **N** es el número de conjuntos de datos y *n*, *r* y *P_{est}* son el número de presentaciones, número de respuestas correctas y proporción estimada respectivamente. La verosimilitud es calculada en la columna G. La fila 12 contiene las sumas de las verosimilitudes, es decir, el logaritmo de la verosimilitud de las probabilidades conjuntas. La celda G12 tiene la fórmula +SUM(G3:G11) y está copiada dentro de las celdas L12 y K12.

³ Las hojas de cálculo mencionadas son ejemplos de productos que se usan comercialmente. Esta información está dada para conveniencia de los usuarios de esta norma internacional y no constituye un endosado de estos productos.

Los datos en este ejemplo están desde la fila 3 a la 11. Los estimados preliminares de los parámetros del umbral y la pendiente están en las celdas F18 y G18 referidos en la fórmula en la columna F. El procedimiento es muy robusto para estimados preliminares bastante alejados del óptimo para conjuntos de datos aproximadamente distribuidos alrededor del umbral y los estimados preliminares no necesitan estar cerca de los valores finales. El estimado preliminar del umbral puede fijarse aproximadamente en el punto medio del rango de concentraciones, y la pendiente en 1 cuando se usan los logaritmos naturales en la columna B o 0,5 cuando se usa logaritmo en base 10. El optimizador, o la función equivalente, es llamado, usualmente desde el menú herramientas o el equivalente. La función necesitará dar la dirección de las celdas variables, que son las celdas que contienen los valores que varían por la optimización de la función de verosimilitud, en este caso las celdas F18 y G18, y la dirección de la celda solución, que es la celda que contiene el valor a ser maximizado, en este caso G12. La función permite varias opciones, algunas de las cuales pueden establecerse como valores predefinidos. Chequee que la función esté establecida para maximizar los valores de la celda solución. No es necesario establecer ninguna restricción en este caso. La función debe tener un criterio para detener la iteración basado en el máximo número de iteraciones y el cambio mínimo en las variables, y el operador pudiera desear cambiar estos valores a partir de los valores predefinidos.

Tabla B.3 – Ejemplo de hoja de trabajo para el ajuste de los datos en el modelo logístico y para el cálculo de los límites de error el estimado del umbral usando un programa en hoja de cálculo

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1						Modelo óptimo		Límite inferior		Límite superior	
2	C ml/m ³	ln(C)	n	r	P_{obs}	P_{est}	Verosim.	P_{est}	Verosim.	P_{est}	Verosim.
3	0,010	-4,61	18	5	0,278	0,366	-10,951	0,414	-11,361	0,349	-10,844
4	0,028	-3,56	18	9	0,500	0,446	-12,583	0,538	-12,528	0,394	-12,892
5	0,032	-3,44	18	4	0,222	0,462	-11,762	0,558	-13,759	0,404	-10,865
6	0,060	-2,81	18	11	0,611	0,568	-12,097	0,671	-12,170	0,478	-12,672
7	0,095	-2,35	18	14	0,778	0,667	-10,072	0,755	-9,561	0,561	-11,382
8	0,285	-1,26	18	16	0,889	0,872	-6,304	0,903	-6,298	0,798	-6,812
9	0,324	-1,13	18	17	0,944	0,888	-4,206	0,914	-3,982	0,821	-5,067
10	0,673	-0,396	18	16	0,889	0,952	-6,865	0,959	-7,060	0,920	-6,389
11	0,992	-0,008	18	17	0,944	0,970	-4,031	0,973	-4,075	0,951	-3,869
12							-78,872		-80,792		-80,793
13											
14								desviación	3,841		3,841
15											
16											
17						ln(t)	b	x	b	x	b
18						-2,3489	1,311	-2,8354	1,117	-1,8673	1,357
19					p						
20	unidades de concentración					0,09544		0,05870		0,1545	
21											
22			Estimado revisado de los límites					-2,8354		-1,8673	

Comenzando las iteraciones la solución se obtuvo en pocos segundos trabajando en una computadora, con el establecimiento de que se detuviera la iteración porque la solución estaba convergiendo muy lentamente. Las celdas F18 y G18 contendrán ahora los estimados requeridos de los parámetros del modelo logístico:

En el presente caso, $\ln(t) = -2,35$, $t = 0,095$ ml/m³, y $b = 1,31$.

Estos parámetros definen el modelo logístico, el cual tiene la propiedad de ser el modelo con la máxima verosimilitud, este es referido como modelo óptimo. Cualquier otro valor de cualquier parámetro dará un modelo con una verosimilitud menor. La diferencia de verosimilitudes entre modelos está expresada en la desviación, definida como:

$$\text{Desviación} = -2(t_1 - t_2)$$

Donde t_1 y t_2 son los logaritmos de las verosimilitudes de los modelos 1 y 2. En este caso, t_1 y t_2 son los modelos óptimo y alternativo respectivamente. La significación de la diferencia entre los modelos está determinada por la prueba χ^2 de la desviación con los apropiados grados de libertad. Esta relación se usa para encontrar los límites de error de estimado del umbral. El objetivo es encontrar un modelo con un valor de t que de una desviación igual a χ^2 con un grado de libertad con el nivel de confianza seleccionado. Este es un valor de desviación de 3,841 para un grado de libertad y un nivel de confianza de $p = 0,05$.

Las fórmulas en F3 y G3 pueden copiarse en las correspondientes columnas en H y K si los designadores de columnas apropiados han sido puestos como absolutos. La celda I14 tiene la fórmula $+2*(\$G12 - I12)$ para la desviación del modelo ajustado para el límite superior y el modelo óptimo. Copie la fórmula dentro de la celda K14.

Los límites se obtienen por un proceso iterativo. Es necesario para comenzar un estimado preliminar de los límites. El tamaño de los límites está determinado por diferentes características del conjunto de datos, pero la más importante es el número total de observaciones en el conjunto de datos. La Tabla B.4 lista el tamaño de los pasos que se añaden, algebraicamente, al umbral estimado para dar un primer estimado de un límite para varios valores del número total de observaciones en el conjunto de datos. En el ejemplo presentado aquí, con un total de 162 observaciones, un primer estimado de los límites inferior y superior es -2,84 y -1,79 respectivamente. Estos se entran en las celdas H18 y J18.

Tabla B.4 – Paso a ser añadido al umbral estimado para dar estimados preliminares de los límites de error del umbral

Nº total de observaciones	40	60	80	100	120	160	200	>200
Paso para el límite superior	1,02	0,81	0,76	0,61	0,58	0,49	0,45	0,40
Paso para el límite inferior	-1,39	-1,05	-0,84	-0,76	-0,69	-0,56	-0,49	-0,45

La función de optimización es usada otra vez pero con solo la celda que contiene el valor b , celda I18 o K18, como variable. Las celdas I12 o K12 que contienen las sumas, son celdas soluciones. Si los valores de la desviación no están adecuadamente cercanos al gran valor, 3,84, se calcula el estimado revisado de los límites. Con un conjunto de datos de 50 o más observaciones distribuidas alrededor del umbral, la desviación está aproximadamente linealmente relacionada a la raíz cuadrada del paso espaciado del umbral y el estimado revisado puede obtenerse por simple proporcionalidad. La celda H22 contiene la ecuación $@SQRT(3,841/I14)*(H18 - \$F18) + \$F18$ para dar el estimado revisado del límite y está copiado en la celda J22. el estimado revisado es entrado, como un valor, en H18 o J18 (o simplemente se corrige el valor aquí), y se corre nuevamente el optimizador. La iteración se repite hasta que la desviación obtenida esté suficientemente cerca del valor deseado. En el ejemplo de la Tabla B.3, fueron suficientes 3 iteraciones.

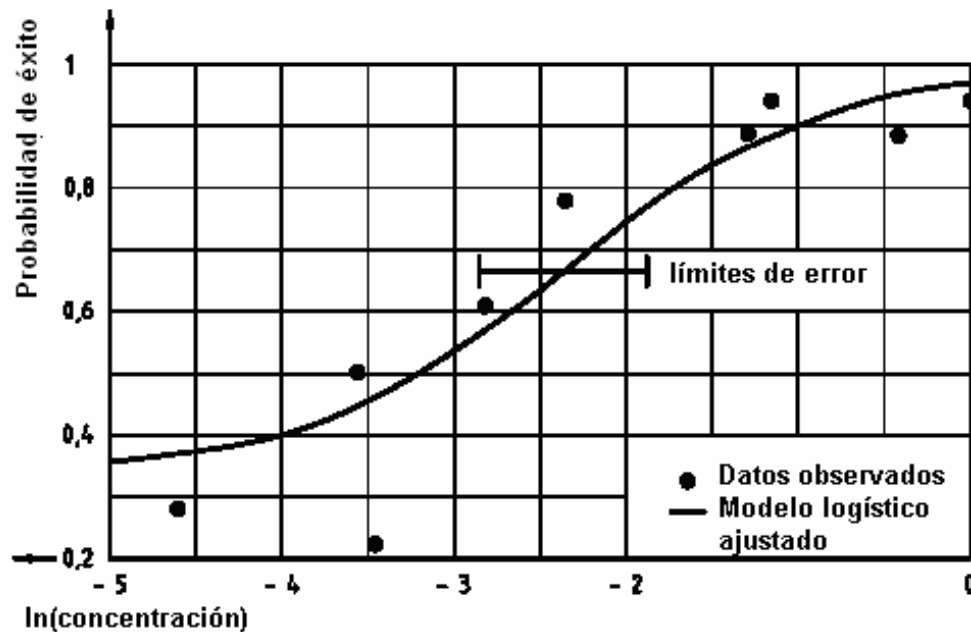


Figura B.1 – Ejemplo B.2: Umbral grupo para datos agrupados – trucha contaminada con aceite diesel

El operador puede usar las facilidades gráficas de la hoja de cálculo para graficar los datos observados y el ajuste logístico, Figura B.1. el modelo logístico puede representarse usando los valores en la columna H de la Tabla B.3, pero se obtiene una curva más suavizada mediante la construcción de un vector de valores más cercanos y regularmente espaciados de el logaritmo de la concentración con el objetivo de “llenar” la función de la hoja de cálculo y calcular las probabilidades a partir de la fórmula de la columna G de la Tabla B.3 y los parámetros estimados.

Para conjunto de datos no condicionados pueden experimentarse dificultades en el ajuste de los parámetros y particularmente en la búsqueda de los límites de error. Estos pueden ser conjuntos pequeños de datos o conjuntos de datos que no abarcan el umbral, o en los cuales los valores se desvían marcadamente de una función monótona suave y se incrementan en proporción a las detecciones con incremento en la intensidad del estímulo. La función de optimización puede no converger y puede terminar con un aviso de algún orden. Usualmente se ha encontrado que el programa ha salido con un valor extraño de b , muy alto, muy bajo o incluso negativo. (Cuando el valor numérico de la variable experimental aumenta con el aumento de la intensidad, por ejemplo, la concentración del estímulo, y el modelo requiere que la probabilidad de detección aumente con el aumento de la intensidad, entonces b debe ser positivo. Cuando examinamos agua o gases para sabores u olores extraños es una práctica común diluir la muestra y relacionar la proporción de detección al grado de dilución. En este caso el valor numérico de la variable de prueba aumenta con el decrecimiento de la intensidad del estímulo y b será entonces negativo). La mejor opción para el experimentador en caso de dificultad para ajustar el modelo logístico o para encontrar los límites de error es obtener más datos, pero por otra parte el operador puede repetir el ajuste e incluir restricciones al valor de b en las opciones de la función de optimización. Las restricciones pueden ser el valor de b mayor o igual que cero o un valor inferior, y menos de 2 en el caso de la columna B de la Tabla B.3 expresada como logaritmos naturales, o 1 en el caso de los logaritmos en base 10. Estas restricciones superiores corresponden a pendientes tales que la

probabilidad de detección en el rango 0,05 a 0,95 se obtienen de intensidad del estímulo de 20 ciclos. Si esto falla para dar una solución el operador puede fijar un valor de b y ajustar solo el umbral. Este ajuste restringido puede repetirse en todo el rango de valores de b y destacada la función de máxima verosimilitud. Un examen de la variación de la máxima verosimilitud con b dará un indicador de la solución óptima existe o no.

Los estimados de uno o ambos límites convergerán probablemente muy despacio, o no del todo, con datos no condicionados usando el algoritmo de la celda H22. Un enfoque alternativo es registrar los valores de t y la desviación asociada en columnas de la hoja de cálculo como la iteración dirigida. Después de tres o cuatro iteraciones, graficar la desviación contra la distancia del estimado del umbral y extrapolar o interpolar visualmente para el valor del paso en la desviación de 3,84. La visualización se realiza fácilmente sustrayendo 3,84 de las desviaciones y mirando en qué paso la desviación corregida es cero. La función de regresión de la hoja de cálculo puede usarse también para modelar el valor reducido de la desviación contra el paso como un polinomio de segundo orden. La ecuación resultante es resuelta para obtener t para un valor de desviación reducida de cero. Este estimado revisado del límite es usado en la próxima iteración. La estrategia conveniente es reemplazar los valores existentes de la desviación reducida y el umbral en los vectores usados en las regresiones a partir del límite estimado mediante el nuevo estimado revisado de x y la correspondiente desviación, y recalculando la expresión para proveer un estimado revisado adicional. Además, el valor de b en la función de optimización puede ser restringido para prevenir que se dispare a valores no razonables. El proceso se repite y pronto converge si existe un valor razonable del límite. El examen del cambio de la desviación con la distancia al umbral revelará si es posible encontrar un valor para el límite.

B. 2.4 Cálculo alternativo usando regresión lineal

El principio de este procedimiento es aplicar la transformación logito descrita en 6.2.2 y usar entonces un programa de computación adecuado basado en la regresión por mínimos cuadrados tal como el procedimiento ProReg de SAS⁴ para encontrar la línea recta que ajusta mejor los datos. Los comandos de este procedimiento para los datos de la Tabla B.3 y las salidas resultantes se presentan a continuación

⁴ Esta información se da para conveniencia del usuario de esta norma internacional no constituye un endorso de ISO de este producto. Ejemplos de productos equivalentes que llegan a los mismos resultados se tienen en SPSS, S-PLUS y SYSTAT.

```
TITLE "Logistic Regression of Threshold Data";
DATA INPUT;
  INPUT CONC R N;          /* Input Data */
  P=MAX(R/N, 1/3);        /* Compute P(C) */
  LOGIT=LOG((P-1/3)/(1-P)); /* Perform Logit Transformation */
  LOG_C=LOG(CONC);        /* Convert to LOG Concentration */
CARDS;
.010 5 18
.028 9 18
.032 4 18
.060 11 18
.095 14 18
.285 16 18
.324 17 18
.673 16 18
.992 17 18
;
RUN;
DATA TRIMMED;             /* Trim data of extreme values */
  SET INPUT;              /* as per Section 6.2.1 */
  IF LOGIT GE -1,75 AND LOGIT LE 1,75;
RUN;
PROC REG DATA=TRIMMED OUTEST=EST; /* Fit the regression model */
  MODEL LOGIT=LOG_C;
RUN;
DATA EST;
  SET EST;
  LOG_T = -INTERCEP/LOG_C; /* Compute Threshold value */
  THRESHLD = EXP(LOG_T);
RUN;
```



```

PROC PRINT DATA=EST;                               /* Output results */
  VAR INTERCEP LOG_C LOG_T THRESHLD;
RUN;

```

1

Logistic Regression of Threshold Data

Model: MODEL1

Dependent Variable: LOGIT

Analysis of Variance

Source	DF	Sum of Squares	Mean Square	F Value	Prob>F
Model	1	5,16632	5,16632	26,367	0,0143
Error	3	0,58783	0,19594		
C Total	4	5,75415			

Root MSE 0,44265 R-square 0,8978

Dep Mean 0,49539 Adj R-sq 0,8638

C.V. 89,35510

Parameter Estimates

Variable	DF	Parameter Estimate	Standard Error	T for H0: Parameter=0	Prob > T
INTERCEP	1	2,368180	0,41498373	5,707	0,0107
LOG_C	1	0,900890	0,17544692	5,135	0,0143

2

Logistic Regression of Threshold Data

OBS	INTERCEP	LOG_C	LOG_T	THRESHLD
1	2,36818	0,90089	-2,62871	0,072172

El modelo de regresión resultante es:

$$\text{LOGIT} = 2,3682 + 0.9009\text{Log}(\text{conc})$$

El umbral es la concentración en la cual $LOGIT = 0$, por lo que la concentración umbral (en unidades logarítmicas) es $Log(conc) = -2,3682/0.9009 = -2,6287$ o (en unidades estándares) $umbral = EXP(-2.6287) = 0.072 \text{ ml/m}^3$.

B.3 Ejemplo B.3: Umbrales individuales – Comparación de dos catadores – Aceite diesel en agua

B.3.1 Objetivo

El objetivo fue determinar si los dos evaluadores difieren en sus percepciones de la sustancia. El ejemplo ilustra el uso de la jerarquía en los modelos estadísticos en el procedimiento de máxima verosimilitud.

B.3.2 Procedimiento experimental

Se usó una sustancia química disuelta en agua y el objetivo fue medir y comparar los umbrales de detección del olor de los dos evaluadores.

B.3.3 Resultados y cálculos

El enfoque [1] es establecer una jerarquía de los modelos estadísticos de complejidad creciente y examinar la verosimilitud con que los datos ajustan a estos modelos. Tanto más parámetros son adicionados al modelo la verosimilitud aumenta y el cambio en la verosimilitud como parámetros son añadidos, expresado como desviación, se examina para determinar si el nuevo modelo aumenta significativamente la verosimilitud. En el caso de ajuste de un modelo logístico a datos 3 – AFC los parámetros a ser añadidos en el modelo son los valores de t y b .

La Tabla B.5 muestra los datos experimentales y los cálculos y la Tabla B.6 contiene un resumen de los resultados obtenidos con los tres modelos estadísticos. La conducta de las concentraciones probadas y el número de presentaciones en cada concentración reflejan la estrategia de inicio con pocas presentaciones en un amplio rango de concentraciones para luego realizar más presentaciones replicadas cerca del umbral individual esperado.

Tabla B.5 – Cálculo de los modelos estadísticos para comparar las respuestas de los dos evaluadores

Cm/m ³	Ln(C)	n	r	P_{obs}	Modelo 1		Modelo 2		Modelo 3	
					P_{est}	Log Veros.	P_{est}	Log Veros.	P_{est}	Log Veros.
Evaluador 1										
0,0015	-6,50	3	0	0,000	0,337	-1,23	0,334	-1,22	0,334	-1,22
0,0040	-5,52	3	0	0,000	0,347	-1,28	0,335	-1,23	0,335	-1,23
0,0046	-5,38	3	0	0,000	0,350	-1,29	0,336	-1,23	0,336	-1,23
0,0139	-4,28	3	0	0,000	0,404	-1,55	0,348	-1,29	0,349	-1,29
0,0200	-3,91	5	1	0,200	0,442	-3,15	0,360	-2,81	0,360	-2,81
0,0250	-3,69	7	1	0,143	0,473	-4,59	0,371	-3,78	0,372	-3,78
0,0417	-3,18	3	1	0,333	0,565	-2,24	0,415	-1,95	0,415	-1,95
0,1000	-2,30	13	8	0,615	0,759	-9,33	0,578	-8,70	0,578	-8,70
0,1250	-2,08	3	3	1,000	0,804	-0,65	0,636	-1,36	0,636	-1,36
0,5000	-0,693	5	4	0,800	0,961	-3,41	0,926	-2,91	0,925	-2,90
2,5000	0,916	2	2	1,000	0,995	-0,01	0,994	-0,01	0,994	-0,01
12,5000	2,53	2	2	1,000	1,000	0,00	1,000	0,00	1,000	0,00
Evaluador 2										
0,0015	-6,50	3	0	0,000	0,337	-1,23	0,344	-1,27	0,344	-1,27
0,0040	-5,52	3	2	0,667	0,347	-2,54	0,384	-2,40	0,383	-2,40
0,0046	-5,38	3	1	0,333	0,350	-1,91	0,395	-1,93	0,394	-1,93
0,0125	-4,38	8	4	0,500	0,395	-5,73	0,560	-5,60	0,559	-5,60
0,0139	-4,28	3	2	0,667	0,404	-2,33	0,586	-1,95	0,585	-1,95
0,0200	-3,91	5	4	0,800	0,442	-3,85	0,682	-2,68	0,682	-2,68
0,0417	-3,18	3	2	0,667	0,565	-1,97	0,855	-2,25	0,856	-2,25
0,0500	-3,00	7	6	0,857	0,604	-3,95	0,886	-2,90	0,886	-2,90
0,1000	-2,30	5	5	1,000	0,759	-1,38	0,958	-0,22	0,958	-0,21
0,1250	-2,08	3	3	1,000	0,804	-0,65	0,970	-0,09	0,970	-0,09
0,5000	-0,693	5	5	1,000	0,961	-0,20	0,997	-0,02	0,997	-0,02
2,5000	0,916	2	2	1,000	0,995	-0,01	1,000	0,00	1,000	0,00
12,5000	2,53	2	2	1,000	1,000	0,00	1,000	0,00	1,000	0,00
Suma						-54,48		-47,76		-47,76

Modelo 1: En este modelo cada valor de t y b es usado para estimar valores en la columna P_{est} de la Tabla B.5. Las ecuaciones en las celdas de esta columna hacen referencia a las dos celdas que contienen los valores de t y b y estas dos celdas son usadas como las celdas variables de la función de maximización de la hoja de cálculo. Los logaritmos de la verosimilitud son sumados para todos los valores para ambos evaluadores y este es el contenido de la celda objetivo de la función de maximización. La función se corre para obtener un estimado de t y b que maximice la suma de las verosimilitudes. Los valores de t y b para este modelo se muestran en la Tabla B.6

Tabla B.6 – Resumen del análisis de los modelos para la comparación de las respuestas de los dos evaluadores

Modelo	Parámetro	Evaluador		Log veros.	Comparación	Desviación	Grados de libertad	P, prueba χ^2
		1	2					
1	t b	-2,72 1,37		-54,48				
2	t b	-1,97 1,62	-3,97 1,62	-47,77	1 vs. 2	13,43	1	0,0012
3	t b	-1,97 1,63	-3,97 1,62	-47,77	1 vs. 3	0,00	1	

Modelo 2: Una inspección de los datos sugiere que el umbral para los evaluadores es diferente y este modelo utilizado separa los valores de t para los jueces pero no el valor de b . Los valores en la columna de P_{est} del modelo 2 en la Tabla B.5 se obtuvieron usando los valores aproximados de t y el único valor de b . Las tres celdas que contienen los dos valores de t y único valor de b forman las celdas variables en la función de maximización, y la celda que contiene la suma de los logaritmos de las verosimilitudes para ambos conjuntos de datos es la celda objetivo. Se corre la función para dar los mejores valores de t y b para el modelo. Esta vez el modelo es el mejor ajuste para estos datos y el logaritmo de la verosimilitud es el menor. Los valores de los parámetros y la desviación entre este modelo y el modelo 1 se muestran en la Tabla B.6.

Modelo 3: Extensión del modelo 2 para incluir valores separados de b para los dos evaluadores. Existen 4 celdas variables, dos para las t y dos para las b , y por lo tanto, la celda objetivo es la que contiene los logaritmos de las verosimilitudes sumados para ambos conjuntos de datos.

B.3.4 Resumen e inferencias

La Tabla B.6 muestra un resumen de los parámetros y los estadísticos derivados. Para cada parámetro adicional añadido al modelo en la jerarquía, se pierde 1 grado de libertad, y para estos modelos, la desviación entre dos de ellos se prueba mediante la χ^2 con 1 grado de libertad. La desviación entre los modelos 1 y 2 es altamente significativa con una probabilidad de 0,0012. La adición de un tercer parámetro, la segunda b , para formar el modelo 3 no mejora el ajuste, la desviación es cero.

Se puede concluir que los dos evaluadores difieren en su umbral de detección del olor para las muestras de aceite diesel, pero su sensibilidad a incrementos en la intensidad no difiere.

B.4 Ejemplo B.4: Comparación de umbrales de dos sustancias, α – y β – pinene en agua

B.4.1 General

Los modelos aplicados en el ejemplo B.3 pueden ser aplicados igualmente bien para la comparación de dos sustancias. Los datos de diferentes jueces son agrupados para formar un umbral de grupo para cada sustancia.

B.4.2 Procedimiento experimental

El objetivo fue medir y comparar las propiedades sensoriales de α - y β - pinene. Un panel de 24 jueces experimentados recibieron una presentación 3 – AFC de 10 concentraciones diferentes.

B.4.3 Resultados y cálculos

Los datos experimentales y los cálculos de la hoja de cálculo se muestran en la Tabla B.7. La Tabla B.8 presenta los resultados para t y b y un resumen de los estadísticos derivados.

B.4.4 Resumen e inferencias

El modelo 2 es un ajuste significativamente mejor de los datos que el modelo 1 manteniendo la hipótesis de que los umbrales para los dos evaluadores no son iguales. El modelo 3 en el cual están ajustados los dos valores t y b es incluso un mejor ajuste y tiene una mayor verosimilitud. Sin embargo, la desviación entre los modelos 2 y 3 de 3,37 tiene una probabilidad de 0,066, no significativa según el criterio usado comúnmente de $p = 0,05$. Esto sugiere fuertemente, sin embargo, que las pendientes no son las mismas y esto puede someterse a una futura investigación. En el caso de β - pinene, la cuarta concentración más baja está cerca de la asíntota inferior del modelo logístico y no ayuda a fijar la pendiente. Las concentraciones para α - pinene cubren el rango entre las asíntotas bastante ampliamente y dan un buen estimado de la pendiente.

Adicionalmente, el valor de b en el modelo 2 está mucho más cercano al de α - pinene en el modelo 3 contra la sugerencia del que el estimado de b para β - pinene no es tan preciso como el del isómero alfa. Dos o más futuras presentaciones de concentraciones de β - pinene en concentraciones por debajo del máximo usado aquí y quizás entre 5 y 25 ml/m³ pueden ser recomendables.

Tabla B.7 – comparación de modelos estadísticos para el cálculo de los umbrales de α - y β -pinene

Cml/m ³	Ln(C)	n	r	P_{obs}	Modelo 1		Modelo 2		Modelo 3	
					P_{est}	Log Veros.	P_{est}	Log Veros.	P_{est}	Log Veros.
α- pinene										
0,004	-5,52	24	11	0,458	0,371	-16,93	0,387	-16,80	0,412	-16,66
0,020	-3,91	24	8	0,333	0,408	-15,56	0,444	-15,89	0,473	-16,24
0,040	-3,22	24	13	0,542	0,432	-17,13	0,480	-16,73	0,508	-16,61
0,100	-2,30	24	14	0,583	0,473	-16,89	0,540	-16,39	5,563	-16,32
0,200	-1,61	24	16	0,667	0,511	-16,46	0,593	-15,55	0,609	-15,45
0,500	-0,693	24	15	0,625	0,571	-16,02	0,669	-15,98	0,673	-16,00
1,000	-2,30	24	20	0,833	0,622	-13,40	0,727	-11,57	0,722	-11,64
2,500	0,916	24	17	0,708	0,692	-14,50	0,797	-15,02	0,782	-14,85
5,000	1,61	24	19	0,792	0,743	-12,44	0,843	-12,50	0,823	-12,36
25,000	3,22	24	22	0,917	0,847	-7,41	0,920	-6,89	0,897	-6,94
β- pinene										
0,004	-5,52	24	11	0,458	0,371	-16,93	0,349	-17,16	0,334	-17,35
0,020	-3,91	24	10	0,417	0,408	-16,30	0,368	-16,42	0,336	-16,64
0,040	-3,22	24	12	0,500	0,432	-16,86	0,381	-17,33	0,338	-17,96
0,100	-2,30	24	8	0,333	0,473	-16,24	0,407	-15,55	0,346	-15,28
0,200	-1,61	24	11	0,458	0,511	-16,69	0,433	-16,58	0,358	-17,06
0,500	-0,693	24	9	0,375	0,571	-17,74	0,479	-16,40	0,393	-15,89
1,000	-2,30	24	8	0,333	0,622	-19,35	0,523	-17,02	0,445	-15,90
2,500	0,916	24	13	0,542	0,692	-17,73	0,591	-16,67	0,558	-16,57
5,000	1,61	24	18	0,750	0,743	-13,50	0,648	-14,07	0,672	-13,85
25,000	3,22	24	21	0,875	0,847	-9,12	0,779	-9,77	0,894	-9,09
Suma						-307,21		-300,32		-298,63

Tabla B.8 – Resumen del análisis de los modelos de comparación de los umbrales de α - y β -pinene

Modelo	Parám.	Evaluador		Log veros.	Comparación	Desviación	GL	P, $pruebas\chi^2$
		1	2					
1	t b	-0,591 0,459		-307,2				
2	t b	-0,723 0,506	-1,831	-300,3	1 vs. 2	13,79	1	0,00020
3	t	-0,787	-1,581	-298,3	1 vs. 3	17,16	2	0,00019
	b	0,426	1,016		2 vs. 3	3,37	1	0,066

Bibliografía

- [1] AITKIN, M., ANDERSON, D., FRANCIS, B. and HINDE, J. *Statistical Modelling in GLIM*, Clarendon, Oxford 1989
- [2] ASTM E679-91(1997), *Standard Practice for Determination of Odor and Taste Thresholds by a Forced-Choice Ascending Series Method of Limits*
- [3] AMOORE, J.E. Specific anosmia and the concept of primary odors. *Chemical Senses and Flavor* **2**, 1977, pp. 267-281
- [4] BUTTERY, R.G. Qualitative and sensory aspects of flavor of tomato and other vegetables and fruits. In *Flavor Science: Sensible Principles and Techniques*, ACREE, T.E. and TERANISHI, R., Chapter 8, pp. 277-278, ACS Professional Reference Book, American Chemical Society, Washington, DC, 1993
- [5] DAVIS, H.K., GEELHOED, E.N., MACRAE, A.W. and HOWGATE, P. Sensory analysis of trout tainted by diesel fuel in ambient water. *Water Science and Technology* **25**(2), 1992, pp. 11-18
- [6] DEVOS, M., PATTE, F., ROUAULT, J., LAFFORT, P. and VAN GEMERT, L.J. *Standardized Human Olfactory Thresholds*. IRL Press, Oxford 1990
- [7] DOTY, R.L., GREGOR, T. and SETTLE, R.G. Influences of intertrial interval and sniff bottle volume on the phenyl ethyl alcohol olfactory detection threshold. *Chemical Senses*, **11**, 1986, pp. 259-264
- [8] DOTY, R.L., DEEMS, D.A., FRYE, R., PELBERG, R. and SHAPIRO, A. Olfactory sensitivity, nasal resistance, and automatic function in the multiple chemical sensitivities (MCS) syndrome. *Arch. Otolaryngol. Head Neck Surg.*, **114**, 1988, pp. 1422-1427. (Description of the University of Pennsylvania's Dynamic Air-Dilution Olfactometer)
- [9] EN 13725, *Air Quality — Determination of odour concentration by dynamic olfactometry*
- [10] FAZZALARI, F.A. *Compilation of Odor and Taste Threshold Values Data*. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, 1978
- [11] GUADAGNI, D.G. and BUTTERY, R.G. Odor threshold of 2,3,6-trichloroanisole in water. *J. Food Science*, **43**, 1978, pp. 1346-1347
- [12] VAN HARREVELD, A.Ph., HEERES, P. and HARSSEMA, H. A review of 20 years of standardization of odor concentration measurement by dynamic olfactometry in Europe. *J. Amer. Waste Management Assoc.*, **49** (5)
- [13] MACMILLAN, N.A. and CREELMAN, C.D. *Detection Theory, A User's Guide*, Cambridge University Press, 1991, 395 pp
- [14] van GEMERT, L.J. and NETTENBREIJER, A.H. *Compilation of Odour Threshold Values in Air and Water*. Central Institute for Nutrition and Food Research TNO, Zeist, Netherlands, 1977. Supplement V, 1984