Tratamiento Estadístico de Análisis Sensoriales

Jaime E. Villate
Faculdade de Engenharia, Universidade do Porto
Rua dos Bragas, 4099 Porto, Portugal

25 de Abril de 1996

1. Introducción

El análisis sensorial tiene una gran importancia en la definición y control del sabor de los alimentos. Como no existe una definición exacta en términos físicos o químicos de los sabores y aromas de los alimentos, es necesario recurrir a los catadores para determinar estas propiedades. En la interpretación de resultados de análisis sensoriales surgen varias dificultades:

- Para poder caracterizar el sabor o apariencia de los alimentos son necesarias muchas variables sensoriales.
- Los resultados obtenidos por diferentes catadores son distintos, e incluso los resultados obtenidos por el mismo catador no coinciden entre diferentes sesiones.

La primera dificultad, el número elevado de variables, se puede resolver por medio de la identificación de las llamadas componentes principales: combinaciones de las variables que mejor describen las diferencias. Las discrepancias en los resultados obtenidos son debidas a varias fuentes que pueden ser inherentes o corregibles:

- Diferentes definiciones de los términos usados por diferentes catadores.
- Uso de diferentes "notas" medias en la evaluación de cada catador.
- Empleo de diferentes escalas de evaluación.
- Diferencias inherentes al sentido del gusto de los diversos catadores.

Las primeras tres fuentes de error pueden ser disminuidas, mientras que la última está siempre implícita en cualquier análisis sensorial. Existe un formalismo matemático (Análisis de Procrustes) que permite modificar los resultados obtenidos, respetando las diferencias de opinión, para minimizar las discrepancias entre catadores y obtener un buen consenso.

De esta forma el tratamiento de los resultados de análisis sensoriales requiere el uso de dos técnicas estadísticas: análisis de Procrustes y análisis de componentes principales.

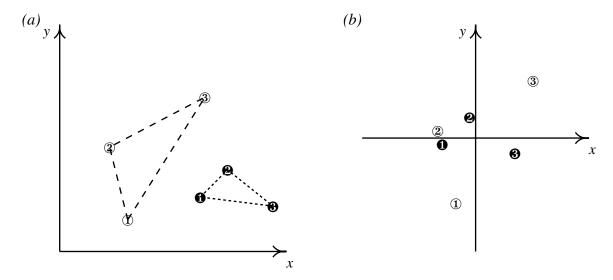


Figura 1: (a) Ejemplo de resultados de un análisis sensorial de tres objetos, representados por los números 1, 2 y 3. Los tres números negros son los resultados obtenidos por uno de los catadores y los tres números blancos los obtenidos por el otro. (b) Los mismos resultados, después de trasladar el centroide de cada uno de los triángulos al origen. Esta transformación corresponde a una corrección de los valores medios de evaluación usados por cada catador.

2. Análisis de Procrustes

En un análisis sensorial, los resultados pueden ser interpretados como puntos en un espacio de muchas dimensiones. Cada objeto analizado se representa por un punto cuyas coordenadas son los valores de las variables medidas. La definición de los ejes de coordenadas y de las escalas en este espacio pueden ser bastante distintas para dos catadores diferentes, y por lo tanto los puntos obtenidos por diferentes catadores no coinciden. La Figura 1a presenta un ejemplo en el cual tres objetos, representados por los números 1,2 y 3, fueron analizados por dos catadores, los cuales midieron para cada objeto dos variables (x y y en la Figura). Los resultados obtenidos por uno de los catadores son los números negros y los obtenidos por el segundo catador son los números blancos.

Si definimos como valores de consenso los valores promediados de todos los catadores, una medida del grado de discordia entre catadores es la suma de los cuadrados de las distancias de los puntos hasta los respectivos valores de consenso, llamada Estadística de Procrustes. El método de Procrustes [1], consiste en la aplicación sucesiva de varias transformaciones hasta minimizar la estadística de Procrustes. Los tres tipos de transformaciones permitidas son: translaciones, rotaciones y cambios de escala, cada una de ellas realizada independientemente en los espacios correspondientes a cada catador. Las translaciones corrigen el hecho de que los valores medios atribuidos por cada catador son diferentes. Las rotaciones corrigen posibles diferencias en la definición de las variables usadas por parte de cada catador. Finalmente, el cambio de escala corrige las escalas de evaluación de los catadores.

Los puntos correspondientes a los diversos objetos forman una figura geométrica en el espacio de n dimensiones. Las figuras obtenidas por cada catador normalmente tienen una

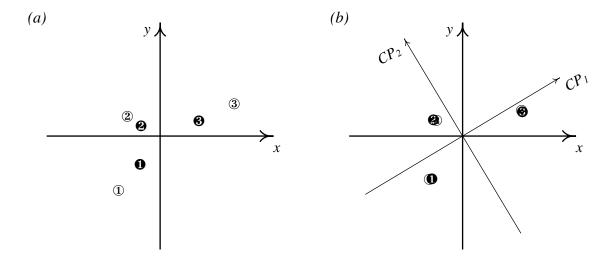


Figura 2: (a) Los datos de la Figura 1b después de ser rotados. Los resultados de cada uno de los dos catadores rotan en direcciones opuestas, aproximándose de los valores del "consenso". (b) Resultados finales después del cambio de escala. Los resultados de uno de los catadores fueron ampliados y los del otro reducidos, aproximando los dos resultados del valor de consenso. Los ejes CP_1 y CP_2 son las dos componentes principales.

cierta semejanza. Por ejemplo en la Figura 1a los datos obtenidos por cada catador forman dos triángulos bastante similares pero con diferentes escalas y posiciones. El objetivo del método de Procrustes es obtener la figura geométrica (consenso) que mas se parezca a la obtenida por cada uno de los catadores. En ejemplos reales son tantas las variables que es imposible descubrir visualmente las semejanzas o diferencias entre catadores, mientras que el método de Procrustes funciona igualmente, independientemente del número de variables o catadores, siendo la única limitación el aumento del tiempo de cómputo a medida que el número de variables o catadores aumenta.

Otra gran ventaja de este método es que comparando las estadísticas de Procrustes de los catadores se puede identificar quienes son los mejores catadores. Por ejemplo si el análisis sensorial fue hecho por un grupo de varios voluntarios y alguno de ellos no tomó muy en serio su trabajo, "inventando" los resultados, eso se podrá descubrir al ver que la estadística de Procrustes correspondiente a sus resultados es mucho mayor que la de los otros.

Las Figuras 1 y 2 muestran un ejemplo simple de aplicación del algoritmo de Procrustes; estos resultados fueron obtenidos por medio de un programa de computador desarrollado por el autor, basado en el algoritmo propuesto por Arnold y Williams [2]. En la Figura 1a aparecen los datos iniciales; las dos variables medidas están en los ejes x y y, siendo cada uno de los tres objetos analizados representado por un número. Este ejemplo hipotético fue exagerado para mostrar una situación en la cual hay una gran semejanza entre los resultados obtenidos por los dos catadores, pero por estar usando diferentes escalas de medición y diferentes combinaciones de las dos variables, los puntos aparecen bastante separados.

El primer paso (Figura 1b) consiste en trasladar los resultados de cada catador hasta que los centroides de los resultados de los dos catadores coincidan. Es conveniente para los

próximos pasos redefinir el origen en el centroide común; esto no constituye ningún problema, pues al final se podría trasladar el origen nuevamente al punto inicial, o simplemente interpretar los valores de las variables como valores relativos y no absolutos.

Los resultados son después rotados (Figura 2a). El ángulo que deben rotar los resultados de cada catador se determina matemáticamente como el valor que minimice la estadística de Procrustes; gráficamente estos ángulos son los necesarios para que los dos triángulos estén orientados en la misma dirección.

Finalmente se puede reducir mas la estadística de Procrustes por medio de cambios de escala. En el caso de la Figura 2a, la escala usada por el catador correspondiente a los números negros debe disminuir, y la del otro catador aumentar para que los valores se aproximen a los valores medios. El resultado óptimo obtenido es el de la Figura 2b. Los resultados finales no coinciden exactamente, pues los triángulos iniciales no eran exactamente semejantes en el sentido geométrico. Esto se traduce matemáticamente en el hecho de que la estadística de Procrustes final no es exactamente cero; su valor permite estimar que tanto acuerdo existe entre los catadores.

3. Componentes principales

Después de realizado el análisis de Procrustes, ya no nos preocupamos mas por la inexactitud inherente a las mediciones sensoriales y tratamos los valores de *consenso* como si fueran valores medidos con bastante precisión, como por ejemplo los resultados de análisis químicos. Normalmente el número de variables usadas en un análisis sensorial es bastante elevado; es posible encontrar unas pocas combinaciones de las variables que sean las mas relevantes para caracterizar los objetos estudiados, usando el método de análisis de componentes principales (ACP).

No vamos a entrar en muchos detalles del método de ACP, sobre el cual se encuentra bastante información en la mayoría de los textos de estadística multivariable, como por ejemplo el libro de Morrison [3]. En rasgos generales, el método consiste en identificar la dirección en el espacio de n dimensiones (n= número de variables), a lo largo de la cual se encuentra la mayor desviación de los datos a partir del valor medio. Esta dirección constituye la primera componente principal y es la variable que mejor describe las diferencias entre objetos. Consecutivamente se van encontrando ejes perpendiculares a los anteriores que apunten en las direcciones donde los datos se desvían mas de los ejes ya definidos. Al final lo que se obtiene es otro sistema de n ejes coordenados, diferente del inicial, y con la ventaja que estos ejes (componentes principales), están ordenados de acuerdo con su grado de importancia en la diferenciación de los objetos. Normalmente solo son necesarias unas pocas de las n componentes principales para caracterizar los objetos.

En el ejemplo simple de la sección anterior, las dos componentes principales están indicadas en la Figura 2b por medio de los ejes CP_1 y CP_2 . Las desviaciones de los puntos a partir del origen son mayores a lo largo de CP_1 que a lo largo de CP_2 . En primera aproximación podríamos caracterizar los tres puntos por su valor de CP_1 únicamente; claro que el error en este caso es grande, pero en el caso de análisis con muchas variables normalmente se pueden eliminar varias sin introducir ningún error apreciable.

Desde el punto de vista matemático, el problema de encontrar las componentes principales resulta ser un problema simple. Basta calcular la matriz de covarianza entre las

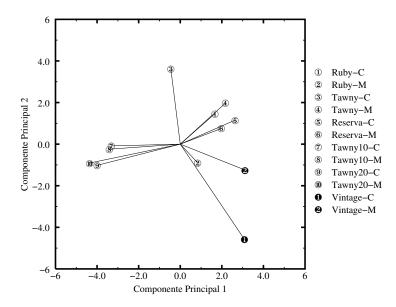


Figura 3: Caracterización del sabor de 12 vinos de Oporto, en función de sus dos primeras componentes principales. Fueron estudiados seis grupos de vinos (numerados del 1 al 6), y dos vinos de diferentes casas en cada grupo.

n variables y calcular sus *vectores propios*, los cuales apuntan en las direcciones de las componentes principales. El ordenamiento de las componentes principales, desde la mas importante hasta la menos importante, se hace ordenando los correspondientes valores propios de mayor a menor.

4. Análisis Sensorial de Vinos de Oporto

Para ilustrar las técnicas descritas en las secciones anteriores, vamos a mostrar algunos de los resultados de un caso real [4]; se trata de análisis sensoriales de vinos de Oporto. Las sesiones de análisis sensorial fueron coordinadas por João Brito e Cunha, del *Instituto del Vino de Oporto*, en 1994. Fueron analizados 12 vinos, de 6 categorías diferentes, por medio de un panel de 8 catadores especializados y las 45 variables medidas fueron agrupadas en 3 clases: apariencia, aroma y sabor.

El objetivo de este tipo de análisis es identificar las características que identifican cada clase de vino que lo distingue de los demás. Para eso es primero necesario definir los valores de consenso que mejor expresen el gusto de todos los catadores, usando el método de Procrustes y después identificar la combinación de variables (componentes principales) que mejor diferencian los diversos grupos. Los resultados obtenidos en el caso de las variables de sabor son presentados en la Figura 3: los puntos representan los valores de consenso de los 12 vinos en función de las primeras dos componentes principales. Los valores de la estadística de Procrustes también mostraron que el consenso entre catadores fue bastante bueno y todos ellos son igualmente confiables en sus resultados. Esto confirma que los catadores han sido bien entrenados en su oficio.

Es importante observar en la Figura 3 los seis grupos diferentes de vino de Oporto estudiados, cada grupo formado por dos variedades de dos casas diferentes. Se logró ob-

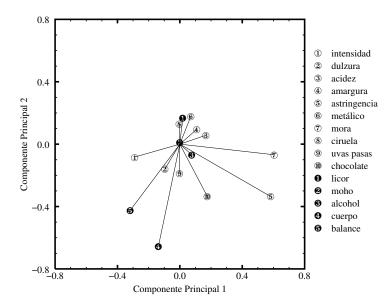


Figura 4: Definición de las dos primeras componentes principales de sabor del grupo de 12 vinos de Oporto analizados.

tener una buena clasificación de los 6 tipos de vinos especialmente en el caso de los vinos de mayor edad (10 y 20 años), ya que los grupos aparecen bien localizados y separados de los demás.

Una vez identificadas las componentes principales que caracterizan los diferentes tipos de vinos, podemos investigar a que combinación especial de sabores corresponde cada una de ellas. La Figura 4 muestra de manera gráfica la definición de las primeras dos componentes principales. Veamos por ejemplo la primera componente principal; los valores en el eje horizontal de los sabores representados en la Figura 4 son aproximadamente: mora=0.6, astringencia=0.6, balance=-0.3, intensidad=-0.3 (los otros valores son mucho mas pequeños y los vamos a ignorar). Esto quiere decir que la primera componente principal es igual a 0.6 veces la variable mora mas 0.6 veces astringencia, menos 0.3 veces balance y menos 0.3 veces intensidad. O sea que los vinos que tienen los mayores valores de la componente principal 1, son los de sabor mas astringente y menos intenso y balanceado, con mayor sabor a mora. Regresando a la Figura 3), vemos que los vinos de Oporto más añejos tienen un sabor intenso y balanceado mientras que los vinos mas jóvenes tienen un sabor a mora y mas astringente. La segunda componente principal representa primordialmente el "cuerpo" y "balance" de los vinos: entre menor sea el valor de la segunda componente, más cuerpo y balance tendrá el vino. De manera que los vinos "Vintage" tienen un sabor con mas cuerpo y balance que los vinos "Tawny".

Recordemos que el origen ha sido ubicado convenientemente en el centroide de los resultados y por eso un valor negativo realmente representa un valor por debajo de la media y no necesariamente un valor pequeño. En el caso de la Figura 4 existe una variable que si está cerca del origen por ser nula en todos los casos: el sabor a moho fue incluido dentro de las variables usadas, por ser un defecto que puede eventualmente aparecer en los vinos, pero que no estuvo presente en este caso.

Vemos pues como el método de Procrustes y el análisis de componentes principales

permiten el tratamiento de los resultados de análisis sensoriales. En el caso de análisis químicos o físicos se puede proceder directamente a identificar componentes principales. Los análisis sensoriales dependen fuertemente del catador y por eso es importante usar un panel de varios catadores, haciendo necesario el uso de métodos estadísticos como el método de Procrustes. El método de Procrustes también es útil para determinar la con-fiabilidad de los catadores y de los resultados obtenidos.

Referencias

- [1] J.R. Hurley y R.B. Catell (1962). "The Procrustes program: Producing direct rotation to test a hypothesized factor structure", *Behav. Sci.*, 7, 258-262
- [2] G.M. Arnold y A. Williams (1986). "The Use of Generalised Procrustes Techniques in Sensory Analysis", *Statistical Procedures in Food Research*, editor J.R. Piggott, Elsevier, pág. 233-253.
- [3] D.F. Morrison, Multivariate Statistical Methods, tercera edic., McGraw-Hill, 1990.
- [4] A. Antão, M. E. Cardoso, J. L. Faria e J. E. Villate (1995). "Caracterização sensorial dos vinhos do Porto: Tratamento matemático", comunicación oral en el Segundo Encuentro de Química de Alimentos, Universidade de Aveiro, Portugal.