



Instituto Politécnico Nacional

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIA
APLICADA Y TECNOLOGÍA AVANZADA**

UNIDAD QUERÉTARO

POSGRADO EN TECNOLOGÍA AVANZADA

**Desarrollo de una metodología de nariz
electrónica para el control de calidad en
alimentos basada en espectrometría de masas y
análisis multivariado**

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**MAESTRÍA EN TECNOLOGÍA
AVANZADA**

PRESENTA

Ing. Gerardo Díaz Murcio

Directores de Tesis:

Dr. Pedro A. Vázquez Landaverde

Dr. Eduardo Castillo Castañeda



Querétaro, Qro, Agosto de 2012



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de Querétaro siendo las 10:00 horas del día 1 del mes de Junio del 2012 se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de CICATA-QRO para examinar la tesis titulada:

Desarrollo de una metodología de nariz electrónica para el control de calidad en alimentos basada en espectrometría de masas y análisis multivariado

Presentada por el alumno:

Díaz	Murcio	Gerardo
Apellido paterno	Apellido materno	Nombre(s)
Con registro:		
A	1	0 0 3 4 9

aspirante de:

Maestría en Tecnología Avanzada

Después de intercambiar opiniones los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR LA TESIS**, en virtud de que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes.

LA COMISIÓN REVISORA

Directores de tesis

DR. PEDRO A. VÁZQUEZ LANDAVERDE

DR. EDUARDO CASTILLO CASTAÑEDA

DRA. NORMA GABRIELA ROJAS AVELIZAPA

DR. REYNALDO C. PLESS ELLING

DR. GONZALO VELÁZQUEZ DE LA CRUZ

PRESIDENTE DEL COLEGIO DE PROFESORES

DR. JORGE ADALBERTO HUERTA RUELAS



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN EN
CIENCIAS APLICADAS
Y TECNOLOGÍA AVANZADA
UNIDAD QUERÉTARO
DIRECCIÓN



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESIÓN DE DERECHOS

En la Ciudad de Santiago de Querétaro, Qro. el día 1 del mes Junio del año 2012, el que suscribe Gerardo Díaz Murcio alumno del Programa de Maestría en Tecnología Avanzada con número de registro A100349, adscrito al Centro de Investigación de Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada Unidad Querétaro (CICATA-Qro), manifiesta que es autor intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de Dr, Pedro Alberto Vázquez Landaverde y el Dr. Eduardo Castillo Castañeda y cede los derechos del trabajo intitulado **“Desarrollo de una metodología de nariz electrónica para el control de calidad en alimentos basada en espectrometría de masas y análisis multivariado”**, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección CICATA-Qro: Cerro Blanco No. 141, col. Colinas del Cimatario, Santiago de Querétaro, Qro., México. C.P. 76090. Teléfonos 01 (442) 229 08 04 o 01 (55) 5729 6000 Ext. 81002. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Gerardo Díaz Murcio

Agradecimientos

Dedicado especialmente a mis padres Honorio y Virginia a quienes les debo la vida, mi educación y la persona que soy ahora. Gracias por acompañarme en todos los momentos hermosos de mi vida, por ser pacientes, por apoyarme en los momentos difíciles y sobre todo por su inmenso cariño y amor que tienen hacia a mí, los quiero mucho mis viejitos queridos.

A mi Lupita hermosa por brindarme su amor y su cariño, por alegrarme el día con su bella sonrisa e iluminar mi vida en tiempos difíciles con su alegría. Gracias por ser mi novia y sobre todo por ser mi mejor amiga, te amo.

A mi familia por todos los momentos agradables que he pasado con ustedes, especialmente a mis primos que quiero como hermanos.

A mis amigos del CICATA: David, Rubén, Cyntia, los Padierna, Santi, Chispi, Roger, Rodrigo, Mayra, Gabo, Anel, Alán, Perla, Gine, Issel, Eloína, Priscila, Figueroa, José Luis, Iraís, Nuria, Susana, Fabiola, Regina, Max y a todos los que me faltaron que son muchos y muy grandes amigos. Gracias por todos los momentos divertidos que pase con ustedes y por tantas gratas experiencias.

Al mejor equipo de trabajo de todos, el jamás igualado Flavor Team, en el cual siempre estuve rodeado de bellas e inteligentes chicas desde mi llegada al CICATA. Gracias Lili, Ana, Angie, Chivis, Miriam, Yos, Jari, Luisa y a todos los que se integraron a este gran equipo por prácticas o estancias. Les agradezco por compartir sus conocimientos y sobre todo por la gran amistad que me brindaron, la cual siempre recordaré con gran cariño.

Al Dr. Castillo, al Dr. Ples, a la Dra. Norma y al Dr. Gonzalo por sus sabios consejos y recomendaciones a mi trabajo de tesis.

Al Dr. Pedro por recibirme en prácticas profesionales y por alentarme a estudiar la maestría. Gracias doctor por darme la oportunidad, por sus enseñanzas, por su paciencia y por sus sabios consejos.

Al todo el personal del CICATA por todo el apoyo que me brindaron y por la gran amabilidad que los caracteriza.

Índice General

CAPITULO 1: INTRODUCCIÓN.....	3
CAPÍTULO 2: ANTECEDENTES.....	5
2.1. CALIDAD EN ALIMENTOS.....	5
2.1.1. Calidad en vino	8
2.1.2. Calidad en queso.....	12
2.1.3. Calidad en jamón.....	16
2.1.4. Calidad en papa frita	22
2.2. ANÁLISIS DE SABOR.....	26
2.2.1. Compuestos de aroma	26
2.3. ANÁLISIS SENSORIAL.....	28
2.3.1. TÉCNICAS DE EVALUACIÓN SENSORIAL.....	29
2.3.1.1. Métodos afectivos. Panel de consumidores.....	29
2.3.1.2. Métodos analíticos. Análisis descriptivo.....	29
2.3.1.2.1 Componentes de un análisis descriptivo cuantitativo (QDA).....	30
2.3.2. PANEL ENTRENADO.....	31
2.3.2.1. Componentes de un panel entrenado.....	31
2.3.2.2. Desarrollo de un panel entrenado	32
2.4. MÉTODOS ESTADÍSTICOS AVANZADOS	34
2.4.1. ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES.....	34
2.5. NARIZ ELECTRÓNICA.....	35
2.5.1. COMPONENTES DE UNA NARIZ ELECTRÓNICA	37
2.6. REDES NEURONALES.....	38
2.6.1. TIPOS Y FUNCIONAMIENTO DE REDES NEURONALES	39
2.6.1.1. Fase de creación y desarrollo	39
2.6.1.2. Diseño de la arquitectura	39
2.6.1.3. Fase de Entrenamiento.....	40
2.6.1.4. Fase de validación o test.....	40
JUSTIFICACIÓN.....	41
HIPÓTESIS.....	42
OBJETIVOS.....	43
CAPÍTULO 3: MATERIALES Y MÉTODOS.....	44
3.1. DESARROLLO DE METODOLOGÍAS HS-SPME.....	44
3.2. PREPARACIÓN DE ALIMENTOS PARA LOGRAR DIFERENTES CALIDADES.....	46
3.2.1. Tratamientos para vino blanco.....	47
3.2.2. Tratamientos para queso manchego.....	47
3.2.3. Tratamientos para jamón cocido.....	47
3.2.4. Tratamientos para papas fritas.....	47

3.3. OBTENCIÓN DEL PERFIL DE COMPUESTOS VOLÁTILES.....	48
3.4. ENTRENAMIENTO DE UN PANEL DESCRIPTIVO CUANTITATIVO PARA LA EVALUACIÓN DE LOS ALIMENTOS EN ESTUDIO.....	48
3.4.1. Lluvia de ideas	49
3.4.2. Confirmación de atributos.....	49
3.4.3. Entrenamiento del panel sensorial.....	50
3.5. EVALUACIÓN DE LOS ATRIBUTOS SENSORIALES DE LOS 4 ALIMENTOS CON DIFERENTES CALIDADES.....	55
3.6. ANÁLISIS MULTIVARIADO DE COMPONENTES PRINCIPALES.....	55
3.6.1. Selección de los compuestos que determinan la diferencia en el perfil químico de los alimentos estudiados.....	55
3.7. ANÁLISIS POR MONITOREO DE IÓN MOLECULAR A LAS MUESTRAS DE LOS 4 ALIMENTOS.....	56
3.8. ENTRENAMIENTO DE UNA RED NEURONAL CON LOS DATOS OBTENIDOS EN EL ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES.....	56
3.8.1. Redes neuronales para clasificar de acuerdo a la calidad.....	57
3.8.1.1. Fase de creación.....	57
3.8.1.2. Entrenamiento de la red neuronal.....	59
3.8.1.3. Validación o test.....	60
3.8.2. Redes neuronales para la predicción de cantidad de atributo sensorial.....	61
CAPÍTULO 4: RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	62
4.1. METODOLOGÍAS HS-SPME.....	62
4.1.1. Técnica HS-SPME para vino blanco.....	62
4.1.2. Técnica HS-SPME para queso manchego.....	66
4.1.3. Técnica HS-SPME para jamón cocido.....	69
4.1.4. Técnica HS-SPME para papa frita	72
4.2 PERFIL DE COMPUESTOS VOLÁTILES.....	76
4.2.1. Perfil de compuestos volátiles de vino blanco.....	76
4.2.2. Perfil de compuestos volátiles de queso manchego.....	77
4.2.3. Perfil de compuestos volátiles de jamón cocido.....	77
4.2.4. Perfil de compuestos volátiles de papa frita.....	78
4.3. EVALUACIÓN DE LOS ALIMENTOS MEDIANTE DEL PANEL DESCRIPTIVO CUANTITATIVO.....	78
4.3.1. Evaluación de los productos de diferente calidad de vino blanco.....	78
4.3.2. Evaluación de los productos de diferente calidad de queso manchego.....	81
4.3.3. Evaluación de los productos de diferente calidad de jamón cocido.....	83
4.3.4. Evaluación de los productos de diferente calidad de papa frita.....	85
4.4. ANÁLISIS MULTIVARIADO DE COMPONENTES PRINCIPALES DE COMPUESTOS VOLÁTILES.....	87
4.4.1. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de vino blanco.....	87
4.4.2. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de queso manchego.....	89

4.4.3. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de jamón cocido.....	92
4.4.4. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de papa frita.....	95
4.5. ANÁLISIS POR MONITOREO DE IONES MOLECULARES	97
4.5.1. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de vino blanco....	98
4.5.2. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de queso manchego.....	99
4.5.3. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de jamón cocido....	100
4.5.4. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de papa frita.....	102
4.6. REDES NEURONALES.....	103
CONCLUSIONES.....	104
BIBLIOGRAFÍA.....	106
ANEXOS.....	112

Índice de Tablas

Tabla 1: Compuestos volátiles identificados en diferentes vinos.....	11
Tabla 2: Compuestos volátiles identificados en diferentes quesos.....	15
Tabla 3: Compuestos volátiles identificados en diferentes jamones.....	19
Tabla 4: Compuestos volátiles identificados en diferentes papas fritas.....	25
Tabla 5. Aplicaciones de narices electrónicas en la industria alimenticia.....	36
Tabla 6. Planes de trabajo para el establecimiento de las técnicas HS-SPME.....	45
Tabla 7. Preparación de los atributos sensoriales de vino blanco.....	51
Tabla 8. Preparación de los atributos sensoriales de queso manchego.....	52
Tabla 9. Preparación de los atributos sensoriales de jamón cocido.....	53
Tabla 10. Preparación de los atributos sensoriales de papa frita.....	54
Tabla 11. Áreas ajustadas de los compuestos principales de vino blanco.....	58
Tabla 12. Calificaciones de atributos sensoriales para vino blanco.....	61
Tabla 13. Atributos seleccionados por el panel sensorial para vino.....	79
Tabla 14. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de vino.....	79
Tabla 15. Atributos seleccionados por el panel sensorial para queso.....	81
Tablas 16. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de queso.....	81
Tabla 17. Atributos seleccionados por el panel sensorial para jamón.....	83
Tabla 18. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de jamón.....	83
Tabla 19. Atributos seleccionados por el panel sensorial para papa frita.....	85
Tabla 20. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de papa frita.....	85
Tabla 21. Compuestos principales seleccionados de vino blanco.....	88
Tabla 22. Compuestos principales seleccionados de queso manchego.....	90
Tabla 23. Compuestos principales seleccionados de jamón cocido.....	93
Tabla 24. Compuestos principales seleccionados de papa frita.....	95
Tabla 25. Iones de los compuestos principales para vino blanco.....	98
Tabla 26. Iones de los compuestos principales para queso manchego.....	99
Tabla 27. Iones de los compuestos principales para jamón cocido.....	101
Tabla 28. Iones de los compuestos principales para papa cocida.....	102

Índice de Figuras

Figura 1. Diagrama de la metodología para el desarrollo de las técnicas SPME.....	45
Figura 2. Panel de jueces.....	49
Figura 3. Sustancias de referencia para vino blanco	50
Figura 4. Arquitectura utilizada para la construcción de las redes neuronales.....	57
Figura 5. Valores de las variables independientes y dependiente.....	58
Figura 6. Selección de variables de entrada y de salida	59
Figura 7. Selección de datos para el entrenamiento	59
Figura 8. Selección de datos para la validación	60
Figura 9. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de vino blanco ..	63
Figura 10. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de vino blanco.....	64
Figura 11. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de vino blanco...	65
Figura 12. Evaluación del efecto de la adición de sal en los compuestos volátiles de vino blanco.....	66
Figura 13. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de queso manchego.....	67
Figura 14. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de queso manchego.....	68
Figura 15. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de queso manchego.....	68
Figura 16. Evaluación del efecto de la adición de sal en los compuestos volátiles de queso manchego...	69
Figura 17. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de jamón cocido	70
Figura 18. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de jamón cocido.....	71
Figura 19. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de jamón cocido..	71
Figura 20. Evaluación del efecto de la adición de sal en los compuestos volátiles de jamón cocido.....	72
Figura 21. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de papa frita.....	73
Figura 22. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de papa frita.....	74
Figura 23. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de papa frita.....	74
Figura 24. Evaluación del efecto de la agitación en los compuestos volátiles de papa frita.....	75
Figura 25. Evaluación del efecto del agua en los compuestos volátiles de papa frita.....	76
Figura 26. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de vino blanco.....	80
Figura 27. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de queso manchego.....	82
Figura 28. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de jamón cocido...	84
Figura 29. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de papa frita.....	86
Figura 30. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de vino blanco.....	87
Figura 31. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de vino blanco.....	89
Figura 32. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de queso manchego.....	90

Figura 33. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de queso manchego.....	92
Figura 34. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de jamón cocido...	93
Figura 35. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de jamón cocido.....	94
Figura 36. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de papa frita.....	95
Figura 37. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de papa frita.....	97
Figura 38. Comparación de cromatogramas de vino blanco a 4 °C.....	99
Figura 39. Comparación de cromatogramas de queso manchego a 4 °C.....	100
Figura 40. Comparación de cromatogramas de jamón cocido expuesto abiertamente.....	101
Figura 41. Comparación de cromatogramas de papas fritas en condiciones normales.....	103

RESUMEN

Una nueva técnica usando microextracción en fase sólida, espectrometría de masas y análisis multivariado fue desarrollada para el estudio de sabores en vino, queso, jamón y papas fritas. El objetivo del estudio fue el desarrollar de una metodología de nariz electrónica mediante espectrometría de masas y análisis multivariado para determinar la calidad de los alimentos antes señalados. Se desarrollaron y optimizaron metodologías de microextracción en fase sólida, con lo que se determinaron las mejores condiciones (temperatura, tiempo de extracción, contenido de sal y cantidad de muestra) para la extracción de los compuestos volátiles de cada alimento, los compuestos se llevaron a un análisis en cromatografía de gases-espectrometría de masas para obtener el perfil de compuestos de sabor de cada uno de los alimentos en estudio. Los datos obtenidos se analizaron mediante componentes principales para obtener los patrones de diferencia, para el sabor de cada alimento. Se realizó un análisis sensorial de cada alimento con la calidad diferente por un panel de jueces entrenados para determinar su perfil de sabor. Los resultados obtenidos del análisis por cromatografía de gases indicaron: 184 compuestos en productos de vino, 129 compuestos para productos de queso, 120 compuestos en los productos de jamón y 122 compuestos en productos de papa frita. Con la información obtenida sobre el tipo de compuestos encontrados e identificados en cada uno de los alimentos, se realizó un análisis de componentes principales para cada alimento, fueron seleccionados 10 compuestos principales que describen perfectamente el sabor. Lo anterior se confirmó con un segundo análisis de componentes principales utilizando sólo estos 10 compuestos, donde se observó la misma tendencia que en el primer análisis. Por último se construyó una red neuronal alimentada con los 10 compuestos elegidos como principales para cada alimento y los datos obtenidos por el panel sensorial, con la finalidad de evaluar la calidad del alimento, determinando el tipo y la cantidad de atributos sensoriales presentes en cada uno de ellos.

ABSTRACT

A new technique using solid phase micro extraction, mass spectrometry and multivariate analysis was developed for the study of flavors in wine, cheese, ham and chips. The aim of this study was to develop a methodology for electronic nose using mass spectrometry and multivariate analysis to determine the quality of the food mentioned above. Was developed and optimized methods of solid phase micro extraction, which were determined optimum conditions (temperature, time of extraction, salt content and amount of sample) for the extraction of volatile compounds in each food the compounds were analyzed with gas chromatography-mass spectrometry to obtain the profile of flavor compounds from each of the food under consideration. The data were analyzed using principal components analysis for the patterns of difference to the taste of each food. Sensory analysis was performed for each food of different quality, for a trained panel to determine its flavor profile. The results obtained from the analysis by gas chromatography indicated: 184 compounds in products of wine, 129 compounds for cheese products, compounds 120 ham products and 122 compounds in fried potato products. With the information obtained about the type of compounds founded and identified in each food, we conducted a principal components analysis for each food, 10 compounds were selected that perfectly describe the taste. This was confirmed with a second principal components analysis using only these 10 compounds, where we observed the same trend as in the first analysis. Finally, we built a neural network fed with the 10 compounds selected as primary for each food and the data obtained by the sensory panel, in order to assess the quality of food, determining the type and amount of sensory attributes present in each them.

CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN

Al lado de la demanda de alimentos sanos, siempre existe la necesidad de comer alimentos de buen sabor. Las empresas dedicadas a la producción de alimentos día con día, trabajan en desarrollar productos innovadores que correspondan a las demandas de los consumidores (Cayot, 2007).

Un alimento sano y de buen sabor esta correlacionado con el compartamiento que tienen los consumidores hacia el alimento y a la calidad del alimento. Estos dos parámetros son de importancia y siempre son tomados en cuenta por la empresas dedicadas a la producción de alimentos (Cayot, 2007).

La calidad de los alimentos es un concepto multifactorial: sabe bien, parece tradicional, es sano, es seguro, etc, son algunos de los conceptos que son tomados por los consumidores para describir la calidad de un alimento. Los alimentos tradicionales (vino, queso, pan, jamón, etc.) son utilizados para llevar la imagen de los alimentos de buen sabor en la gran gama de alimentos y al mismo tiempo ser percibidos como buenos para la salud (en relación con productos naturales, sin modificación química y sin aditivos) o malos para la salud (en relación con el alto contenido de grasa y los contaminantes microbianos). Al ser alimentos comunes o tradicionales en diferentes culturas, han sido materia de análisis en cuanto a sabor y salud se refiere (Cayot, 2007).

El sabor de un alimento puede ser evaluado de diferentes formas, una de ellas es mediante el análisis sensorial, el cual se basa en la percepción que se tiene através de los sentidos humanos. El análisis sensorial es un instrumento eficaz para el control de calidad y aceptabilidad de un alimento. El uso de pruebas sensoriales es complejo, requiere de tiempo, implica mucho trabajo y está sujeto a errores debido a la variabilidad de juicio humano. Sin embargo, no existen instrumentos mecánicos o eléctricos que puedan sustituir el dictamen humano. Para esto, el análisis sensorial se ha apoyado en el análisis químico, el cual ha poporcionado buenas correlaciones unidimensionales de los atributos sensoriales individuales asociados con el olor, la textura y el sabor, respectivamente (Meilgaard y col., 1999).

La búsqueda de compuestos de sabor y aroma por análisis químicos instrumentales, ha beneficiado en gran medida al desarrollo de la cromatografía de gases (CG). La CG es idealmente utilizada en los estudios de sabores y aromas, ya que es una poderosa herramienta de separación y con extrema sensibilidad (Jennings y col., 1997).

La cromatografía de gases se apoya en la espectrometría de masas para obtener un mejor análisis de los compuestos de sabor y aroma (Jennings y col., 1997). La espectrometría de masas es una técnica capaz de proporcionar información acerca de la composición elemental de las muestras así como de la estructura de las moléculas inorgánicas, orgánicas y biológicas; de la composición cualitativa y cuantitativa de las mezclas complejas; de la estructura y composición de superficies sólidas y de las relaciones isotópicas de átomos en las muestras (Skoog y col., 2001). Una alta sensibilidad inherente a la espectrometría de masas y la compatibilidad con CG hacen una combinación extremadamente valiosa. La espectrometría de masas es usada generalmente en el área de sabores para la identificación de algún compuesto desconocido o para actuar como un detector o selector de compuestos (Holland y col., 2002).

La necesidad creciente por parte de la industria de disponer de métodos de controles de calidad rápidos, baratos y objetivos, llevaron a pensar en la posibilidad de diseñar un nuevo tipo de instrumento que fuese capaz de emular al sistema olfativo humano. Para lograrlo, fue necesario diseñar un instrumento capaz de detectar, discriminar y cuantificar olores, de forma rápida y objetiva. El primer sistema capaz de detectar aromas de forma artificial se diseñó en la Universidad de Warwick en 1982 y recibió el nombre de nariz electrónica. Desde entonces, numerosos grupos de investigaciones industriales y académicos trabajan en este campo. Una nariz electrónica consta de una red de sensores, con especificidad parcial, que reaccionan con los olores y producen una señal que pueda ser amplificada y medida; las señales captadas por los sensores son procesadas por un software de reconocimiento de patrones, capaz de reconocer y clasificar olores. Las narices electrónicas son utilizadas en diversos campos de la industria y en la industria alimenticia se utilizan para monitoreo de frescura y madurez, investigaciones de vida de anaquel, evaluaciones de autenticidad de productos de alto valor agregado, clasificación de olores, detección de patógenos microbianos, entre otras aplicaciones (Schaller, 1997).

En el presente trabajo se aplica el concepto de nariz electrónica al análisis químico instrumental, desarrollando una metodología para evaluar la calidad de alimentos basada en espectrometría de masas y análisis multivariado, con la finalidad de evitar los problemas de variabilidad por causa de juicio humano que suelen presentarse en el análisis sensorial de un alimento.

CAPÍTULO 2

ANTECEDENTES

2.1. CALIDAD EN ALIMENTOS

La calidad puede definirse como "la aptitud para el uso" o, más apropiadamente a los productos alimenticios, "la aptitud para el consumo", lo que conduce a lo que los expertos en las normas ISO llaman satisfacción cliente-consumidor. Por lo tanto, la calidad puede ser descrita como los requisitos necesarios para satisfacer las necesidades y expectativas de los consumidores (Peri, 2005).

El término calidad se define según la norma DIN ISO 9000 como la totalidad de las funciones correspondientes a la capacidad de un producto para satisfacer sus requerimientos. Sin embargo, el concepto de calidad en alimentos debe ser considerado de manera más amplia, en base a las diferentes exigencias de los fabricantes, del consumidor, de la supervisión y de los órganos legislativos, con el fin de obtener productos sanos y seguros, sin descuidar el desarrollo económico y las consecuencias ecológicas asociadas con la calidad de los alimentos. Por lo tanto, los alimentos no deben ser evaluados únicamente en su seguridad y su valor nutricional, sino también en lo sensorial, en lo tecnológico, e incluso en lo ideológico o el valor religioso.

El consumidor demanda productos saludables con un alto valor nutricional con respecto a los macronutrientes como las proteínas, carbohidratos, grasas y fibra, así como a los nutrientes menores como las vitaminas y oligoelementos. Estos productos también deben ser superiores en sabor, aroma y textura (Muller, 2007).

Peri (2005) propone un modelo de análisis para definir la calidad de alimentos como un conjunto de necesidades de los consumidores las cuales incluyen:

1. *Requisitos de seguridad*, que generalmente se expresa como la ausencia de factores de riesgo. Cualquier incumplimiento de requisitos de seguridad representa un riesgo para la salud de los consumidores y es penado por la ley.

2. *Requisitos de los productos*, son establecidos por la ley o normas de carácter voluntario. Cualquier incumplimiento de estos requisitos debe ser considerado fraudulento y constituye un delito punible. A los ojos de los consumidores, los requisitos de seguridad y conformidad con las normas sobre productos se unen en la concepción de la autenticidad.

3. *Necesidades nutricionales*, son evidentemente muy importantes ya que el principal propósito de comer es satisfacer las necesidades nutricionales. El creciente interés en las propiedades curativas de algunos alimentos, se basa en las observaciones de que su consumo regular, tiene efectos beneficiosos sobre la salud y fortalece las defensas del cuerpo contra una serie de enfermedades. Los alimentos que tienen estas propiedades son los llamados alimentos funcionales.

4. *Requisitos sensoriales*. El hecho de que los requisitos sensoriales se perciban, los hace un importante medio de interacción entre productos y consumidores. El cerebro transforma las sensaciones en percepciones, nuestras percepciones sensoriales tienen lugar en un espacio que está estrechamente relacionado con las funciones cerebrales y otros contenidos, como la memoria, la cultura, valores, emociones, etc. De esta forma se crea una percepción integrada que determina las ideas y las emociones que inevitablemente se asocian con un determinado alimento. Esta percepción sensorial y psicológica de calidad es una de las áreas más importantes para el desarrollo de las ciencias de alimentos. La combinación de las necesidades nutricionales y sensoriales conduce a lo que llamamos calidad biológica y constituye el núcleo esencial de la calidad de los alimentos.

El conjunto de requisitos, de seguridad, de los productos, de nutrición y las necesidades sensoriales constituyen el marco de calidad del producto alimenticio. Sin embargo, las expectativas de los consumidores involucran más aspectos a satisfacer, estos pueden jugar un papel determinante en la elección de los consumidores.

5. *Requisitos relativos al contexto de producción*. Indicaciones sobre el origen o la tradición de un producto o el uso de la agricultura orgánica, tienen un fuerte impacto en los consumidores. Esto es esencialmente un efecto psicológico y emotivo que establece un alimento en resonancia con las expectativas que tiene sus raíces en la memoria, la cultura y la visión que tenemos de la vida, la naturaleza y el medio ambiente. Se pueden describir tanto los requisitos de contexto como los requisitos de calidad inmaterial. Su principal función es satisfacer las necesidades psicológicas y culturales y su atractivo para los consumidores.

6. *Requisitos éticos.* Estos se relacionan con el sistema de valores de los consumidores. Requisitos éticos son la agricultura orgánica, la defensa del medio ambiente, la defensa de la biodiversidad contra la producción en masa, el bienestar de los animales, entre otros. Una nueva sensibilidad ética está empezando a superponer la sensibilidad cultural y material acerca de los alimentos y creemos que todos debemos tratar de entender cómo y en qué medida las cuestiones éticas están involucradas en nuestras propias áreas específicas y especializadas. Los requerimientos del contexto de producción y los requisitos éticos no pueden ser verificados o percibidos, no hay manera de que el comer o el análisis de una manzana nos diga si las reglas de la agricultura biológica se han respetado. Por lo tanto estos requisitos son muy susceptibles al fraude y el engaño, que es más grave, porque esto viola las expectativas relativas a los valores éticos. Es por esta razón que el tercer grupo de requisitos, que son llamados los requisitos de garantía, están tomando más interés.

7. *Los requisitos de garantía.* Los procedimientos de certificación y trazabilidad tan frecuentemente mencionados en la legislación alimentaria europea, no son más que instrumentos que ofrecen garantías al consumidor. A diferencia de los métodos tradicionales de certificación en el análisis de productos, que se basan en la certificación de los comportamientos y en última instancia de las personas. La confianza no viene de una relación entre una persona y un producto, sino de una relación de persona a persona. Nada nos puede garantizar más que nuestra confianza personal en las personas que nos proveen de alimentos y su credibilidad se basa en nuestra percepción de su competencia profesional y la confiabilidad moral. Por último, es necesario considerar el hecho de que no se ofrecen los productos alimenticios en sí, sino en una combinación indivisible de productos y envases, que se presentan en un contexto de mercado donde los requisitos logísticos y económicos son fundamentales.

8. *Requisitos de envasado.* En los requisitos relacionados con el envasado, también se incluyen los requisitos estéticos en relación con su presentación y la información que se transmite al consumidor en la etiqueta. La facilidad de uso se ha convertido en un factor decisivo; esto concierne al transporte, conservación, elaboración o uso de los productos (alimentos preparados). Los consumidores tienden a preferir los productos que son más fáciles de manipular o utilizar y su deseo de conveniencia, es el terreno más fértil para los expertos en marketing.

9. *Requisitos del sistema de mercado.* Estos incluyen la disponibilidad del producto en el momento adecuado, en el lugar correcto y en la cantidad deseada. También incluyen su precio debido a que la relación calidad-precio es la síntesis final de las percepciones del consumidor para determinar sus preferencias y su elección.

De acuerdo con lo anterior, el comportamiento del consumidor y la percepción de la calidad de los alimentos son los principales parámetros a tener en cuenta. La calidad de los alimentos es un concepto multivariable y es necesario analizarlo para tener una mejor explicación de este. Alimentos tradicionales como el vino, queso, jamón, etc, son utilizados para llevar la imagen de los alimentos de buen sabor en la gran gama de alimentos y al mismo tiempo ser percibidos como buenos para la salud (en relación con productos naturales, sin modificación química y sin aditivos) o malos para la salud (en relación con el alto contenido de grasa y los contaminantes microbianos). Al ser alimentos comunes o tradicionales en diferentes culturas, estos alimentos han sido objeto de análisis en cuanto a sabor y salud se refiere. Por lo que estos dos aspectos deben ser mejorados en paralelo y ser claros para los consumidores, para así obtener un índice de calidad adecuado (Cayot, 2007).

2.1.1. CALIDAD EN VINO

El vino (del Latín *vinum*) es una bebida obtenida de la uva (especie *Vitis vinifera*) mediante la fermentación alcohólica de su mosto o zumo. La fermentación se produce por la acción metabólica de levaduras que transforman los azúcares del fruto en alcohol etílico y gas en forma de dióxido de carbono. El azúcar y los ácidos que posee la fruta *Vitis vinifera* hace que sean suficientes para el desarrollo de la fermentación. No obstante, el vino es una suma de un conjunto de factores ambientales como el clima, latitud, altitud, horas de luz, etc. (Jackson, 2008).

Cada una de las catas (análisis sensorial) de vino es una exploración de la calidad. Reeves y Bednar (1994) consideran que la calidad implica varios factores intrínsecos (físico) y extrínsecos (precio, prestigio, contexto). Sólo los factores intrínsecos son los que afectan directamente a la cata del vino. Sin embargo, los factores extrínsecos suelen ser muy importantes.

Entender el fundamento químico de la calidad es uno de los principales objetivos de los análisis sensoriales del vino. El principal problema es la ausencia de un concepto claro de lo que constituye la calidad del vino. La percepción de la calidad es altamente subjetiva. Las respuestas sensoriales humanas dependen principalmente de la experiencia, mecanismos de reflejos no instintivos. Como consecuencia, las preferencias de sabor son potencialmente manejables y sobre todo basadas en la cultura. El conocimiento y experiencia parecen ser los factores predominantes. Por ejemplo, la familiaridad incita a la discriminación de olores y con frecuencia aumenta la intensidad percibida y el agrado (Distel y Hudson, 2001; Mingo y Stevenson, 2007).

El análisis sensorial es particularmente frecuente en el caso del vino. Como se ha mencionado, la cata de vinos se utiliza regularmente para comprobar la calidad de los vinos. El vocabulario desarrollado por expertos de cata de vinos es amplio, pero a veces más poético que preciso. Por ejemplo, Castillo-Sánchez y col. (2006), estudiaron las variaciones de las propiedades sensoriales del vino inducidas por diversos protocolos de realización. Al mismo tiempo se utilizó espectrofotometría para medir la densidad del color y los vinos fueron catados por un panel sensorial. A los ocho expertos de este grupo se les pidió que evaluaran color, espuma, aroma y sabor de los vinos obtenidos con diferentes procesos de elaboración.

Los atributos presentados para el aroma fueron limpidez, intensidad y calidad. Los de sabor fueron limpidez, cuerpo y sensación bucal, armonía, e intensidad de sabor. Este método sensorial sencillo no fue suficiente para comprobar la calidad de los vinos y para seleccionar o eliminar algunos de los protocolos de elaboración de vino para estudios posteriores. Características sensoriales únicas están relacionadas con una gran variabilidad debido a las diferencias en los productores y a las variaciones estacionales (cosechas). Para evaluar la tipicidad, una de las preguntas recurrentes es sobre el uso de un panel de expertos o no. Se informó que los expertos no presentan una mayor sensibilidad, pero ellos saben mejor que palabras poner en las sensaciones de los clientes (Bende y Nordin, 1997).

El análisis sensorial puede ser realizado con diferentes propósitos. Por ejemplo, Ballester (2004) lo utilizó para el estudio de las diferentes etapas de tipicidad de los vinos blancos de Chardonnay. Los vinos blancos de uvas diferentes fueron presentados a un panel de expertos y de todos los vinos Chardonnay fueron reconocidos como típicos de la Chardonnay, pero algunos vinos de otras uvas se pusieron en la misma categoría. Posteriormente, los vinos fueron evaluados por dos vías: orthonasal y global (ortonasal, retronasal y las percepciones de sensación en la boca). Sólo los vinos Chardonnay estuvieron siempre en la misma categoría que indica que la tipicidad de Chardonnay se basa principalmente en los parámetros olfativos. De acuerdo a esto, se utilizó la olfatometría para determinar si algunos compuestos aromáticos específicos fueron los responsables de esta tipicidad.

De a lo anterior podemos decir que la calidad del vino depende de su composición química. Se sabe que más de 800 componentes orgánicos están presentes en el vino, lo que hace que su química sea obviamente compleja. Sin embargo, la gran mayoría de estos compuestos se producen en concentraciones por debajo de los umbrales de detección. Aun reconociendo el aumento sinérgico de detección, el número de compuestos sensorialmente importantes puede ser tan bajo como cincuenta compuestos en todo el vino en particular. De éstos, sólo unos pocos

grupos, sobre todo los azúcares, alcoholes, ácidos carboxílicos y fenólicos, afectan a los atributos sensoriales de prácticamente todos los vinos.

Ritchey y Waterhouse (1999) llevaron a cabo un análisis de las diferencias químicas entre los compuestos de alto volumen y ultra premium Cabernet Sauvignon de California. Las diferencias más marcadas se encontraban en el contenido de fenoles. Versiones ultra premium mostraron cerca de tres veces la concentración de flavonoides, con cinamatos y galatos cerca del 60% y 70%.

Gran parte que la interacción de los azúcares, ácidos, alcoholes y fenoles, generan lo que se denomina "equilibrio". Debido a que el equilibrio puede ocurrir también en los vinos dulces, secos, blancos, tintos, espumosos y fortificados, es claro que la interacción es químicamente desconcertante. El equilibrio es también influenciado por la fragancia. Los vinos tintos en su totalidad su equilibrio se puede desarrollar cuando los taninos se polimerizan durante el envejecimiento. El contenido de alcohol y acidez moderada de vino tinto también suelen contribuir al equilibrio. El equilibrio en vinos tintos ligeros se realiza generalmente con un contenido de alcohol inferior y una mayor acidez.

Otros componentes comunes que afectan el carácter de todos los vinos son los ésteres, aldehídos y alcoholes que caracterizan el olor vinoso básico de vino. El resto de los compuestos importantes sensoriales generarán el aroma de los vinos varietales y el ramo de sabores típicos en el vino. La mayoría de estos se producen en pequeñas cantidades. Su identidad química está siendo descubierta. Por lo tanto, una comprensión de los aspectos más interesantes y singulares de la química del vino está todavía en sus inicios.

La adaptación sensorial progresiva puede jugar un papel importante en la expresión de los compuestos aromáticos menores. Sin embargo, el origen químico de los fenómenos denominados "complejidad", "delicadeza" y "poder" es desconocido. Es casi sin duda, una función de la interacción de los compuestos aromáticos múltiples, pero por el momento esto es sólo una conjetura. Puede pasar décadas antes de que los orígenes químicos de la calidad del vino revelen sus secretos. En la Tabla 1 se muestra el listado de los compuestos volátiles más comúnmente encontrados en diferentes vinos.

Tabla 1
Compuestos volátiles identificados en diferentes vinos

<i>Vino blanco de Zalema^a</i> <i>(Vitis vinifera cv)</i>	<i>Vino de Ferno-Pires^b</i> <i>(Vitis vinifera L. var)</i>	<i>Vinos de albariño^c</i> <i>(Uva blanca de albariño)</i>
<i>Compuestos de carbonilo</i>	<i>Esteres</i>	<i>Compuestos C₆</i>
Acetaldehído	Etil isobutirato	(E)-3-Hexen-1-ol
Acetoína	2-metilpropilacetato	(Z)-3-Hexen-1-ol
Diacetilo (2,3-butanodiona)	Etil butanoato	
5-Furfural	Etil- 2-metilbutanoato	<i>Alcoholes</i>
Fenilacetaldehído	Etil 3-metilbutanoato	1-propanol
5-metilfurfural	3-metil-1-butanol acetato	2-metil-1-propanol
Hidroximetilfurfural	Etil hexanoato	1-butanol
b-damascenona	Hexil acetato	3-metil-1-pentanol
b-ionona	Cis-3-hexen-1-ol-aetato	2-feniletanol
	Etil E-2-hexanoato	
<i>Ésteres</i>	Etil 2-hidroxipropanoato	<i>Ésteres</i>
Etil isobutirato	metil octanoato	Etil butirato
Isovalerato de etilo	Etil octanoato	Etil 2-metilbutirato
Etil 3-hidroxibutirato	3-metilbutil octanoato	Etil 3-metilbutirato
Acetato de etilo	Etil 3-hidroxibutirato	Etil hexanoato
Acetato isoamilo	Etil nonanoato	Etil lactato
Acetato de feniletilo	Etil 2-hidroxihexanoato	Etil octanoato
Butirato de etilo	2-metilpropil octanoato	Etil decanoato
Etil hexanoato	Dietil succinato	3-metilbutil acetato
Étilico octanoato	Etil 9-decenoato	Hexil acetato
Etil decanoato	Isobutil decanoato	2-feniletil acetato
Lactato de etilo	2-etilfenil acetato	
Dietil succinato	Dietil pentanodioato	
Acetato de butilo	2 feniletil acetato	<i>Ácidos grasos volátiles</i>
Acetato de Isobutilo	Etil 4-hidroxibutanoato	Ácido butírico
Etil cinamato	Etil dodecanoato	Ácido hexanoico
Etil dihidrocinamato	2-metilbutil decnoato	Ácido octanoico
Etil furoato	2-feniletil-2-metilpropanoato	Ácido decnoico
Etil vanilato		Ácido dodecanoico
Metil vanilato	Etil tetradecanoato	
	Etil 4-etoxibenzoato	<i>Monoterpenos</i>
	Etil 2-hidroxi-3-fenilpropanoato	Linanol
<i>Alcoholes</i>		α-terpineol
1-butanol	Etil hexadecanoato	Citronelol
Isobutanol	3,4-Dimetoxibenzaldehido	Nerol
Alcohol isoamílico		
β-feniletanol	<i>Alcoholes</i>	
1-hexanol	Etanol	<i>Fenoles</i>
Z-3-hexenol	1-propanol	Guaiacol
Alcohol bencílico	2-metil-1-propanol	4-etilfenol
Metional	1-butanol	4-vinilguaiacol
Alcohol furfurilico	2-etil-1butanol	4-vinilfenol
Metional	4-metil-1-propanol	Vainillina
Alcohol furfurilico	3-metil-1-pentanol	
	1-hexanol	
<i>Ácidos</i>	Tras-3-hexen-1-ol	
Ácido propanoico	Cis-3-hexanol	
Ácido butírico	1-octanol	
Ácido isobutírico	2,3-butanediol	
Ácido isovalerico	1-nonanol	
Ácido hexanoico	1-decanol	

Tabla 1 (continuación)

Ácido octanoico	
Ácido decanoico	<i>Ácidos</i>
Ácido 2-metilbutírico	Ácido acético
	Ácido propanoico
<i>Fenoles</i>	Ácido isobutírico
Guaiacol	Ácido butanoico
4-etilguaiacol	Ácido 3-metilbutanoico
4-vivilfenol	Ácido hexanoico
4-vinilguaiacol	Ácido octanoico
4-alil-2,6,-dimetoxifenol	Ácido decanoico
m-cresol	
Vanillina	<i>Terpenoides</i>
Acetovanillona	Limoneno
	α -Terpineno
	Linalyl acetato
<i>Lactonas</i>	α -terpinoleno
γ -butirolactona	Geranil acetato
δ -octalactona	Linanol
δ -decalactona	Hotrienol
γ -nonalactona	α -terpineol
γ -decalactona	Citronelol
	Neolidol
<i>Tioles</i>	
2-metil-3-furantiol	<i>Otros</i>
4-mercapto-4-methyl-2-pentanona	3-hidroxi-2-butanona
	Benzaldehído
Furfuritiol	γ -butirolactona
3-acetato de mercaptohexil	Metional
3-mercapto-1-hexanol	Fenol
	Benzofenona

^a Adaptado de Gómez-Míguez y col., (2007); ^b Adaptado de Rocha y col., (2006); ^c Adaptado de Vilanova y col., (2010).

2.1.2. CALIDAD EN QUESO

El queso es un producto lácteo fermentado. Se cree que se originó en el Medio Oriente hace miles de años como una manera de conservar la leche. Hoy en día el queso disfruta de una popularidad sin igual sobre muchos otros alimentos manufacturados. Mantener y mejorar la calidad del queso y sus productos representa una búsqueda constante de los queseros y los investigadores. Sin embargo, el término "calidad" es demasiado genérico, dada la amplia gama de quesos elaborados. La evaluación de la calidad del queso es algo complicada, no sólo por la falta de conocimiento del efecto de los diferentes componentes bioquímicos en las propiedades del queso, sino también por la falta de métodos adecuados para caracterizar objetivamente muchos de los atributos de calidad. De hecho, varios métodos actuales de evaluación de la calidad del queso son rudimentarios utilizando el juicio subjetivo del examinador.

La falta de objetividad de los métodos y la inconsistencia de los resultados de las pruebas ha llevado a la industria y la academia a desarrollar nuevos métodos y dispositivos. En muchos casos los nuevos métodos han sido añadidos como pruebas de rutina para uso industrial, luego como herramientas útiles para los investigadores y el personal de la industria para mejorar la calidad del queso y/o para investigar las relaciones hasta ahora desconocidas entre estructura y función (Gunasekaran, 2008).

Battenfeld y Sorensen (2001), mencionan que la digestión proteolítica de las proteínas durante la maduración del queso es considerada como una reacción de múltiples pasos que implica la formación de péptidos bastante grandes y su digestión posterior en pequeños péptidos y aminoácidos libres antes de la transformación final en diversos compuestos aromáticos volátiles. Los pasos finales en el proceso proteolítico son resultado principalmente de la acción de las proteasas y peptidasas, de las bacterias lácticas utilizadas como cultivos iniciadores y de la proteólisis por la acción de las enzimas. A pesar de que las enzimas que intervienen son muy estables a altas temperaturas, su actividad es disminuida por los tratamientos de alta temperatura, tales como la pasteurización. Así, la maduración proteolítica de proteínas de suero de queso como desnaturalizado difiere de la del queso tradicional elaborado con leche cruda.

El estudio de la fracción volátil o aromática de alimentos lácteos como el queso, ha tomado importancia en los últimos años. Kubickova y Grosch (1997) analizaron la fracción volátil del queso Camembert y el resultado obtenido fue más de 100 compuestos identificados. Se utilizó una técnica de acoplamiento la cual consistía en espacio de cabeza estático y espectrometría de masas para caracterizar cinco quesos comerciales de tipo Camembert, entre los cuales tres fueron elaborados con leche cruda. El análisis estadístico mediante el procedimiento de validación cruzada, demostró que la caracterización de los quesos según el tipo de fabricación (leche cruda o tratada térmicamente) fue 93% correcta y la clasificación según la fase de maduración fue 100% correcta. Los autores indicaron que una etapa de pre-concentración de los compuestos volátiles en el espacio libre es obligatoria para caracterizar rápidamente este tipo de productos. La Tabla 2 muestra un listado de compuestos volátiles encontrados en diferentes quesos.

Lavanchy (1993) reportó un estudio que se refiere a un grupo de personas para realizar el análisis sensorial de quesos. El objetivo fue armonizar la formación del panel de cata y desarrollar un método común para la caracterización de quesos duros y semiduros. Características de superficie, sensaciones orales, mecánicas, geométricas y otras fueron estudiados para diferentes quesos como Parmigiano-Regiano fontina de Italia, Mahón en España y Comte de Francia.

Este enfoque (análisis descriptivo), se propuso por Rétiveau y col. (2005) como la mejor forma de caracterizar completamente las propiedades sensoriales del queso. Estos autores desarrollaron un

léxico general destinado a ser útil para los quesos franceses. A tal efecto, 43 muestras de quesos franceses fueron evaluadas por un panel de cinco asesores altamente capacitados por 120 horas de formación en todos los aspectos de las técnicas sensoriales y un mínimo de 1000 horas de pruebas sensoriales en general. Tenían experiencia en pruebas de una gran variedad de productos lácteos. Se determinaron 31 atributos sensoriales para estos quesos y al final se pudieron clasificar las muestras en siete categorías.

El aroma, como se ha mencionado, es de suma importancia como indicador de calidad y conformidad del producto, pero hay una imposibilidad práctica de emplear a los paneles sensoriales para el monitoreo continuo de aroma. Ampuero y Bosset (2003) informaron que las narices electrónicas tienen el potencial de cumplir con esta tarea. Una vez calibrada, la nariz electrónica puede llevar a cabo la evaluación de olores de forma continua a un bajo costo. El concepto de nariz electrónica se basa en el sistema olfativo de los mamíferos. Una vez que los compuestos volátiles alcanzan el epitelio olfativo, las interacciones de los olores con los receptores quimiosensoriales apropiados, hacen que las neuronas olfativas produzcan estímulos eléctricos que son transmitidos al cerebro.

De la misma manera, la base de la nariz electrónica es el análisis de la reactividad cruzada de una serie de sensores semi-selectivos. Las señales son procesadas a través de un programa de reconocimiento de patrones. En estos instrumentos es de prioridad un paso de muestreo seguido de la capacitación de las narices electrónicas basadas en las clasificaciones de olores significativos por un panel sensorial. Diversas aplicaciones de estos instrumentos han sido reportadas por diversos autores, lo cual indica que la clasificación para las distintas variedades de quesos sea posible. Esto fue hecho por Jou y Harper (1998) con cuatro muestras diferentes de queso suizo (0% de grasa, 33% de grasa, fuerte y suave) obteniendo resultados rápidos y precisos.

Tabla 2
Compuestos volátiles identificados en diferentes quesos

<i>Queso Gou da^a</i>	<i>Queso fuerte de Parmigiano-Reggiano^b</i>	<i>Queso cheddar^c</i>
<i>Aldehídos aromáticos de cadena ramificada</i>	Ácido acético	Metanediol
3-metilbutanal	3-metilbutanal	Dimetil sulfuro
2-metilbutanal	2-metilbutanal	2-butanona
Benzaldehído	2-pentanona	Metil butanoato
Fenilacetaldelido	2-pentanol	Diacetil
	3-metil-2-butanol	Etil butanoato
	Ácido propanoico	Dimetil disulfuro
<i>Aldehídos lineales</i>	3-metilbutanol	Metil-butanal
Pentanal	Tolueno	Etil pentanoato
Hexanal	2,3-butanediol	2-heptanona
Heptanal	2-hexanona	Etil hexanoato
Nonanal	Etil butanoato	Metil pirazina
Dodecanal	Ácido butanoico	Metilbutil butanoato
Tetradecanal	2-heptanona	2-octanona
Hexadecanal	2-heptanol	1-octeno-3-ona
2-nonenal	2,6-dimetilpirazina	2,5-dimetil pirazina
2-decenal	Pentil acetato	2,6-dimetil pirazina
2,4-heptadienal	Benzaldehído	Dimetil trisulfuro
2,4-decadienal	1-octen-3-ol	Metil propil pirazina
	2-octanona	2-etil-5-metil pirazina
<i>Quetonas</i>	Etil hexanoato	2-nonanona
2-pentanona	Limoneno	Trimetil pirazina
2-hexanona	Ácido hexanoico	Metoxi-2-metilbenceno
2-heptanona	Fenilacetaldelido	Dimetiletil pirazina
2-octanona	8-nonen-2-ona	Metional
2-nonanona	2-nonanona	Tetrametil pirazina
2-decanona	2-nonanol	Ácido acético
2-undecanona	Nonanal	2-nonenal
2-dodecanona	2-feniletanol	3,5-dietil 2-metil pirazina
2-tridecanona	2-dodecanona	2,3,5-trimetil-6 etil pirazina
2-pentadodecanona	Ácido octanoico	2-metil tioetanol
3-hidroxi-2-butanona	Etil octanoato	Ácido butanoico
	2-undecanona	Ácido isovalerico
<i>Ácidos volátiles de cadena ramificada</i>	Ácido decanoico	Dimetil tetrasulfuro
	Etil decanoato	Naftaleno
Ácido 2-metilpropanoico	Ácido dodecanoico	1,4-dietoxibenceno
Ácido 3-metilbutanoico		Ácido pentanoico
Ácido 2-metilbutanoico		2-metoxi fenol
		Ácido hexanoico
<i>Ácidos grasos libres</i>		2-feniletil alcohol
Ácido butanoico		Y-cyanotolueno
Ácido hexanoico		Ácido heptanoico
Ácido octanoico		Difenil éter
Ácido nonanoico		p-cresol
Ácido decanoico		δ-decalactona
Ácido undecanoico		Etil fenol
Ácido tetradecanoico		3-propilfenol
Ácido hexadecanoico		Ácido n-decanoico
		δ-dodecalactona
<i>Etil esterres</i>		
Etil hexanoato		
Etil octanoato		

Etil decanoato
Etil dodecanoato
Etil tetradecanoato
Etil hexadecanoato

Lactonas

γ-nonalactona
γ-undecalactona
γ-dodecalactona
δ-octalactona
δ-decalactona
δ-undecalactona
δ-dodecalactona
δ-tetradecalactona
δ-hexadecalactona

Compuestos de azufre

Dimetil disulfuro
Metional
Dimetil trisulfuro

Alcoholes

1-butanol
3-metil-1-butanol
Bencenometanol
2-feniletanol

^a Adaptado de Van Leuven y col., (2008); ^b Adaptado de Bellesia y col., (2003); ^c Adaptado de Frank y col., (2004).

2.1.3. CALIDAD EN JAMÓN

El jamón es un alimento tradicional valioso con rasgos de calidad única, que son influenciados principalmente por las características de la carne cruda (origen geográfico, raza del cerdo, régimen de alimentación y sistema de cría) y por las condiciones de elaboración (salado, curado y maduración). La producción de jamón curado es a menudo controlada por una denominación de origen protegida (DOP) a fin de lograr productos con características de alta calidad sensorial y de calidad reproducible (García y col., 1991). El origen geográfico de jamón es un parámetro relevante para sus características de calidad, ya que define las prácticas de procesamiento, es decir, tipo de materias primas, uso de las especias, además de los nitratos, las diferencias en el tipo y la duración del proceso de curado (Ruiz, 1998).

Uno de los atributos de calidad más importante de jamones curados en seco es su sabor único producido por una mezcla compleja de compuestos orgánicos volátiles (COV) que se ve influenciada por las características de las materias primas y las prácticas de procesamiento implementado (Shahidi, 1994). La mayoría de compuestos orgánicos volátiles del jamón curado obtenidos durante el proceso de curado, son el resultado de la oxidación de lípidos y de una mayor interacción con las proteínas, péptidos y aminoácidos libres. El perfil de compuestos orgánicos volátiles depende también cuantitativa y cualitativamente de los factores genéticos y de crianza los cuales influyen en la composición y en la maduración. Por lo tanto un perfil de sabor compuestos orgánicos volátiles puede ser utilizado para distinguir diferentes jamones en cuanto a su origen geográfico o el proceso de producción (Bolzoni, 1996). La Tabla 3 muestra un listado de compuestos volátiles encontrados en diferentes tipos de jamones.

Varios estudios que tratan con el perfil de compuestos volátiles de distintos tipos de jamones curados se han reportado incluyendo: Ibérico, jamones serranos españoles y jamones italianos como, Prosciutto di Parma, Prosciutto di San Daniele y Prosciutto Toscano. También se han estudiado las diferencias en el perfil de compuestos volátiles de diferentes tipos de jamón, con métodos de separación basados en cromatografía de gases (GC) precedidos por algún método de extracción como SPME y seguidos por la identificación de espectrometría de masas (Luna, 2005).

La espectrometría de masas de reacción de protones de transferencia (PTR-MS) es un método novedoso que ha sido aplicado con éxito para el seguimiento de compuestos orgánicos volátiles en varios modelos y sistemas de alimentos, así como la caracterización de alimentos y sus procesos de producción o de identificación de origen. PTR-MS se basa en la protonación de compuestos orgánicos volátiles que tienen una afinidad protónica mayor que la del agua y, en su versión básica, se basa en la detección de los iones producto de un espectrómetro de masas con cuadrupolo (Araghipour, 2008).

La calidad del jamón es determinada por varias características sensoriales. Los consumidores no entrenados en jamón no les es fácil discriminar entre jamones en términos de apariencia, textura, sabor y preferencia global con libre elección de perfiles. El aspecto, color, humedad, procesamiento, plasticidad, goma, textura, masticable, desmenuzable, fibroso y estructura de procesado, son términos que pueden ser útiles para un análisis descriptivo convencional. El aroma es también una característica sensorial de gran valor. Existen numerosos informes que describen los estudios de diferentes productos cárnicos. Se ha observado que un buen aroma de estos productos hace mayor su aceptación (Delahunty y col., 1997).

La carne puede ser considerada como un sistema de mezcla de componentes químicos diferentes, y cada componente afecta a la calidad física de forma independiente o en combinación con otros componentes. Por lo tanto, es razonable suponer que algunas de las relaciones existentes entre los componentes químicos, es decir, agua, proteínas, grasas, sal y ceniza, y los atributos físicos de los productos cárnicos, es decir, la ternura, dureza, elasticidad, la cohesión, gomosidad, masticabilidad y color, se deben tomar en cuenta (Cheng y Sun, 2005).

El análisis sensorial y químico combinados hacen posible medir muchos parámetros, pero esto no es práctico en condiciones reales. Es posible reducir el número de parámetros y elegir los que influyen en la calidad de los jamones cocidos de manera significativa con la ayuda de técnicas estadísticas como el análisis de componentes principales (PCA). Los PCA son simples combinaciones lineales de las variables originales. Parcelas de las puntuaciones permiten la identificación de la muestra, comprobando si son similares o diferentes, típicos o periféricos. Las variables más importantes son identificadas a partir de los pesos que se les asigna a cada variable (Ferreira y col., 2000).

La calidad del jamón está influenciada por diferentes características sensoriales. La más importante es el aroma. Hay una cantidad considerable de informes de diferentes productos de carne que han sido estudiados. Se observó que los más aromáticos de estos productos, han sido los mejor aceptados. El análisis sensorial ofrece información exhaustiva sobre la calidad del jamón, pero este método requiere un equipo entrenado y también es muy subjetivo. La calidad de los jamones es actualmente evaluado por expertos en sabor del jamón. Sin embargo, el proceso es tedioso y la calidad de los jamones no pueden ser controlados a intervalos frecuentes durante el proceso de curado (Virgili, 1996).

Por lo general, la determinación de compuestos volátiles de los alimentos se lleva a cabo a través de técnicas costosas, como la cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS), que requieren métodos de extracción complicados, pero el inconveniente más importante es que estas técnicas no son capaces de medir en tiempo real y el proceso en línea.

Recientemente, los dispositivos como las narices electrónicas emergen como una tercera posibilidad para el análisis de aroma perfil. La nariz electrónica consiste en una serie de sensores de gas con selectividad diferente, una unidad de recolección de señales y un software de reconocimiento de patrones. Es particularmente útil para el análisis de espacio de cabeza de muestras de alimentos líquidos o sólidos. Las razones de su utilización son la posibilidad de obtener mediciones directas de la muestra con poca manipulación, una fácil construcción, la oportunidad de tener un instrumento móvil y el hecho de que un solo instrumento podría ser utilizado en diversas aplicaciones con sólo modificar la configuración de la evaluación de datos (Schaller, 1998).

Por lo general, la discriminación entre los aromas aumenta con el número de los elementos sensores de la matriz, siempre que éstos respondan con características diferentes y con baja sensibilidad a la gama de olores aplicados. A partir de entonces, los diferentes tipos de sensores se han utilizado en estas matrices para identificar diferentes aromas.

Se ha propuesto una variedad importante de materiales para la matriz de sensores, tal vez los más competitivos son los semiconductores de óxido metálico, debido a su alta estabilidad química, alta sensibilidad, de fabricación sencilla y de bajo costo. En diferentes trabajos se han probado alrededor de 16 sensores de óxido de metal sobre la base de películas delgadas de SnO₂. Las características de estos sensores se basan en las reacciones de transferencia de carga que se producen durante las reacciones catalíticas de las moléculas en la superficie a altas temperaturas, que causan el cambio de resistencia eléctrica en el sensor. Así mismo, las respuestas medidas de varios jamones han sido estudiadas por técnicas de reconocimiento de patrones, como el análisis de componentes principales (PCA) y redes neuronales probabilísticas (PNN) (García, 2006).

Tabla 3
Compuestos volátiles identificados en diferentes jamones

<i>Jamón ibérico</i> ^a	<i>Jamón curado de San Daniele</i> ^b	<i>Jamón serrano</i> ^c	<i>Jamón cocido</i> ^d
<i>Ácidos</i>	<i>Alcoholes</i>	<i>Alcanos</i>	Sulfuro de hidrogeno
Ácido 2-metilpropanoico	Metanol	Pentano	Acetaldehído
Ácido 3-metilbutanoico	Etanol	Hexano	Etanol
Ácido 2-metilbutanoico	1-propanol	Heptano	1-propanol
Ácido 4-metilpentanoico	4-metil-1-penten-3-ol	Octano	3-metil nonano
Ácido hexanoico	2-metil-3-buten-2-ol	Nonano	Tolueno
Ácido octanoico	Isobutanol	Decano	Hexanal
Ácido nonanoico	n-butanol	Undecano	Dodecano
Ácido decanoico	1-penten-3-ol	Dodecano	5-dodeceno
Ácido dodecanoico	3-metil-1-butanol	2,2,4,6,6-pentametilheptano	3-dodeceno
Ácido acético	2-metil-1-butanol		4-dodeceno
<i>Alcoholes</i>	2-pentenol	<i>Alquenos</i>	D-limoneno
Etanol	1-hexanol	1,3-pentadieno	3-metil butanol
2-propen-1-ol	2-fenil-2-propanol	1-octeno	2-pentil furan
1-propanol		1-undeceno	Estireno
2-butanol	<i>Aldehídos</i>	2-undeceno	Tridecano
2-metilpropanol	Acetaldehído		1-hidroxi-2-propanona
2-metoxietanol	Butanal	<i>Aldehídos</i>	3-trideceno
1-butanol	3-metilbutanal	Etanal	1-hexanol
1-metoxi-2-propanol	2-metilbutanal	Propanal	3-nonanona
1-penten-3-ol	Pentanal	2-propenal	Dimetil trisulfuro
2-etoxietanol	2,4-hexadienal	Butanal	2-nonanona
3-metil-1-butanol	2-metil-2-butanal	Pentanal	Nonanal
2-metil-1-butanol	Hexanal	Hexanal	2-butoxi etanol
1-pentanol	2-metil-2-pentanal	Heptanal	1-heptanol
1-hexanol	2-hexanal	Octanal	3-octeno-2-ol
Ciclohexanol	2,4-octadienal	Nonanal	6-metil-5-heptona-2-ol
2-butoxi etanol	Heptanal	2-metilpropanal	Ácido acético

Tabla 3 (continuación)

1-octen-3-ol	2-heptanal	2-metil-2-propenal	Furfural
2-etil-1-hexanol	Octanal	2-metilbutanal	2-tetradecanol
Bencenoetanol	Decanal	3-metilbutanal	3-metil-2-octanol
		2-metil-2-butenal	2-etil hexanol
<i>Aldehídos</i>	<i>Hidrocarburos alifáticos</i>	2,4-deadienal	2-decanona
Acetaldehído	Pentano		Decanal
3-metilbutanal	2-penteno	<i>Quetonas</i>	2-nonanol
Hexanal	Hexao	2-propanona	Hexi benceno
Heptanal	Heptano	2-butanona	1,2-dimetoxi propano
Octanal	1-octeno	2-pentanona	Benzaldehído
Bencenoacetaldehido	2-octeno	2-heptanona	3,7-dimetil-1,6-octadieno-3-ol
Nonanal	4-octeno	2-octanona	1-octanol
2-metilundecanal	2-metilpentano	2-nonanona	2-metil benzofurano
	2-metil-2-pentano	2,3-butanediona	2-decanol
<i>Hidrocarburos alifáticos</i>		3-metil-2-pentanona	1-nonanol
2-metilpropeno	<i>Hidrocarburos cíclicos</i>	2,3-pentanediona	Acetofenona
Pentano	Isopreno	1-octen-3-ona	2- furan metanol
2-metilpentano	Ciclohexano	2-ciclohexen-1-ona	4-butoxi butanol
3-metilpentano	Metilciclohexano		Metil benceno
Hexano		<i>Alcoholes</i>	1-decanediol
3-metilhexano	<i>Hidrocarburos aromáticos</i>	Etolanol	
	Tolueno	1-butanol	2-metoxi fenol
Heptano	Etilbenceno	1-pentanol	Alcohol bencílico
Decano	o-xileno	1-hexanol	1,4-butanediol
Butilciclohexano			
Tridecano	m-xileno		Feniletilalcohol
Tetradecano	1,2,3-trimetilbenceno	1-heptanol	1-fenoxi-2-propanona
Pentadecano		1-octanol	2-metoxi-4-metil fenol
	<i>Quetonas</i>	2-propanol	Fenol
<i>Hidrocarburos aromáticos</i>	Acetona	2-butanol	3-fenoxi propanol
Metilbenceno	2,3-butanediona	2-pentanol	2-fenoxi propanol
Etilbenceno	2-butanona	2-hexanol	2-fenoxi etanol
1,3-dimetilbenceno	2-pentanona	2-metil-1-propanol	4-metil fenol
1,4-dimetilbenceno	3-metil-2-pentanona	1-metoxi-2-propanol	Ácido octanoico
1,2,4-trimetilbenceno	2-hexanona	1-penten-3-ol	pentadecanal
1,2,3-trimetilbenceno	2-hptanona	3-metil-1-butanol	
1,3,5-trimetilbenceno	3-octanona	2-butoxietanol	
Naftaleno	2-octanona	1-octen-3-ol	
	2-etilhexanona	2-etil-1-hexanol	
<i>Compuestos clorados</i>			
Cloroformo	<i>Ésteres</i>	<i>Ésteres</i>	
	Alil acetato	Etil acetato	
<i>Esteres</i>	Metil acetato	Etil butanoato	
Metil acetato	Etil acetato	Etil 2-metilbutanoato	
Etil acetato	Propil formato	Etil hexanoato	
Etil propanoato	Amil formato	Etil octanoato	
Etil butanoato	Isobutil acetato	Etil pentanoato	
Etil-2-hidroxi propanoato	Etilisovalerato	2-etilhexil 2-propenoato	
Etil-2-metil butanoato	Etilhexanoato	Etil decanoato	
Etil-3-metil butanoato			
3-metilbutil acetato	<i>Compuestos de sulfuro</i>	<i>Compuestos de benceno</i>	
Etil hexanoato	Metanediol	Tolueno	
Etil octanoato	Metiltiometano	Etilbenceno	
Etil decanoato	Dimetilsulfona	p-xileno	
	Dimetildisulfuro	m-xileno	

Tabla 3 (continuación)

<i>Furanos</i>	Dimetiltrisulfuro	p-etilfenol
2-furanmetanol		Etiltolueno
2-pentilfuran	<i>Esteres</i>	Estireno
5-etildihidro-2(3H)-furanona	2-metil-1,3-dioxolano	Trimetil benceno
5-pentildihidro-2(3H)-furanona		1,3-bis(1,1-dimetiletil)benceno
	<i>Terpenenos</i>	Benzaldehído
<i>Quetonas</i>	Limoneno	Fenilacetaldhído
2-propanona	Eucaliptol	Acetofenona
2-butanona		<i>Otros</i>
1-hidroxi-2-propanona		Dimetil disulfuro
2-pentanona		Dimetil trisulfuro
3-hidroxi-2-butanona		Tetrahidrofuran
3-metil-2-pentanona		Acetonitrilo
Ciclopentanona		2-butilfuran
2-heptanona		2-pentilfuran
3-octanona		Limoneno
<i>Compuestos de nitrógeno</i>		Dimetilpirazina
3-metilbutanonitrilo		Trimetilpirazina
Piridina		2,2-dicloroetanol
1-(H)-pirrol		Naftaleno
2,6-dimetilpirazina		2-metilnaftaleno
Trimetilpirazina		
<i>Compuestos de azufre</i>		
Dimetil sulfuro		
2-propen-1-tiol		
(E)-3-(metiltiol)-1-propeno		
Dimetil disulfuro		
Metil-2-propenil disulfuro		
Dimetil trisulfuro		
Di-2-propenil disulfuro		
<i>Terpenos</i>		
Alfa-pineno		
Camfeno		
Alfa terpineno		
1-limoneno		
Eucaliptol		
Gamma-terpineno		
Linalol		
Trans-ocimeno		

^a Adaptado de Muriel y col., (2004); ^b Adaptado de Gaspardo y col., (2008); ^c Adaptado Rivas-Cañedo y col., (2009); ^d Adaptado de Leroy y col., (2009).

2.1.4. CALIDAD EN PAPA FRITA

Para determinar los compuestos responsables del sabor de un producto alimenticio, el paso crucial consiste en seleccionar un método adecuado para el aislamiento de los compuestos de sabor. Se debe permitir la extracción de todos los compuestos que contribuyen al sabor del producto alimenticio, pero no alterar el perfil de compuestos volátiles característicos. La dificultad adicional en el aislamiento de los compuestos de aroma es su presencia en un amplio rango de concentraciones que van de ng/kg a mg/kg y sus umbrales de olor, que suelen ser inferiores a los límites de detección que se pueden obtener utilizando detectores convencionales de GC.

La cromatografía de gases-olfatometría (GC-O), además de la GC/MS, se utiliza generalmente para caracterizar un perfil de aroma de un producto alimenticio. Para ello, varios métodos de extracción para el aislamiento de los compuestos esenciales para el aroma de los alimentos han sido utilizados y descritos en la literatura, entre ellos están: SDE (destilación simultánea y extracción) (Nickerson y Likens, 1966) y los métodos de espacio libre como espacio de cabeza estático y dinámico y SPME (microextracción en fase sólida) (Pawliszyn, 1997). El método más tradicional, la SDE, es el método de elección para muchos análisis de productos alimenticios, debido a su versatilidad y su relativa simplicidad; sin embargo, las temperaturas elevadas aplicadas durante la destilación puede conducir a la formación de artefactos, en particular, cuando se trata de muestras de alimentos ricos en aminoácidos libres y azúcares que pueden interactuar mediante la reacción de Maillard para formar compuestos que no son originales en el alimento (Schieberle, 1995).

En el método SPME, se emplea una pequeña pieza de silicio fundido recubierto con la fase líquida o sólida, para extraer y concentrar los analitos. Debido a su robustez, simplicidad, las posibilidades de la automatización y la selectividad, es comúnmente utilizada para el aislamiento de compuestos de aroma, así como para propósitos de monitorear la calidad para cambios en los compuestos volátiles de los alimentos durante el proceso de almacenamiento (Kataoka y col., 2000).

Se han realizado estudios para encontrar métodos de extracción adecuados como SDE, SAFE y SPME, para la caracterización de mezclas de compuestos volátiles de papas fritas. Los compuestos aislados en papas fritas se han caracterizado utilizando cromatografía de gases-olfatometría (GC-O) y cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC/MS) (Majcher, 2009).

Las papas fritas son consideradas uno de los productos de aperitivo más popular del mundo. Por lo general, se preparan al freír las rebanadas de papa fresca en un baño de aceite vegetal. La reacción de los componentes lipídicos con el oxígeno en presencia de la luz y el calor es una fuente importante de malos olores y sabores en los alimentos y, sobre todo, en las papas fritas.

Durante el proceso de fritura, el aceite vegetal se encuentra bajo estrés térmico, lo que puede inducir la aparición de la rancidez, como consecuencia de reacciones de oxidación de los lípidos presentes en el aceite. Desde el punto de vista de la oxidación de los alimentos, los lípidos importantes son los que contienen ácidos grasos insaturados, especialmente ácido oleico y ácido linoleico. Las papas fritas se fríen en aceites que contienen una alta cantidad de todos ellos (Marsili, 1993).

Las insaturaciones son centros reactivos que puedan verse afectadas por la oxidación. Por lo tanto, cuanto mayor sea el número de enlaces dobles, mayor será la probabilidad de que los ácidos grasos reaccionen con el oxígeno para generar olores y sabores indeseables en el producto. La oxidación de los lípidos da como resultado la formación de productos de descomposición primaria y secundaria, incluyendo hidroperóxidos, carbonilos, alcoholes, ésteres, ácidos carboxílicos e hidrocarburos, que generalmente tienen un olor desagradable y pueden conducir a la rancidez. Varios factores pueden influir en la aparición de rancidez en las papas fritas, tales como las condiciones de almacenamiento, la presencia de antioxidantes, el tipo de aceite, el tiempo de fritura, el calor, la presencia de oxígeno y humedad, entre otros factores (Shen y col., 1999).

Dos aspectos muy importantes para los productores de papas fritas son la detección de la rancidez y sus malos olores y sabores asociados con la estimación de la vida útil. Básicamente, hay dos razones por las que es importante hacer un seguimiento al aceite el cual ha sido objeto de oxidación:

El conocimiento previo, es decir, una estimación, en la vida útil del aceite para freír, contribuye a reducir el costo del proceso de fritura. Hay una ventaja económica evidente cuando los productores de papas fritas pueden determinar la vida útil de los aceites de freír. El uso excesivo de aceite para freír, afecta en gran medida la calidad de los productos y causa efectos no deseados nutricionalmente (Che Man y col., 1999).

La segunda razón es un consumidor que demanda mayor calidad e inocuidad en los alimentos. De acuerdo con Marsili (2002), la industria de alimentos, tiene necesidades de desarrollo de equipos y técnicas para rastrear la calidad de materias primas y productos terminados, no sólo en la planta de producción, sino también durante el almacenamiento y venta. El seguimiento de olores y sabores durante las diferentes etapas de procesamiento debe llevarse a cabo para garantizar que los procesos se están operando correctamente. Los productos terminados deben ser controlados también para garantizar que no se han desarrollado sabores extraños. Todas estas mejoras contribuirían en gran medida a la calidad y la satisfacción del consumidor.

Hoy en día, existen alrededor de 360 procedimientos para verificar la calidad del aceite, ya sea durante el proceso de fritura o en productos terminados. La mayoría de los métodos bien establecidos para la evaluación de la rancidez se basan en la evaluación sensorial o análisis químicos. Algunos de estos métodos se revisan a continuación (Marsili, 1993):

- Análisis sensorial: Las muestras son evaluadas por un panel de expertos. Éste es un método lento y costoso. Se requiere que el panel integrado por personal altamente capacitado, sin embargo los resultados pueden ser algo subjetivos.
- Valor de peróxidos (PV): Éste método determina todas las sustancias, en términos de miliequivalentes de peróxido por gramo de muestra. Estas sustancias son generalmente peróxidos u otros productos similares de la oxidación de las grasas. Cuanto más alto sea el valor, mayor es la grasa oxidada y el mayor es la probabilidad de malos sabores y olores.
- Índice de saponificación (ADV): Este es un método de titulación para obtener la cantidad de hidróxido de potasio necesario para neutralizar los ácidos grasos libres hidrolizables con etanol al 95%. Cuanto mayor sea la ADV, mayor es el nivel de ácidos grasos libres presentes en el aceite. Los ácidos grasos libres indican hidrólisis indeseable, que se traduce en el deterioro del sabor.
- Índice de yodo (IV): Indica el número de enlaces dobles o grado de insaturación de los lípidos. Se pueden utilizar como una estimación de la estabilidad a la oxidación de los lípidos.
- Análisis por HPLC: Determinación de la composición de ácidos grasos del aceite. Esta técnica proporciona perfiles de ácidos grasos y es más informativo que el IV.
- Prueba de Rancimat: Medidas de la susceptibilidad a la oxidación del aceite. Una muestra de aceite se mantiene a 120 °C en un recipiente donde fluye el aire para extraer los compuestos volátiles de la cámara de aire. Estos compuestos volátiles se recogen en el agua. La conductividad del agua se controla y los resultados se expresan como horas Rancimat, que indican el momento en que ocurre la rancidez oxidativa. La rancidez provoca un fuerte aumento de la conductividad del agua. Como esta prueba es muy informativa acerca de la resistencia al enranciamiento de los aceites, esta se ha convertido en una referencia en la industria de aceites.

Tabla 4
Compuestos volátiles identificados en diferentes papas fritas

<i>Papas fritas^a</i>	<i>Papas cocidas^b</i>	<i>Papas a la francesa^c</i>
2-etilfuran	2-etilfuran	Etanol
Pentanal	Pentanal	2-propanol
1-penten-3-ona	1-penten-3-ona	Metil acetato
2-butenal	2-butenal	2,3-butanodiona
Hexanal	Hexanal	2-butanona
Etilbenceno	Etilbeneno	2-metilfuran
2-pentanal	2-pentanal	2-butanol
p-xileno	Heptanal	Metil 2-propanoato
Heptanal	d-limoneno	Tetrahidrofuran
d-limoneno	Metilbutil butanoato	2-metil-1-propanol
Metilbutil butanoato	Metil butanoato	Ácido acético
Butil butanoato	2-hexanal	1-penten-3-ol
2-hexanal	2-pentilfuran	2-pentanona
2-pentifuran	1-pentanol	1-hepteno
1-pentanol	Octanal	2-etilfuran
n-hexil acetato	1-octen-3-ona	2-vinilfuran
Octanal	2-heptanal	2-metil-2-butenal
1-octen-3-ona	Hexil propanoato	2-pentanal
2-heptanal	Nonanal	Metil 2-butanoato
Hexil propanoato	Butil hexanoato	1-pentanol
Nonanal	3-octen-2-ona	Tolueno
Butil hexanoato	Hexil butanoato	Metil 3-metilbutanoato
3-octen-2-ona	Etil octanoato	2-etil-5-metilfuran
Hexil butanoato	2- octenal	3-hexanona
3-octen-2-ona	1-octen-3-ol	2-metil-3-hexanona
Hexil butanoato	2,4-heptadienal	2-hexanona
3-etil-2-metil-1,3-hexadieno	Decanal	2-propilfuran
Etil octanoato	3,5-octadien-2-ona	1-octeno
2-octenal	6-undecanona	Ciclopentanona
1-octen-3-ol	2-decenal	Hexanal
2,4-heptadienal	2,4-nonadienal	Acido butanoico
Decanal	4-etilbenzaldehido	2-octeno
3,5-octadien-2-ona	2-undecenal	Propilciclopentano
6-undecanona	2,4-decadienal	2-hexanal
Benzaldehído	1-dodecen-3-ol	2-heptanona
2-nonenal	2-dodecenal	Estireno
n-octanol		Heptanal
Hexadecano		Acetilfuran
Hexil hexanoato		Propilciclohexano
Undecanal		Butilciclopentano
6-dodecnona		5-metilfurfural
2-decenal		1-heptanol
2,4-nonadienal		Fenol
4-etilbenzaldehido		Ácido hexanoico
2-undecenal		2-pentilfuran
2,4-decadienal		Octanal
1-dodecen-3-ol		Nonanal
2-dodecenal		2-nonanal
		Ácido benzoico
		Decanal
		1-undecanol

^a Adaptado de Lojzova y col., (2009); ^b Adaptado de Blanda y col., (2010); ^c Adaptado de Van Loon y col., (2005)

2.2. ANÁLISIS DE SABOR

El olor y el sabor se perciben en los sentidos del olfato y el gusto, respectivamente. De acuerdo a esto, se espera que estos dos sentidos puedan realizar una buena detección de materiales o sustancias de interés. La calidad del sabor y las sustancias químicas, se perciben en las células gustativas y olfativas, respectivamente, y de esta forma se puede utilizar el olor y el sabor, como una herramienta de discriminación. La función original del olfato y el gusto es detectar y obtener información dentro de una enorme masa de información externa (un gran número de sustancias químicas). Existe un elevado número de sustancias químicas implicadas en la producción del olor y el sabor, por lo que es importante obtener información de estas sustancias (Ghasemi-Varnamkhist, 2010).

Históricamente, la investigación sobre el sabor se ha centrado en el estudio de sustancias volátiles de alimentos o condimentos. La industria de los aromas venden estos componentes del sabor y los investigadores se han centrado en el estudio de estas sustancias. Es obvio, incluso para los escépticos, que el aroma es la clave para la percepción del sabor. El frío priva al cerebro de los estímulos al aroma y deja la percepción de sabor a los gustos básicos y a la respuesta química. Sin aroma, es muy difícil identificar el sabor de un producto alimenticio. Por lo tanto, es comprensible que exista atención en este componente del sabor. La percepción del sabor, lentamente, se reconoce como un sentido múltiple, dependiendo en gran medida de la información sensorial (por ejemplo, sabor, textura, apariencia, etc.) Por lo tanto, la industria y los académicos están empezando a ampliar sus definiciones de sabor incluyendo conceptos de percepción sensorial, gusto, textura y apariencia (Reineccius, 2006).

El análisis del sabor se inclina hacia el análisis de sustancias volátiles, por dos razones. La primera es que el aroma es de indudable importancia para la percepción del sabor. La segunda es que hay menos trabajo publicado en el análisis del gusto (sustancias no volátiles).

2.2.1. COMPUESTOS DE AROMA

La tarea de identificar los componentes aromáticos volátiles, especialmente en una matriz alimentaria es una de las tareas más difíciles que enfrenta un químico analítico. Un obstáculo fundamental es que los instrumentos de laboratorio no son tan sensibles a los olores como es el sistema olfativo humano. Stuiver (1958) calcula que tan sólo ocho moléculas de un olor potente pueden provocar a una neurona olfatoria y que sólo 40 moléculas pueden proporcionar una sensación de identificación. Al hacer algunas suposiciones acerca de la concentración en el aire frente a la absorción de la membrana olfativa, se postula que la nariz tiene un límite de detección

de olor teórico de alrededor de 10^{-19} moles, que supera incluso la instrumentación analítica más sensible. Las bajas concentraciones en las que estos analitos pueden estar presentes en un alimento y que tienen un significado sensorial, requiere que sean aislados del sistema de alimentos y concentrados para permitir el análisis instrumental. El hecho de que trazas de componentes aromáticos se distribuyen a través de una matriz de alimentos complica aún más el aislamiento del aroma (Reineccius, 2006).

Los métodos de aislamiento de aroma basados en la volatilidad se complican por el hecho de que el agua es el compuesto volátil y es muy abundante en los alimentos. Los métodos de aislamiento basados en la solubilidad, por ejemplo, extracción por solventes, se ven afectados por moléculas como proteínas que son grandes emulsionantes y estabilizadores de espuma, las cuales complican un proceso de extracción con disolventes orgánicos. Los hidratos de carbono suelen contribuir a la viscosidad, la formación de espuma, o las propiedades de la emulsión, lo que complica el aislamiento del aroma. El aislamiento del sabor y el análisis se hace difícil por el hecho de que los sabores abarcan un gran número de clases de productos químicos. Si se compone de una o pocas clases de compuestos, los métodos de aislamiento podrían centrarse en las propiedades moleculares características de una determinada clase de compuestos. Por el contrario, el químico debe intentar extraer con eficacia y concentrarse en alcoholes, aldehídos, ácidos, cetonas, aminas, carbonilos, heterocíclicos, aromáticos, gases, compuestos no volátiles, etc. El número absoluto de compuestos aromáticos en un alimento complica aún más el análisis del sabor. Un sabor natural tiene menos de 200 componentes identificados. De hecho, aquellos con menos de 200 componentes identificados, probablemente no han sido adecuadamente investigados. No es raro que sabores como el tostado (por ejemplo, carnes, café o chocolate) contenga cerca de 1000 componentes volátiles. Hasta la fecha, más de 7,000 sustancias volátiles se han encontrado en los alimentos (TNO, 1995).

Otro problema que complica el estudio instrumental del sabor es la inestabilidad. El producto alimenticio que se examina es un sistema dinámico, fácilmente sometidos a cambios en el sabor, mientras que se almacenan en espera de iniciar el análisis. El proceso de aislamiento del sabor puede iniciar reacciones químicas que alteran el perfil de sabor del alimento. Por lo tanto, se debe poner mucha atención en los componentes volátiles que se encuentran en un producto alimenticio y que son verdaderamente nativos de ese producto. Lamentablemente, una vez que se ha considerado cada uno de los puntos anteriores y se ha obtenido algún perfil de los compuestos aromáticos en un alimento, surge la pregunta de tratar de determinar la importancia de cada compuesto volátil para el sabor percibido. Este ha sido el tema de innumerables artículos de investigación en los últimos 30 años.

Se ha señalado repetidamente que no hay un único método de aislamiento o de análisis que proporcione una visión completa de los compuestos aromáticos en un alimento. El objetivo es encontrar métodos de análisis que pueda medir los componentes de interés para el analista. Pueden ser, por ejemplo, los compuestos que dan un sabor desagradable o los que dan una nota fresca a un alimento (Marsili, 2002; Mussinan y Morello, 1998).

Es por ello que el tratamiento de las muestras debe ser muy cuidadoso, así como el aislamiento de los compuestos de aroma, para asegurar que los compuestos que se extraen sean verdaderamente originales en el producto. Una vez analizados los problemas que se presentan al extraer los compuestos de aroma y habiendo obtenido el perfil de aroma de los alimentos, se tiene ahora el gran problema de dar la importancia de sabor a cada compuesto encontrado en el análisis (Reineccius, 2006).

2.3. ANÁLISIS SENSORIAL

El análisis sensorial es una disciplina muy útil para conocer las propiedades organolépticas de los alimentos, así como de productos de la industria farmacéutica, cosméticos, etc. La evaluación sensorial es innata en el hombre ya que desde el momento que se prueba algún producto, se hace un juicio acerca de él, decide si le gusta o disgusta y finalmente describe y reconoce sus características de sabor, olor, textura etc. El análisis sensorial se realiza a través de los sentidos y para ello es importante que los sentidos se encuentren bien desarrollados para emitir un juicio objetivo y no subjetivo (Meilgaard y col., 1999).

El análisis sensorial de los alimentos es un instrumento eficaz para el control de calidad y aceptabilidad de un alimento, ya que cuando ese alimento se comercializa, debe cumplir los requisitos mínimos de higiene, inocuidad y calidad del producto para favorecer su aceptación, más aún cuando debe ser protegido por un nombre comercial, en este caso los requisitos son mayores, ya que debe poseer las características que justifican su reputación como producto comercial.

El uso de pruebas sensoriales es complejo, requiere de tiempo, implica mucho trabajo y está sujeto a errores debido a la variabilidad de juicio humano. Sin embargo, no existen instrumentos mecánicos o eléctricos que puedan sustituir el dictamen humano. Por una parte, los análisis colorimétricos, textuométricos y químicos proporcionan buenas correlaciones unidimensionales de los atributos sensoriales individuales asociados con el olor, la textura y el sabor, respectivamente; pero por otro lado, los análisis físicos y químicos aíslan las características de tal manera que se graba una sola señal; en cambio, las respuestas sensoriales son más complejas debido a la integración de señales múltiples (Meilgaard y col., 1999).

La evaluación sensorial consta de los siguientes pasos para realizar un análisis confiable (Meilgaard y col., 1999):

1. *Definición del problema:* Se debe definir en forma precisa qué es lo que deseamos medir.
2. *Diseño de la prueba:* Es importante que el diseño no deje espacio a la subjetividad y tener en cuenta las fuentes conocidas de sesgo; así mismo debe reducirse al mínimo la cantidad de ensayos requeridos para obtener la precisión deseada de los resultados.
3. *Instrumentación:* Los sujetos de la prueba deben ser seleccionados y entrenados para dar un veredicto reproducible; el analista debe trabajar con ellos hasta que él perciba que la sensibilidad y la imparcialidad de los sujetos de la prueba proporcionan resultados correctos en una situación dada.
4. *Interpretación de los resultados:* Con el uso de la estadística el analista escoge la hipótesis nula y la hipótesis alternativa correctas y toma sólo las conclusiones que se justifican por los resultados.

2.3.1. TÉCNICAS DE EVALUACIÓN SENSORIAL

2.3.1.1. Métodos afectivos. Panel de consumidores

Los métodos afectivos representan una de las dos técnicas de evaluación sensorial mayormente usadas, su objetivo es evaluar la respuesta de los consumidores de un producto. Comunemente se realizan para el mantenimiento, mejora y optimización de productos; desarrollo de nuevos productos, evaluación del potencial del mercado, etc. Los evaluadores encargados son llamados jueces-afectivos o consumidores, los cuales no requieren de entrenamiento alguno, solo que deseen participar en la evaluación (Meilgaard y col., 1999).

2.3.1.2. Métodos analíticos. Análisis descriptivo

Estos métodos representan la contraparte de los análisis afectivos e involucran la detección y la descriiación de 2 aspectos sensoriales: los cualitativos y los cuantitativos, por parte de un panel entrenado de 5 hasta 100 jueces. Los paneles más pequeños de 5 a 10 sujetos son usados para evaluar productos con ventas moderadas, mientras que los paneles más grandes son usados para productos que se venden en grandes cantidades, tales como cerveza o bebidas ligeras, donde las pequeñas diferencias pueden ser importantes (Meilgaard y col., 1999).

2.3.1.2.1 Componentes de un análisis descriptivo cuantitativo (QDA)

Este método recurre a la preparación de personas para calificar ciertos atributos de interés en un producto en particular; las personas son llamadas jueces de panel entrenado, las cuales, bajo el entrenamiento de entre 20 y 120 h, son capaces de desarrollar habilidades para describir un producto sensorialmente (en cuanto a sabor y aroma) a detalle.

Sin embargo los panelistas, deben ser seleccionados de acuerdo a sus habilidades para discriminar diferencias en propiedades (atributos) sensoriales entre muestras de tipos específicos de productos. Para llevar a cabo un análisis QDA, es necesario formar un panel entrenado, con los siguientes componentes (Meilgaard y col., 1999):

A. Características: aspecto cualitativo

Se refiere a aquellos parámetros sensoriales percibidos que definen un producto. También son llamados atributos, características, notas de carácter, términos descriptivos, descriptores, o terminología. Un aspecto importante es que el panelista sin un buen entrenamiento puede tener conceptos muy diferentes de lo que significa un término. Los atributos que definen al producto pueden ser clasificados por sus características, ya sea de aroma, sabor, apariencia, textura, sensación en la piel, etc. (Meilgaard y col., 1999):

- Características de aroma
 - a. Sensaciones de olfato (vainilla, frutal, floral, mohoso, entre otros)
 - b. Factores de sensación nasal (frío, pungente, entre otros)

- Características de sabor
 - a. Sensaciones de olfato (vainilla, frutal, floral, chocolate, mohoso, rancio, entre otros)
 - b. Sensaciones de sabor (salado, dulce, amargo, agrio, entre otros)
 - c. Factores de sensación orales (cliente, frío, sensación de ardor, astringente, metálico, entre otros)

B. Intensidad: aspecto cuantitativo

La intensidad o aspecto cuantitativo de un análisis descriptivo expresa el grado al cual cada una de las características está presente, mediante la asignación de valores en una escala de medición. La validación y la confiabilidad de la terminología son altamente dependientes de la selección de la técnica de escalamiento y del exhaustivo entrenamiento de los panelistas con el uso de las escalas de referencia para la intensidad de diferentes atributos (Meilgaard y col., 1999).

C. Escalas comunes para el análisis descriptivo

- a) *Escalas categóricas*. Son grupos limitados de palabras o números, contruidos para mantener intervalos iguales entre las categorías. Una escala categórica del 0 al 9 es quizá la más usada en un análisis descriptivo (Lawless y Heymann, 1998).
- b) *Líneas de escala*. Son las más populares; su ventaja es que la intensidad puede ser calificada en cualquier punto discreto de una línea de 15 cm, contemplando las pequeñas diferencias de intensidad entre las muestras y no habiendo influencia sobre algún número favorito que dirijan a una desventaja (Moskowitz, 1995).

2.3.2. PANEL ENTRENADO

Esta sección está basada en la ASTM (1981), en su publicación especial 758, "Guía de selección y entrenamiento de los miembros del panel" y en la ISO (1993), "Guía para la selección y entrenamiento de asesores". El desarrollo de un panel sensorial merece una planeación respecto a las necesidades inherentes al panel, ya que el éxito o el fracaso del proceso del panel dependen estrictamente de los criterios y procedimientos usados y seleccionados por el panel sensorial. Para seguir una buena planeación, hay que tener en cuenta los componentes de un panel entrenado (Meilgaard y col., 1999).

2.3.2.1. Componentes de un panel entrenado

A. Personal

Se necesita una lista de candidatos, una organización de evaluación sensorial para implementar la selección, entrenamiento y mantención de los procedimientos así como una persona calificada para conducir el entrenamiento, llamado Líder (Meilgaard y col., 1999).

B. Instalaciones

El área física seleccionada para la selección, entrenamiento y el trabajo del panel debe de ser definida antes de su comienzo. Las instalaciones de un cuarto de entrenamiento deben de ser de

tamaño suficiente para que todos los panelistas y productos puedan ser localizados cerca del área de preparación de muestras (Meilgaard y col., 1999).

C. Colección de datos y su manejo

Se debe de contar con el personal, hardware y software requeridos para coleccionar y analizar los datos generados por el panel (Meilgaard y col., 1999).

D. Costos

Una vez que se tenga clara cuál es la necesidad o el problema, los costos pueden ser evaluados y administrados considerando el tiempo para llevar a cabo el desarrollo del panel (Meilgaard y col., 1999).

2.3.2.2. Desarrollo de un panel entrenado

- *Selección de los panelistas para un ensayo descriptivo*

Cuando se seleccionan los panelistas para el análisis descriptivo, el líder del panel necesita determinar las capacidades de cada integrante para detectar diferencias en las características presentes y sus intensidades, habilidad de describirlas, usando descriptores verbales para las características y métodos de escalamiento para las diferencias de intensidades así como la capacidad del razonamiento abstracto. Estos sujetos pueden desarrollar realmente una buena habilidad de diferenciar cuantitativamente los mismos descriptores en 2 muestras diferentes del mismo producto (Meilgaard y col., 1999).

- *Entrenamiento de los panelistas para ensayo descriptivo*

La mayoría de los programas para el entrenamiento de paneles descriptivos requiere entre 40 y 120 horas de entrenamiento. El tiempo necesario depende de la complejidad del producto, del número de atributos a ser interpretados y de los requerimientos de la validez y confiabilidad. Un panel con más experiencia proveerá más detalles con una mayor responsabilidad (Meilgaard y col., 1999).

A. Desarrollo de la terminología

El desarrollo de un léxico para un producto, a menudo es un proceso de tres pasos. En el primero, una gama completa de productos se presenta al panel como marco de referencia. A partir de este marco de referencia, el panel genera una lista larga y original de descriptores. En la segunda etapa, la lista original contiene muchos términos que se traslapan y es rearmada y reducida a una lista final de descriptores a evaluar el producto. La tercera consiste en la elección de productos o referencias externas que representan un término seleccionado (Meilgaard y col., 1999).

B. Introducción a la escala descriptiva

Con el uso de referencias que representan 3 o 5 niveles de cada atributo, el líder refuerza las características sensoriales y el método de escalamiento (Meilgaard y col., 1999).

C. Pequeñas diferencias de productos

El panel refina los procedimientos de evaluación usando referencias que contienen diferencias muy pequeñas a los niveles de escalamiento originales. En este paso, debe ponerse especial cuidado en reducir las variaciones entre las muestras supuestamente idénticas ya que los panelistas tienden a ver variabilidad en los resultados como reflejo de su propia falta de habilidad (Meilgaard y col., 1999).

D. Práctica final

Una vez que se tienen bien claras y entrenadas las escalas de cada atributo, el panel se encuentra listo para evaluar el producto. En muchas ocasiones es de gran ayuda que el panel tenga las referencias a diferentes niveles, para evaluar correctamente el producto.

Durante las etapas del entrenamiento, los panelistas deben conocer y discutir los resultados después de cada sesión, así como resolver problemas o controversias y cuestionar referencias cualitativas o cuantitativas. Este tipo de interacción es esencial para el desarrollo común de la terminología, procedimientos para evaluación y técnicas de escalamiento; aspectos esenciales de un buen instrumento sensorial (Meilgaard y col., 1999).

2.4. MÉTODOS ESTADÍSTICOS AVANZADOS

El análisis estadístico multivariado es de gran ayuda cuando se requiere de la interpretación de una gran cantidad de datos, es decir, se puede aplicar la estadística multivariada para encontrar las relaciones más importantes entre un gran número de productos con muchas características sensoriales. Cualquiera que sea, análisis de agrupamiento, análisis factorial, componentes principales o cualquier otra técnica multivariada, se producen simples gráficas que ilustran las diferencias entre los productos y proveen información acerca de éstos (Meilgaard y col., 1999).

Cuando los objetivos de estudio van más allá de una simple estimación o discriminación, entonces los métodos estadísticos multivariados pueden ser aplicados. Los estudios sensoriales raramente incluyen una sola respuesta de variable. A menudo, muchas variables son medidas sobre cada muestra y normalmente el objetivo de estudio es determinar cómo las muestras se relacionan una a otra a través de sus variables. El análisis de componentes principales (PCA) y los análisis de agrupación son usados para estudiar grupos de datos multivariados en los cuales todas las variables son de un mismo tipo (Meilgaard y col., 1999).

2.4.1. ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

El análisis de componentes principales (PCA, por sus siglas en inglés) es la técnica estadística usada para identificar el número más pequeño de variables latentes, llamadas “componentes principales” que puede explicar, en la mayor medida posible, la variabilidad observada. Analiza la estructura de la correlación de un grupo de observaciones multivariadas e identifica el eje en el cuál ocurre el máximo de variabilidad de los datos, este eje es llamado primer componente principal, el segundo componente principal es el eje donde se presenta la mayor proporción de la variabilidad remanente, con la condición de que estos ejes deben de ser perpendiculares entre sí, es decir ortogonales o sin correlación entre sí (Meilgaard y col., 1999).

Además de representar las asociaciones entre las variables originales, el PCA puede ser usado para indicar la ubicación de las muestras. Una gráfica de las calificaciones de los componentes principales para un grupo de productos puede revelar agrupaciones y polarizaciones de las muestras que no serían tan aparentes en la examinación de un número mayor de variables originales. El análisis de PCA provee una manera de resumir los datos colectados para un gran número de variables en un menor número de dimensiones. Este tipo de análisis es muy recurrido en publicaciones y resultados de análisis sensorial, sobre todo cuando se trata de un análisis descriptivo cuantitativo, ya que permite visualizar de una manera fácil la distribución de las muestras (Meilgaard y col., 1999).

2.5. NARIZ ELECTRÓNICA

Los problemas de los métodos tradicionales, junto con la necesidad creciente por parte de la industria de disponer de métodos de control de calidad más rápidos, baratos y objetivos, llevaron a pensar en la posibilidad de diseñar un nuevo instrumento capaz de emular al sistema olfativo humano. Para lograrlo, este debe ser capaz de detectar, discriminar y cuantificar olores, de forma rápida y objetiva (Schaller, 1998).

El primer sistema capaz de detectar aromas de forma artificial se diseñó en la Universidad de Warwick en 1982 y recibió el nombre de nariz electrónica. Desde entonces numerosos grupos de investigaciones industriales y académicos trabajan en este campo.

Una nariz electrónica consta de una red de sensores, con especificidad parcial que realizan una función similar a los receptores olfativos inespecíficos de la glándula pituitaria, que reaccionan con los olores y producen una señal que pueda ser amplificada y medida; las señales obtenidas por los sensores son procesadas por un software de reconocimiento de patrones, capaz de reconocer y clasificar olores (de forma análoga a como lo hace el cerebro). Además, una nariz electrónica necesita de un hardware que permita exponer los sensores a los aromas de forma controlada y reproducible, así como registrar las señales producidas por los sensores (Schaller, 1998).

Peris (2009) define a una nariz electrónica como una máquina diseñada para detectar y discriminar entre olores complejos mediante un conjunto de sensores sintonizados que son tratados con una variedad de materiales sensibles al olor químico o biológico. Un estímulo de olor genera una huella digital característica de la matriz de sensores. Los patrones de las huellas dactilares de los olores conocidos se utilizan para construir una base de datos y capacitar a un sistema de reconocimiento de patrones, para que los olores desconocidos posteriormente puedan ser clasificados e identificados.

Se han diseñado sistemas de nariz electrónica para numerosos productos, como automóviles, alimentos, envases, cosméticos, etc; igualmente para una amplia gama de aplicaciones como: control de calidad de materias primas y productos manufacturados, para monitoreo de frescura y madurez, investigaciones de vida de anaquel, evaluaciones de autenticidad de productos de alta calidad, clasificación de olores y perfumes, detección de patógenos microbianos y estudios ambientales (Schaller, 1998). El uso de las narices electrónicas en el control de alimentos se enfoca a 5 categorías importantes, estas son: monitoreo del proceso, investigación de vida útil, evaluación de frescura, evaluación de autenticidad y estudios de control de calidad. Algunas aplicaciones importantes en el control de alimentos se muestran en la Tabla 5.

Tabla 5. Aplicaciones de narices electrónicas en la industria alimenticia

<i>Alimento</i>	<i>Tipo de estudio</i>
Mosto de vino	Discriminación entre etapas de fermentación
Jamones ibéricos	Deterioro durante el proceso de curado
Leche fermentada con cepas de <i>Lactococcus lactis</i>	Discriminación entre niveles de intensidad de olor
Vinos tintos australianos	Deterioro causado por la levadura <i>Brettanomyces</i>
Tomate	Proceso de deshidratación en rebanadas de tomate Discriminación entre etapas de maduración Discriminación entre cultivos Discriminación entre etapas de vida útil
Mangos	Discriminación entre etapas de maduración Discriminación entre variedades de fruta
Té Negro	Estimación del estado óptimo de fermentación
Manzanas	Discriminación entre etapas de maduración Maduración después de la cosecha Discriminación entre cultivos Discriminación entre duraciones de vida útil
Duraznos	Discriminación entre cultivos Discriminación entre duraciones de vida útil
Leche	Determinación de vida útil
Aceite de oliva	Evaluación del estado oxidativo en diferentes condiciones Discriminación entre orígenes geográficos
Salmón	Clasificación de deterioro de filetes de salmón Clasificación de deterioro en diferentes temperaturas Clasificación de deterioro bajo diferentes condiciones de almacenamiento
Huevos	Establecimiento de categorías de frescura
Carne de res	Detección de rancidez Clasificación de deterioro y predicción de parámetros bacteriológicos
Tequila, whisky, vodka y vino tinto	Discriminación entre diferentes regiones Reconocimiento y cuantificación de adulteraciones
Vinos españoles	Clasificación de variedades de vino
Jugos de naranja	Discriminación entre orígenes geográficos
Quesos	Discriminación entre orígenes geográficos
Ostiones	Predicción de cambios de olor

Adaptado de Peris (2009)

2.5.1. COMPONENTES DE UNA NARIZ ELECTRÓNICA

Una nariz electrónica se compone de las siguientes partes: sistema de manejo de la muestra, sistema de detección y sistema de procesamiento de datos.

- *Sistema de manejo de la muestra.*

El manejo de la muestra es un paso crítico del análisis de una nariz electrónica, al cual se le debe dar una gran importancia, ya que la calidad del análisis puede ser mejorada mediante la adopción de una técnica adecuada de muestreo para los compuestos volátiles. Para introducir los compuestos volátiles presentes en el espacio de cabeza de la muestra, en el sistema de detección de una nariz electrónica, existen varias técnicas de común uso en estos instrumentos, algunas de ellas son: espacio de cabeza estático, purga y trampa, espacio de cabeza dinámico, microextracción en fase sólida, aguja de extracción dinámica, etc. Aunque cualquier técnica de muestreo de espacio de cabeza puede ser utilizada como parte de una nariz electrónica, la elección debe realizarse con cuidado teniendo en cuenta el tipo de muestra y las especificaciones de las técnicas (Peris, 2009).

- *Sistema de detección*

Una nariz electrónica contiene una serie de sensores de gas como sistema de detección, sin embargo se han incorporado nuevas tecnologías como la espectrometría masas para esta función. El principio de funcionamiento del sistema de detección se basa en el principio de funcionamiento de los sensores que contiene, básicamente un sensor químico es un dispositivo capaz de convertir una cantidad química en una señal eléctrica que se relaciona con la concentración de partículas específicas tales como átomos, moléculas o iones presentes en gases. Diferentes tipos de sensores se han involucrado en el desarrollo de narices electrónicas algunos de los más utilizados son los siguientes: sensores piezoeléctricos, sensores electroquímicos, sensores ópticos, entre otros (Peris, 2009).

- *Sistema de procesamiento de datos*

En principio el análisis de los patrones de respuesta de una red de sensores se podría realizar visualmente, comparando las gráficas obtenidas en cada caso. Sin embargo el número de variables a estudiar en una red neuronal es demasiado alto, por lo que es necesario recurrir a métodos de análisis de datos más sofisticados, que contemplen las diferencias entre series de datos como un todo. Existen dos formas de llevar a cabo el tratamiento de datos, mediante técnicas supervisadas o bien mediante no supervisadas (Peris, 2009).

Las técnicas no supervisadas se usan generalmente para los análisis de datos exploratorios. La finalidad de estos análisis es encontrar relaciones ocultas entre muestras o entre variables. No se proporciona información previa sobre la naturaleza de las muestras al ordenador. Estas técnicas son útiles cuando se espera que existan relaciones entre muestras o variables, un ejemplo de técnica no supervisada es el análisis de componentes principales (PCA) que permite clasificar muestras con características comunes (Peris, 2009).

Con las técnicas supervisadas de aprendizaje es necesario suministrar al ordenador datos de entrenamiento. Un ejemplo son las redes neuronales donde el ordenador se alimenta con datos de las respuestas de las muestras con características olfativas bien conocidas, se desarrolla un modelo matemático que describe el aspecto de estos datos. Tras este entrenamiento, las muestras desconocidas pueden compararse con el modelo y ser clasificadas en uno de los grupos del entrenamiento, así al introducir una muestra desconocida, el sistema automático de reconocimiento compara su patrón de respuesta con los existentes en la librería y permite identificar la muestra (Peris, 2009).

2.6. REDES NEURONALES

La neurona artificial o elemento formal está inspirada en el funcionamiento de una neurona biológica. Se considera a una neurona como un elemento formal o unidad básica de la red, que recibe información de otros módulos o del entorno, la integra, la computa y emite una única salida que se transmite en forma idéntica a múltiples neuronas (Wasserman, 1989).

Las fuerzas de unión entre los elementos de una red neuronal se designan como pesos sinápticos tomando como referencia la sinapsis de las neuronas comunes. Se considera que una sinapsis tiene un alto grado de conexión, ya que la información que transmite contribuye a que se produzca un nuevo estado o alteración en la neurona receptora y en la respuesta que ésta elabora.

Las fuerzas sinápticas se expresan como un valor numérico que pondera las señales que se reciben en sus entradas. Este peso es un valor que determina la fuerza de conexión entre 2 neuronas. Cuando se evalúa una neurona se debe calcular todas las fuerzas o valores que se reciben por sus entradas. A este cálculo se le aplica una función llamada función de activación (FA) que determina el valor del estado interno de la neurona que se transmite a su salida (Wasserman, 1989).

2.6.1. TIPOS Y FUNCIONAMIENTO DE REDES NEURONALES

Existen dos grandes tipos de redes neuronales: redes de clasificación y redes de evaluación. Las redes del primer tipo, asocian una determinada configuración de entrada con una salida. Se les denomina redes asociativas, clasificadoras o reconocedoras de patrones. El segundo tipo maneja problemas en donde se pide un “juicio”, por lo que se denominan redes evaluadoras. Otro grupo de redes de neuronas artificiales lo constituyen modelos específicos para tareas especiales como: restauración de patrones, predicción, etc (Hoskins, 1992).

El funcionamiento básico de una red neuronal consiste en dos etapas. La primera comprende las fases de creación y desarrollo y posteriormente la fase de ejecución, donde la red neuronal se pone en operación. Durante esta fase la red se asemeja a cualquier otro programa informático convencional y es cuando se utiliza de forma efectiva para resolver los problemas para los que ha sido diseñada (Hoskins, 1992).

2.6.1.1. Fase de creación y desarrollo

Esta etapa comprende todas las fases necesarias para el desarrollo de una red neuronal artificial y comprende las siguientes etapas: diseño de la arquitectura, entrenamiento y validación (Hoskins, 1992).

2.6.1.2. Diseño de la arquitectura

En la fase de diseño de la arquitectura, se determina el número de neuronas que tendrá la red, así como su disposición en capas y la conectividad entre las mismas. Se determina cuántas entradas y salidas tiene la red, así como el número de neuronas y cómo están distribuidas en capas e interconectadas entre sí. La topología de la red determina la capacidad de representatividad de la misma y la cantidad de conocimiento que puede albergar, esta debe adecuarse al problema a resolver y la falta de técnicas que realicen esta función hace que haya que recurrir a la experiencia y a la técnica de ensayo y error, probando varias topologías, para finalmente conseguir una que resuelva el problema (Hoskins, 1992).

2.6.1.3. Fase de entrenamiento

Uno de los objetivos de los sistemas autónomos es emular la habilidad que tiene el hombre para interactuar con su entorno y aprender de este. De acuerdo a esto una red neuronal artificial necesita de una estructura flexible, capaz de desempeñarse en ambientes de operación dinámicos sujetos a incertidumbres y perturbaciones. Las redes neuronales son capaces de proveer una estructura flexible, mediante la integración con diversos sistemas de aprendizaje.

Una vez diseñada la arquitectura de la red y elegidas las funciones que intervienen en su funcionamiento, se procede a entrenar la red neuronal con la finalidad de que esta aprenda el comportamiento deseado; en otras palabras, que aprenda a dar la respuesta adecuada a los estímulos o patrones de entrada que se le presenten (Hoskins, 1992).

2.6.1.4. Fase de validación o test

Una vez terminado el aprendizaje la red neuronal puede generalizar ante entradas similares a las de su juego de ensayo y producir salidas correctas. Hay que tener en cuenta que es difícil conseguir la capacidad de generalización de una red sin utilizar grandes cantidades de datos y que estos sean muy variados. Para operar con una red entrenada, el proceso es el mismo que cuando se realizaba el entrenamiento. Por lo tanto, se le sigue suministrando información de entrada, sólo que ahora no se realizará ningún ajuste en los pesos sinápticos. La red reconocerá o evaluará y dará una respuesta a partir de los pesos establecidos durante el entrenamiento. Es necesario seleccionar aquellos hechos que reflejen claramente cada uno de los patrones a reconocer y las situaciones extremas de evaluación en una red evaluadora. Lo ideal es preparar una colección amplia de hechos de entrenamiento que cubran todos los problemas a los que se pueda enfrentar la red (Bishop, 1995).

JUSTIFICACIÓN

La realización de un análisis sensorial puede resultar muy laboriosa, ya que el entrenamiento de las personas que se encargan de la evaluación de los alimentos es una tarea ardua y prolongada, debido a que toma tiempo para que los individuos se familiaricen con los aromas y sabores que describen el producto. Por otro lado se pueden tener errores al evaluar los alimentos debido a alteraciones o diferencias de percepción en los sentidos de las personas involucradas, así mismo el cansancio en el personal del panel y la disponibilidad de éste para la evaluación de los alimentos, son fuente de una variabilidad importante en los resultados del análisis sensorial. Es por eso que el contar con una metodología de nariz electrónica basada en espectrometría de masas y análisis multivariado, eliminara los problemas que tiene el análisis sensorial en la evaluación de sabores y aromas de alimentos, lo que permitirá un mejor control de la calidad en alimentos.

HIPÓTESIS

Es posible correlacionar la información derivada de un análisis sensorial con la información generada con instrumentos analíticos, para crear una metodología de nariz electrónica que sea capaz de predecir la calidad del sabor de un producto alimenticio.

OBJETIVOS

GENERAL

Desarrollar una metodología de nariz electrónica basada en espectrometría de masas y análisis multivariado que determine la calidad de un producto alimenticio.

ESPECÍFICOS

- ❖ Desarrollar metodologías HS-SPME para el análisis de compuestos volátiles de sabor específicas para 4 alimentos.
- ❖ Someter los 4 alimentos bajo estudio a diferentes tratamiento físicos para lograr cambios en su calidad.
- ❖ Obtener el perfil químico de compuestos volátiles de sabor de 4 alimentos con diferentes calidades, por medio de HS-SPME-GC-MS.
- ❖ Entrenar un panel descriptivo cuantitativo de jueces sensoriales para la evaluación de los atributos de los 4 alimentos estudiados.
- ❖ Cuantificar los atributos sensoriales de los 4 alimentos con diferentes calidades a través del panel descriptivo cuntitativo de jueces entrenados.
- ❖ Realizar análisis multivariado de componentes principales a los resultados obtenidos por el análisis de perfil químico y de perfil sensorial.
- ❖ Identificar los compuestos que determinan la diferencia en el perfil químico y sensorial de los 4 alimentos estudiados por MS.
- ❖ Entrenar una red neuronal con los datos obtenidos del análisis de componentes principales y comparar sus resultados con los del análisis multivariado.

CAPÍTULO 3

MATERIALES Y MÉTODOS

3.1. DESARROLLO DE METODOLOGÍAS HS-SPME

Se desarrollaron técnicas HS-SPME para la extracción de los compuestos volátiles de 4 alimentos utilizando los siguientes materiales y equipos: viales ámbar para head space (HS) de 40ml (I-chem, Pittsburgh, PA, EUA) para alojar las muestras de alimentos, La fibra SPME utilizada para la extracción de los compuestos volátiles fue una fibra de DVB/Carboxeno/PDMS de 2 cm (Sigma Aldrich, EUA), el análisis cromatográfico se realizó con un cromatógrafo de gases Claurus 500 con detector FID (PerkinElmer Life and Analytical Sciences, Shelton, CT, EUA) se utilizó una columna cromatográfica VF5ms (30m, 0.32 mm, 0.25 μ m) (Varian, Santa Clara, California, EUA) con nitrógeno como gas acarreador e hidrógeno y aire como gases de combustión para el detector.

Para el establecimiento de la técnica HS-SPME apropiada, a cada uno de los alimentos se les sometió a una serie de extracciones variando diversos parámetros SPME como: temperatura, cantidad de muestra, tiempo de extracción, cantidad de agua, cantidad de sal y agitación. Se realizaron planes de trabajo para cada uno de los alimentos basados en el sistema de exploración de un factor a la vez, eligiendo como mejor condición de extracción, el nivel de la variable que presentara una mayor área bajo la curva en los cromatogramas (Figura 1). Cuando se encontró un factor con valores de área semejante en 2 niveles, se tomó el que presentó mayor simpleza para el análisis es decir el nivel más bajo de los dos. Una vez identificadas las mejores condiciones para la extracción de los compuestos volátiles y las mejores condiciones de operación del cromatógrafo se consideró establecida la técnica de HS-SPME.

En la Tabla 6 se muestran los planes de trabajo que se siguieron para el establecimiento de las técnicas HS-SPME para los 4 alimentos (vino blanco, queso manchego, jamón de pierna cocido y papas fritas). Para la exploración de cantidad de muestra en queso y jamón, se procedió a obtener 300 g de una mezcla del alimento en solución salina al 30% (la solución se preparó con agua desodorizada y la sal utilizada fue grado reactivo previamente horneada a 180 °C por 3 h). La agitación en todas las exploraciones fue de 230 rpm.

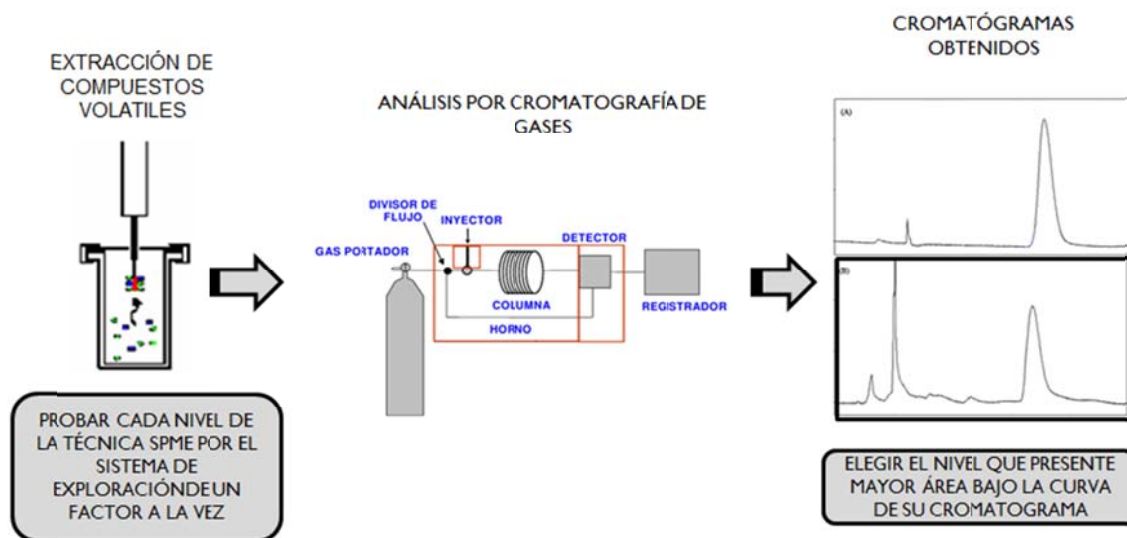


Figura 1. Diagrama de la metodología para el desarrollo de las técnicas SPME

Tabla 6. Planes de trabajo para el establecimiento de las técnicas HS-SPME

VINO BLANCO						
Variable a probar	No. de ensayo	Cantidad de muestra (g)	Temperatura (°C)	Tiempo (min)	Adición de sal	
Cantidad de muestra (g)	1	4	35	30	No	
	2	8	35	30	No	
	3	12	35	30	No	
	4	16	35	30	No	
Temperatura (°C)	5	8	35	30	No	
	6	8	40	30	No	
	7	8	45	30	No	
	8	8	50	30	No	
Tiempo (min)	9	8	40	30	No	
	10	8	40	60	No	
	11	8	40	120	No	
	12	8	40	180	No	
Adición de sal	13	8	40	120	No	
	14	8	40	120	Si	

QUESO MANCHEGO						
Variable a probar	No. de ensayo	Cantidad de muestra (g)	Temperatura (°C)	Tiempo (min)	Adición de sal	
Cantidad de muestra (g)	1	5	40	30	No	
	2	10	40	30	No	
	3	16	40	30	No	
Temperatura (°C)	4	5	40	30	No	
	5	5	45	30	No	
	6	5	50	30	No	
	7	5	55	30	No	
Tiempo (min)	8	5	45	30	No	
	9	5	45	60	No	
	10	5	45	120	No	
	11	5	45	180	No	
Adición de sal	12	5	45	120	No	
	13	5	45	120	Si	

JAMÓN DE PIERNA COCIDO						
-------------------------------	--	--	--	--	--	--

Variable a probar	No. de ensayo	Cantidad de muestra (g)	Temperatura (°C)	Tiempo (min)	Adición de sal
Cantidad de muestra (g)	1	5	35	30	No
	2	10	35	30	No
	3	16	35	30	No
Temperatura (°C)	4	10	35	30	No
	5	10	40	30	No
	6	10	45	30	No
	7	10	50	30	No
Tiempo (min)	8	10	50	30	No
	9	10	50	60	No
	10	10	50	120	No
	11	10	50	180	No
Adición de sal	12	10	50	120	No
	13	10	50	120	Si

PAPAS FRITAS

Variable a probar	No. de ensayo	Cantidad de muestra (g)	Temperatura (°C)	Tiempo (min)	Adición de agua	Agitación
Cantidad de muestra (g)	1	1	45	30	No	No
	2	3	45	30	No	No
	3	5	45	30	No	No
	4	10	45	30	No	No
Temperatura (°C)	5	5	45	30	No	No
	6	5	50	30	No	No
	7	5	55	30	No	No
Tiempo (min)	8	5	45	30	No	No
	9	5	45	60	No	No
	10	5	45	120	No	No
	11	5	45	180	No	No
Agitación	12	5	45	60	No	No
	13	5	45	60	Si	No
Adición de agua	14	5	45	60	Si	No
	15	5	45	60	Si	Si

Los valores en sombreado representan los niveles de cada variable explorada, las cantidades en negrita representan los niveles óptimos de extracción de los compuestos volátiles. Cada ensayo se hizo por triplicado.

3.2. PREPARACIÓN DE ALIMENTOS PARA LOGRAR DIFERENTES CALIDADES

Los alimentos utilizados para realizar este estudio fueron: vino blanco (12.5 Vol. Alc., pH: 3.6, Sauvignon Blanc, cosecha 1999), queso manchego del estado de Querétaro, jamón cocido de pierna de cerdo (78.1 % de agua, 2.43 % de grasa) y papas en rodajas fritas con sal. Los alimentos utilizados correspondieron al mismo lote y fueron adquiridos en tiendas locales del estado de Querétaro. Estos alimentos fueron expuestos a diferentes tratamientos físicos para alterar sus características y obtener productos de calidad diferente. Inmediatamente después de terminado cada tratamiento, los productos fueron evaluados por un panel sensorial de jueces entrenados y se almacenaron en congelación a -30 °C para ser utilizados posteriormente en los análisis químicos de sabor.

3.2.1. Tratamientos para vino blanco

Para modificar el vino blanco y obtener productos de diferente calidad: a) se destapo una botella de vino y se almacenó en refrigeración a 4 °C durante 1 mes (vino a 4 °C), b) se expuso una botella a la luz del sol durante un mes a la temperatura del cuarto de almacenamiento 25 ± 2 °C (vino al sol), c) se calentó una botella destapada en un baño de agua a 40 °C por 48 h (vino a 40 °C) y 4) vino sin ninguna modificación el cual fue adquirido en el día que se realizaban los análisis (vino en condiciones normales).

3.2.2. Tratamientos para queso manchego

Para modificar el queso manchego y obtener productos de diferente calidad para este alimento: a) se expuso un queso a la luz del sol durante una semana a la temperatura del cuarto de almacenamiento 25 ± 2 °C (queso al sol), b) se almacenó un queso en refrigeración a 4 °C por 3 meses (queso a 4 °C) y c) se utilizó un queso sin ninguna modificación el cual fue adquirido en el día que se realizaban los análisis (queso en condiciones normales).

3.2.3. Tratamientos para jamón cocido

Para modificar el jamón cocido y obtener productos de diferente calidad para este alimento: a) se expuso un jamón a la luz del sol durante una semana a la temperatura del cuarto de almacenamiento 25 ± 2 °C (jamón al sol), b) se almacenó un jamón en refrigeración a 4 °C por una semana (jamón a 4 °C), c) se expuso un jamón abiertamente en un cuarto a la temperatura de la habitación 25 ± 2 °C por una semana (jamón expuesto abiertamente) y d) se utilizó un jamón sin ninguna modificación el cual fue adquirido en el día que se realizaban los análisis (jamón en condiciones normales).

3.2.4. Tratamientos para papas fritas

Para modificar las papas fritas y obtener productos de diferente calidad para este alimento: a) se expusieron papas fritas a la luz del sol durante 1 mes a la temperatura del cuarto de almacenamiento 25 ± 2 °C (papas al sol), b) se expusieron papas fritas abiertamente a la temperatura del cuarto de almacenamiento 25 ± 2 °C durante 1 mes (papas expuestas abiertamente) y c) se utilizaron papas fritas sin ninguna modificación las cuales fueron adquiridas el día que se realizaban los análisis (papas en condiciones normales).

3.3. OBTENCIÓN DEL PERFIL DE COMPUESTOS VOLÁTILES

Con las técnicas HS-SPME desarrolladas y estandarizadas se procedió a extraer los compuestos volátiles de cada uno de los alimentos modificados y sin modificar en su calidad y los componentes extraídos en el head space fueron inyectados y analizados en un cromatógrafo de gases acoplado a un espectrómetro de masas, para así obtener los perfiles químicos de los compuestos volátiles presentes en los 4 alimentos en estudio. Para los análisis se utilizaron viales de head space de 20 ml con tapas magnéticas con septa de PTFE/Silicon, ambos de la marca CRS (Louisville, Kentucky, USA). Se utilizó un cromatógrafo de gases Agilent Technologies (Santa Clara, California, USA) modelo 7890 acoplado a un espectrómetro de masas Agilent Technologies modelo 5975C. Las condiciones del GS-MS fueron las siguientes: columna capilar HP-5MS 5% Fenil Metil Siloxano (30 m x 250 μ m x 0.25 μ m) en modo *splitless* con un flujo de 1 mL/min de helio como gas acarreador. La rampa de temperatura para todas las inyecciones fue 5 min a 40 °C, 6 °C/min hasta 70 °C, 2 °C/min hasta 92 °C, 6 °C/min hasta 150 °C, 20 °C/min hasta 240°C, 6 min a 240 °C.

Los cromatogramas obtenidos fueron integrados para obtener el área bajo la curva de los picos de los compuestos detectados a través del software Chem-Station; se identificó cada compuesto por medio de la biblioteca NIST-08 (Gaithersburg, MD, USA), tomando como identificación positiva aquellos que presentaran un *match* mayor del 80%. Por último se generó un reporte con los compuestos identificados y el área bajo la curva que presentaron en los cromatogramas.

3.4. ENTRENAMIENTO DE UN PANEL DESCRIPTIVO CUANTITATIVO PARA LA EVALUACIÓN DE LOS ALIMENTOS EN ESTUDIO

El primer paso fue seleccionar un grupo de personas responsables y saludables para capacitarlas y formar el panel de jueces. Esta selección se realizó en el área de biotecnología del Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada en el estado de Querétaro (CICATA). A continuación se muestran los pasos que se siguieron para llevar a cabo el entrenamiento del panel sensorial.

3.4.1. Lluvia de ideas

Como etapa inicial, se dio a probar a los panelistas o jueces cada uno de los alimentos sujetos a estudio, para que describieran el sabor y el olor con una lista de atributos sensoriales (descriptores) elegidos por ellos (Figura 2). Se les pidió a los panelistas que llenaran una hoja con todos los atributos elegidos, para que estos fueran adquiridos y llevados a los panelistas en la siguiente sesión para verificar que realmente estuvieran presentes en los alimentos.



Figura 2. Panel de jueces

indo los

3.4.2. Confirmación de atributos

El siguiente paso fue confirmar que los atributos sensoriales proporcionados por el panel de jueces durante la lluvia de ideas describieran el sabor de los alimentos. Para esto se prepararon sustancias de referencia las cuales definían cada uno de los atributos y se verificó a través de los jueces que realmente estuvieran presentes como atributos sensoriales en los alimentos (Figura 3). Esto se hizo durante varias sesiones con el fin de obtener una lista final de descriptores de sabor y olor que definieran a los alimentos en estudio y que fuera útil para su posterior escalamiento.



Figura 3. Sustancias de referencia para vino blanco

3.4.3. Entrenamiento del panel sensorial

Para el entrenamiento del panel sensorial se pidió a los jueces del panel que fijaran la intensidad de los descriptores en tres intensidades, tomando 3 como la más baja, 7 la de mediana intensidad y 11 la de alta intensidad. Las muestras se otorgaron a los jueces sin la escala correspondiente codificando cada muestra con un número de tres dígitos; a cada juez se le otorgó una hoja de respuestas donde relacionaron el número de cada muestra con la intensidad que percibían. El trabajo del entrenamiento para la identificación se realizó por varias sesiones hasta que no se encontró variabilidad en los resultados de estas relaciones.

La misma metodología fue aplicada con cada uno de los alimentos, donde el resultado final fue la obtención de un grupo de personas capaces de distinguir los atributos sensoriales de cada alimento en diferentes intensidades. Las cantidades y modo de preparación de los estándares utilizados en el entrenamiento del panel sensorial se muestran en la Tabla 7, 8, 9 y 10.

Tabla 7. Preparación de los atributos sensoriales de vino blanco.

Atributo	Olor			Descripción
	3	7	11	
Cáscara de toronja	1 g	5 g	15 g	Cortado en trozos finos
Cereal	1g con 0.5 g de agua	5g con 2.5 g de agua	20gr con 10g de agua	Trozos de hojuelas de cereal
Manzana	1g	2g	5 g	Trozos pequeños humedecidos
Pungente (pimiento)	1 g	5 g	20 g	Trozos pequeños humedecidos
Col cocida	2 g	4 g	15 g	Trozos finos
Hule	0.5 g más 20 g de agua	0.5 g más 2 g de agua	0.5 g	Cortado en trozos pequeños
Madera quemada	0.1 g con 1g de agua y se retira	0-5g con 5g de agua y se retira	15 g con 15 g de agua y se retira	Pequeños trozos ligeramente quemados
Floral	0.1g	0.5g	1g	Trozos de pétalos florales
SABOR				
Ciruela	23 g más 100 g de agua	23 g más 32 g de agua	23 g más 20 g de agua	Se muelen las mezclas en una licuadora
Acido	0.5 g en 9.5 g de agua	2g en 8 g de agua	10 g	Se utiliza vinagre comercial
Astringencia (té negro)	0.5 g en 9.5 g de agua	5g en 5 g de agua	10 g	Té negro comercial
Amargo (agua de sábila)	0.5 g en 9.5 g de agua.	2g en 8 g de agua	10 g	El agua de sábila es comercial.

Tabla 8. Preparación de los atributos sensoriales de queso manchego.

Olor				
Atributo	3	7	11	Descripción
Papaya	2g	15 g	30 g	Trozos pequeños
Nata	2.5 g en 7.5 g de leche light	5g en 5g de leche light	10 g	Este atributo es para sabor y olor
Leche agria	2.5 g en 7.5 g de agua.	5 g en 5g de agua.	10 g	Se deja agriar en una incubadora a 45°C
Huevo	2g	8g	20 g	Solo se usa la clara
Paja	0.25 g	0.5 g	1 g	Lo más fina posible
Pies (solución de ácido butírico)	2.5 g en 7.5 de agua	5g en 5g de agua	10 g	Se hace una solución patrón 0.1 g/10 g
Sabor				
Umami	0.03 g en 10 g de agua	0.08 g en 10 g de agua	0.15 g en 10 de agua	Agitar
Ácido (ácido acético)	0.5 g en 9.5 g de agua	2g en 8 g de agua.	10 g	El ácido acético es comercial
Salado (sal)	0.07 g en 10 g de agua	0.15 g en 10 g de agua	0.3 g en 10 g de agua	Agitar
Dulce (azúcar)	0.5 g más 9 .5g de agua	1.5 g más 7 g de agua	3 g más 7 g de agua	Agitar
Crema	2.5 g en 7.5 de agua	5g en 5g de agua	10 g	Agitar

Tabla 9. Preparación de los atributos sensoriales de jamón cocido.

OLOR				
Atributo	3	7	11	Descripción
Ahumado (madera quemada)	0.03 g	0.5 g	1.3 g	Trozos de madera quemada
Carne cruda	1.5 g	15 g	30 g	Milanesa de cerdo fresca
Orina (pañal orinado)	1 g	5g	20 g	Trozos del gel absorbente del pañal
Choquía	Se vació un huevo en una copa y se enjuago poco la copa	Se vació un huevo en una copa y se enjuago en término medio	Se vació un huevo en una copa un huevo y enjuagar vigorosamente	Huevo fresco
SABOR				
Dulce (solución de azúcar)	2.5 g en 7.5 g de agua	5g en 5g de agua	10 g	Se hace una solución patrón al 10 % azúcar
Brócoli	Licuar 5 g con 90 g de agua	Licuar 15 g con 90 g de agua	Licuar 40 g con 90 g de agua	Se utilizó brócoli congelado
Sal	2.5 g de solución en 7.5 de agua	5g de solución en 5g de agua	10 g	Se hace una solución patrón al 3 % de sal
Umami	2.5 g de solución en 7.5 de agua.	5g de solución en 5g de agua.	10 g	Se hace una solución patrón al 1 % de umami
Fierro	2.5 g de solución en 7.5 de agua	5g de solución en 5g de agua	10 g	Se hace una solución patrón al 10 % de solución de hierro
Ácido (ácido acético)	0.5 g de ácido acético en 9.5 g de agua	3.5 g de ácido y a completar a 10 g con agua	10 g	El ácido es vinagre comercial
Astringente (té negro)	0.5 g en 5g de agua	4 g en 6 g de agua	10 g	Té negro comercial

Tabla 10. Preparación de los atributos sensoriales de papa frita.

Olor				
Atributo	3	7	11	Descripción
Cáscara de papa cruda	2.5 g	10 g	20 g	Trozos pequeños
Papa cruda	2.5 g	10 g	20 g	Trozos de papa cruda
Papa cocida	2.5 g	14 g	25 g	Trozos de papa cocida
Cacahuete	1.3 g	8 g	16 g	Cacahuete tostado molido
Buñuelo	1.3 g	8 g	16 g	Buñuelo molido
Tostado	2 g	5 g	10 g	Orillas de pan tostado
Sabor				
Cacahuete	Batir 2.5 g con 7.5g de agua	Batir 5 g con 5g de agua	10 g	Cacahuete tostado molido
Buñuelo	Batir 2.5 g con 7.5g de agua	Batir 5 g con 5g de agua	10 g	Buñuelo molido
Sal	2.5 g de solución en 7.5 de agua.	5g de solución en 5g de agua.	10 g	Se hace una solución patrón al 3 % de sal
Cáscara cocida	Licuar 5 g con 90 g de agua	Licuar 15 g con 45 g de agua	Licuar 15 g con 17 g de agua	Cáscara de papa cocida
Papa cocida	Licuar 5 g con 90 g de agua	Licuar 15 g con 45 g de agua	Licuar 15 g con 17 g de agua	Papa cocida
Champiñón	Licuar 5 g con 90 g de agua	Licuar 20 g con 50 g de agua	Licuar 20 g con 20 g de agua	Champiñones cocidos
Aceite (aceite calentado)	Poner una gota en 5g de aceite vegetal	Poner 2g a 5g de aceite vegetal	5 g	Aceite calentado por 3 horas y dejado reposar 6 días

3.5. EVALUACIÓN DE LOS ATRIBUTOS SENSORIALES DE LOS 4 ALIMENTOS CON DIFERENTES CALIDADES

Se cuantificó cada uno de los atributos en su respectivo alimento. Para ello el panel de jueces evaluó cada uno de los alimentos en sus diferentes calidades, conforme a los atributos sensoriales con los que fue entrenado, en una escala del 0 a 14, donde 0 se refería a no percibido y 14 a demasiado intenso. De esta forma, se cuantificó cada atributo sensorial en el alimento, obteniendo finalmente un análisis cuantitativo de los descriptores del sabor y olor de los alimentos estudiados. Las hojas de evaluación de cada alimento se muestran en el Anexo 1.

3.6. ANÁLISIS MULTIVARIADO DE COMPONENTES PRINCIPALES

Los resultados obtenidos del perfil químico y del perfil sensorial, fueron sometidos a un análisis de componentes principales, para determinar la distribución de los compuestos y atributos sensoriales en los alimentos de diferente calidad y de esta forma determinar que compuestos y atributos se atribuyan a un producto de calidad específico. Se utilizó la herramienta de análisis multivariado incluida en el software estadístico Minitab 15 (Minitab Inc., State College, Pennsylvania, USA), para la realización de cada uno de los análisis de componentes principales.

3.6.1. Selección de los compuestos que determinan la diferencia en el perfil químico de los alimentos estudiados

El análisis de componentes principales proporciona un panorama único en la representación de datos y una de las características que se pueden apreciar es la distribución de los datos en vectores que tienen diferente peso de acuerdo a su variabilidad. De acuerdo a este criterio, se decidió elegir los 10 compuestos químicos con los valores vectoriales más grandes para cada uno de los análisis de componentes principales realizados a los 4 alimentos con diferente calidad. Obteniendo de esta forma los compuestos que determinan la diferencia en cada uno de los alimentos estudiados.

3.7. ANÁLISIS POR MONITOREO DEL IÓN MOLECULAR A LAS MUESTRAS DE LOS 4 ALIMENTOS

Por medio del software del espectrómetro de masas se identificaron los 4 iones de mayor abundancia para cada uno de los 10 compuestos químicos representativos en cada uno de los 4 alimentos. Se realizaron nuevos análisis químicos de los alimentos utilizando el modo de monitoreo de ión molecular, en el cual se le indicó al software del equipo los iones seleccionados previamente y pertenecientes a los compuestos de mayor importancia para optimizar el análisis químico de los alimentos.

3.8. ENTRENAMIENTO DE UNA RED NEURONAL CON LOS DATOS OBTENIDOS EN EL ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

Se construyeron dos redes neuronales una que clasificara a los alimentos de acuerdo a su calidad y otra que proporcionara un valor numérico de cada uno de los atributos sensoriales que describen el sabor y el olor. Para alimentar las redes neuronales se utilizaron las áreas de los 10 compuestos principales elegidos para monitorear la calidad del alimento; de igual forma fueron necesarias las calificaciones del panel sensorial al evaluar la calidad de los alimentos. Los datos de las áreas fueron reducidos dividiéndolos entre un común denominador para facilitar su tratamiento dentro de las redes neuronales.

Para la construcción de las redes se tomo como base las características de una red neuronal probabilística la cual es muy utilizada para problemas de clasificación. La arquitectura utilizada en las redes neuronales se diseño manualmente (Figura 4), las entradas indican el número de variables independientes de la red (los 10 compuestos principales para el sabor y olor), los casos de entrenamiento indican el número de repeticiones que se tiene de cada variable, las categorías indican el número de estas en la variable dependiente (las calidades del alimento) y la salida que proporciona la respuesta de predicción de la red neuronal.

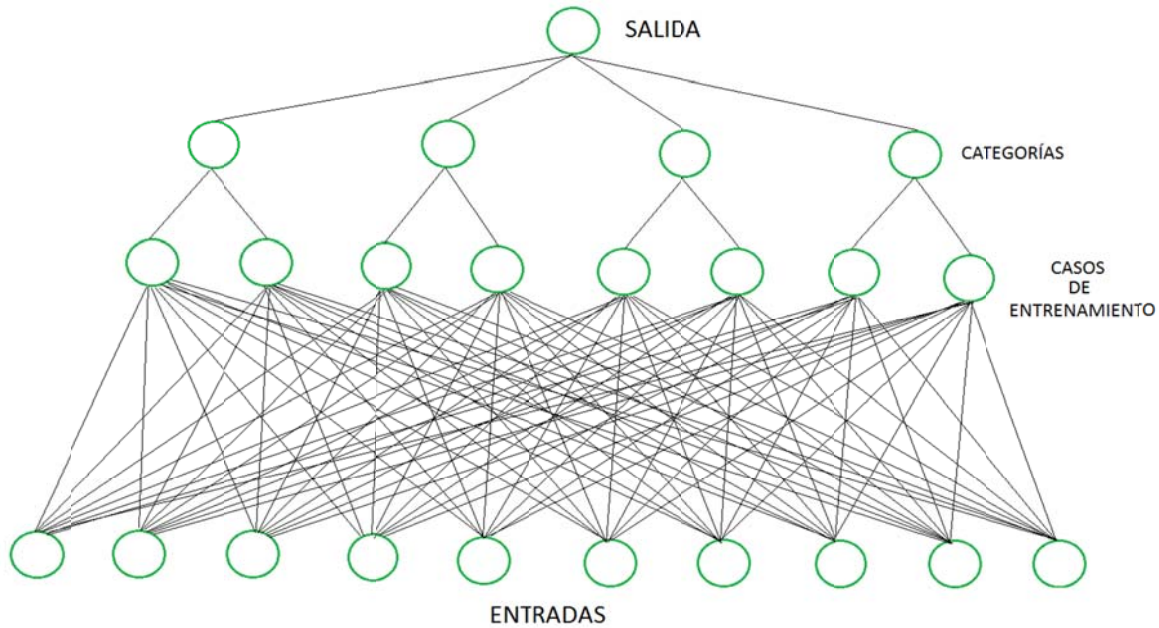


Figura 4. Arquitectura utilizada para la construcción de las redes neuronales

Se utilizó el software Neural Tools versión 5.5 (Palisade Inc., Ithaca, NY, USA), el cual se adapta como una aplicación de Excel para ser utilizado como una herramienta para la realización de redes neuronales. A continuación se muestra el procedimiento para la realización de las redes neuronales de vino blanco y sus productos con diferente calidad. Este mismo procedimiento fue tomando para la realización de las redes neuronales de los demás alimentos.

3.8.1. Redes neuronales para clasificar de acuerdo a la calidad

3.8.1.1. Fase de creación

Las áreas de los 10 compuestos principales fueron reducidas dividiéndolas por un denominador en común, con la finalidad de permitir un mejor manejo de los datos, ya que los valores originales eran demasiado grandes y su manejo resultaba complicado (Tabla 11). La Figura 5 muestra como se introdujeron los valores de las áreas de los compuestos principales (valores de las variables independientes) y las 4 diferentes calidades del vino blanco (categorías de la variable dependiente), los valores de cada variable independiente y categorías de la variable dependiente se introdujo por duplicado, se realizó de esta manera porque el software pide como mínimo dos casos de entrenamiento.

Tabla 11. Áreas ajustadas de los compuestos principales de vino blanco

	Nombre del compuesto	Vino normal	Vino a 4°C	Vino al sol	Vino a 40°C
C1	Octanoato de etilo	170	0	166	45
C2	Ácido acético	0	0	48	39
C3	Decanoato de etilo	65	0	73	14
C4	Acetato de etilo	20	54	54	39
C5	Ácido decanoico	12	19	34	29
C6	Ácido benzoico	0	0	20	0
C7	Ácido octanoico	38	47	48	55
C8	Hexanoato de etilo	45	45	49	22
C9	Linalool	15	18	12	7
C10	Feniletil alcohol	108	103	109	117

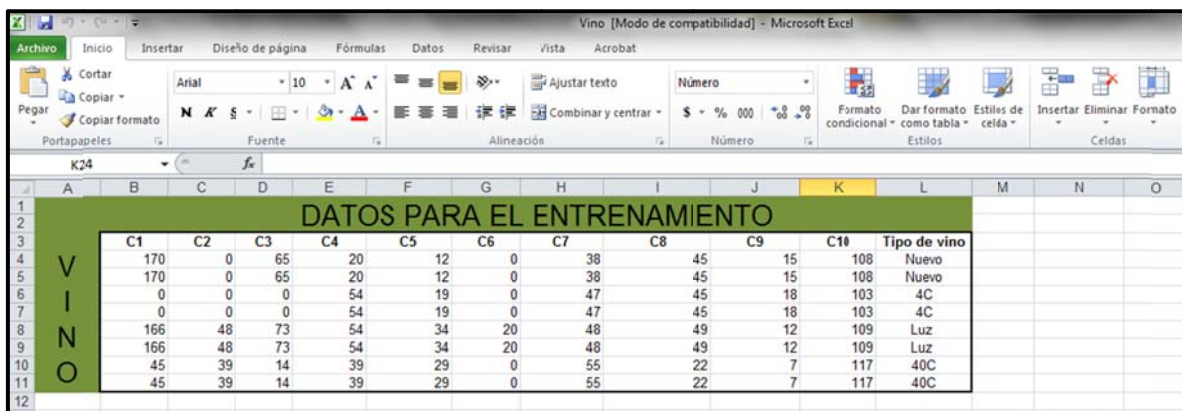


Figura 5. Valores de las variables independientes y dependiente

Una vez introducidos los datos de las variables independientes y dependiente, se procedió con la fase de creación de la red. Para ello se seleccionaron los datos de la tabla y se indicó al software el tipo de variables de entrada (variables independientes) y de salida (variable dependiente) con los que contó la red. Las variables de entrada fueron los 10 compuestos principales, las cuales se denominaron como variables numéricas por los valores de sus áreas y la variable de salida fue el tipo de vino (normal, 4 °C, expuesto al sol y 40 °C) la cual se denominó como variable categórica. La Figura 6 muestra las selecciones de los datos y como son definidas las variables de la red neuronal.

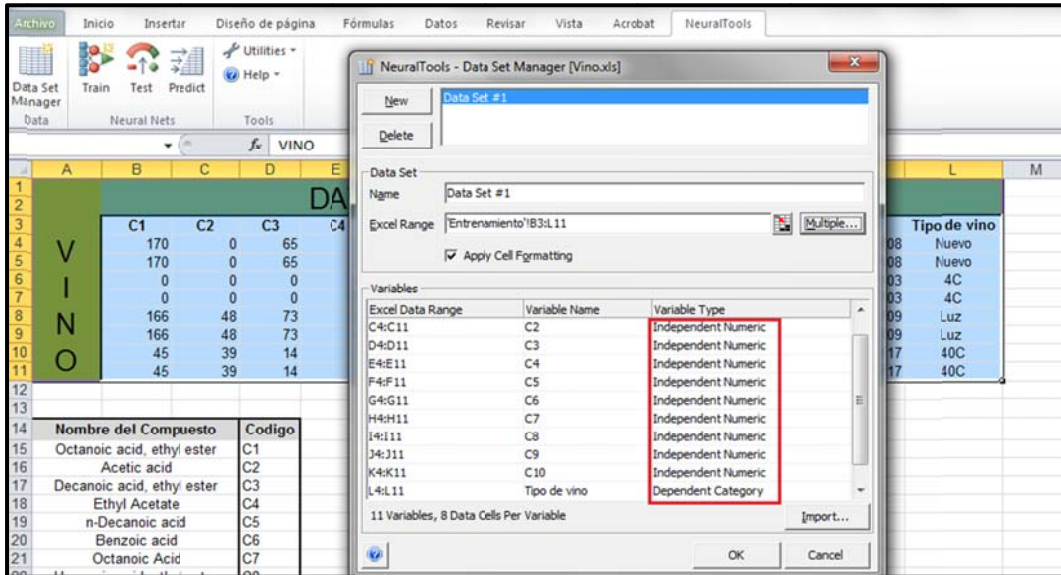


Figura 6. Selección de variables de entrada y de salida

e salida

3.8.1.2. Entrenamiento de la red neuronal

La Figura 7 muestra el proceso de entrenamiento de la red neuronal, se seleccionó la pestaña “Train” ubicada en la barra de herramientas de la aplicación del programa de redes neuronales (parte superior derecha). Una vez seleccionada la pestaña, se le indicó al software cuales eran los datos de entrenamiento (variables independientes y dependientes). Se se activo la opción Train y el software realizó el entrenamiento de la red neuronal.

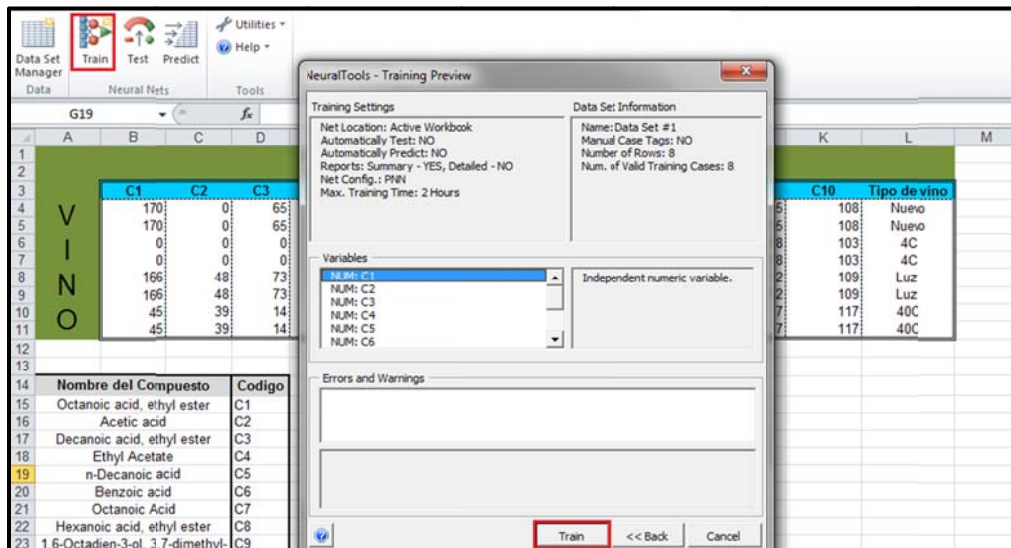


Figura 7. Selección de datos para el entrenamiento

3.8.1.3. Validación o test

Una red neuronal entrenada debe ser capaz de generalizar ante entradas similares a las de su juego de ensayo una salida correcta. La validación de una red neuronal consiste en que la red entrenada sea capaz de predecir valores de la variable de salida conocidos por el usuario, en otras palabras, que al proporcionar a la red una serie de datos de entrada con respuestas conocidas, esta sea capaz de predecir las mismas respuestas.

Para la validación de la red neuronal construída se utilizaron por fines prácticos los mismos datos de entrenamiento, para esto se introdujeron los mismos valores de las variables de entrada y de salida en una nueva hoja de cálculo de Excel, se seleccionaron los datos y se le indicó al software que los datos elegidos serían para el test. Se seleccionó la pestaña “test” de la barra de herramientas del software, se desplegó una nueva ventana con las características de los datos elegidos, se activó la opción “test” y el software realizó la validación de la red neuronal (Figura 8).

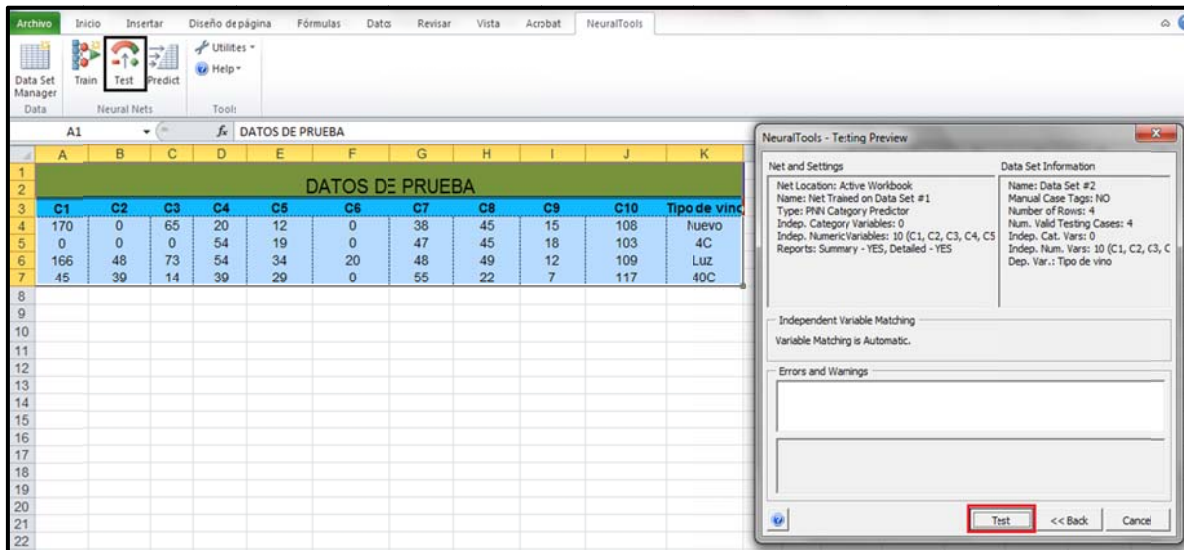


Figura 8. Selección de datos para la validación

3.8.2. Redes neuronales para la predicción de cantidad de atributo sensorial

Para la realización de estas redes neuronales se siguieron los mismos procedimientos realizados para la construcción de las redes anteriores, con la única diferencia que las variables de salida se refieren a los valores de evaluación de los atributos sensoriales (Tabla 12), denominando a cada atributo sensorial en el software como variable numérica. Al final la red neuronal entrenada debe ser capaz de proporcionar en la validación una calificación correcta del atributo sensorial.

Tabla 12. Calificaciones de atributos sensoriales para vino blanco

ATRIBUTO	Vino normal	Vino a 4°C	Vino al sol	Vino a 40°C
TORONJA-O	5.4	5.4	2.4	5.4
CEREAL-O	3.9	1.9	4.2	3.6
MANZANA-O	8.8	6.4	8.8	8.4
PUNGENTE-O	6.8	3.8	2.9	5.6
COL-O	6.6	7	3	2.6
HULE-O	5.5	5	3	2.5
MADERA-O	3.9	4.6	2.2	2.5
FLORAL-O	6	4.8	9	5
CIRUELA-S	4.1	4.5	8	5
ACIDO-S	6.6	7.4	3.4	4.6
ASTRINGENCIA-S	9	8.3	4.6	5.8
AMARGO-S	5.4	7.5	3.8	6.6

La letra O indica atributo de olor y la S atributo de sabor.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. METODOLOGÍAS HS-SPME

Las técnicas HS-SPME para cada alimento fueron establecidas después de la realización de las gráficas de los niveles de cada factor contra el área bajo la curva de cada uno de los compuestos. En cada gráfica se puede apreciar cuales son los niveles de cada factor que permiten una buena extracción de los compuestos volátiles (mayor área bajo la curva). En las gráficas se muestran las barras de error estándar que permiten explicar la variación de las observaciones para cada nivel y con ello, determinar si existe diferencia significativa entre cada factor. De esta forma, con la interpretación de las gráficas y las barras de error se decidió el uso de un nivel u otro, ya que es fácil observar el comportamiento de los datos obtenidos y el nivel del factor que permite obtener una mejor extracción de compuestos de sabor.

4.1.1. Técnica HS-SPME para vino blanco

Después de la exploración de diferentes niveles de los factores (cantidad de muestra, temperatura, tiempo de extracción y sal) estudiados para el vino, se encontró que los niveles (en cada factor explorado) que permitieron una mejor extracción de los compuestos volátiles en el espacio de cabeza - microextracción en fase sólida (HS-SPME) fueron 8 g de vino blanco, 40 °C, 120 minutos y con adición de sal.

En la Figura 9 se grafica el peso de la muestra contra la suma del área bajo la curva de los principales picos presentes en los cromatogramas. Se puede observar que los valores de 8 y 12 g proporcionan un área mayor. Los valores de 4 y 16 g dan lugar a áreas igualmente menores. Cabe indicar que el área para los valores de 8 y 12 g no varían significativamente así con base a esta información se tomó 8 g como la cantidad de muestra para la extracción de compuestos volátiles de vino.

También se puede concluir que una cantidad de muestra mayor a 20 ml del vial no siempre proporciona una gran cantidad de compuestos volátiles, ya que con 16 g de muestra se obtuvo el

menor rendimiento de la exploración. Este efecto es explicado por Pawliszyn (1999), quien menciona que cantidades de muestra mayores a la mitad del recipiente que las contiene pueden ocasionar una saturación del espacio de cabeza por parte de los compuestos volátiles, o bien una falta de liberación de compuestos volátiles hacia el espacio gaseoso. Con el fin de aumentar la eficiencia de la extracción, el volumen del espacio de cabeza en el vial debe ser minimizado, por lo general el vial se llena hasta la mitad de su capacidad. Sin embargo se ha encontrado que el equilibrio se alcanza tres veces más rápido si 1 cm^3 de líquido se coloca en un vial de 5 cm^3 que si 10 cm^3 de líquido se colocan en un vial de 50 cm^3 (Pawliszyn, 1997), lo que explica que con una cantidad de muestra pequeña se obtiene un mejor rendimiento.

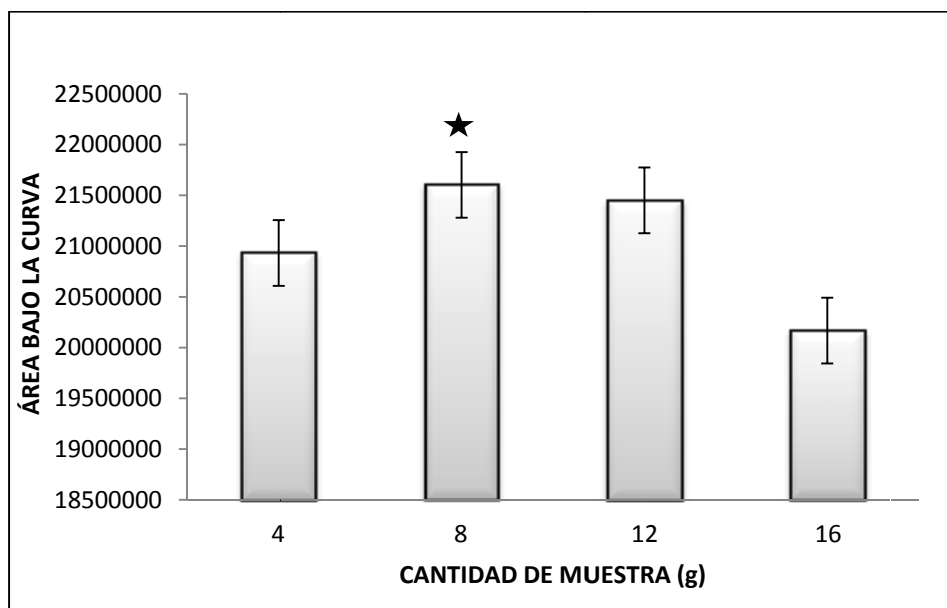


Figura 9. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de vino blanco

En cuanto a la evaluación del efecto de la temperatura en el vino, la mayor área bajo la curva de los picos se obtuvo a $40 \text{ }^\circ\text{C}$, sobresaliendo de las temperaturas de 35 , 45 y $50 \text{ }^\circ\text{C}$ en los cuales se encontró una menor cantidad de área bajo la curva (Figura 10). Este resultado permitió elegir $40 \text{ }^\circ\text{C}$ como la mejor temperatura para la extracción de los compuestos volátiles de vino. Esta temperatura de extracción ha sido reportada en otros trabajos. Carrillo y col., (2006) utilizaron una temperatura de $40 \text{ }^\circ\text{C}$ para la extracción de compuestos volátiles en espacio de cabeza estático para vino tinto. Rocha y col., (2006) exploraron diferentes temperaturas en una optimización de parámetros de SPME para vino blanco, en su optimización encontraron, que de entre todas las temperaturas ensayadas la temperatura de $40 \text{ }^\circ\text{C}$ proporcionaba los valores de área cromatográfica más grandes para todos los grupos de compuestos químicos.

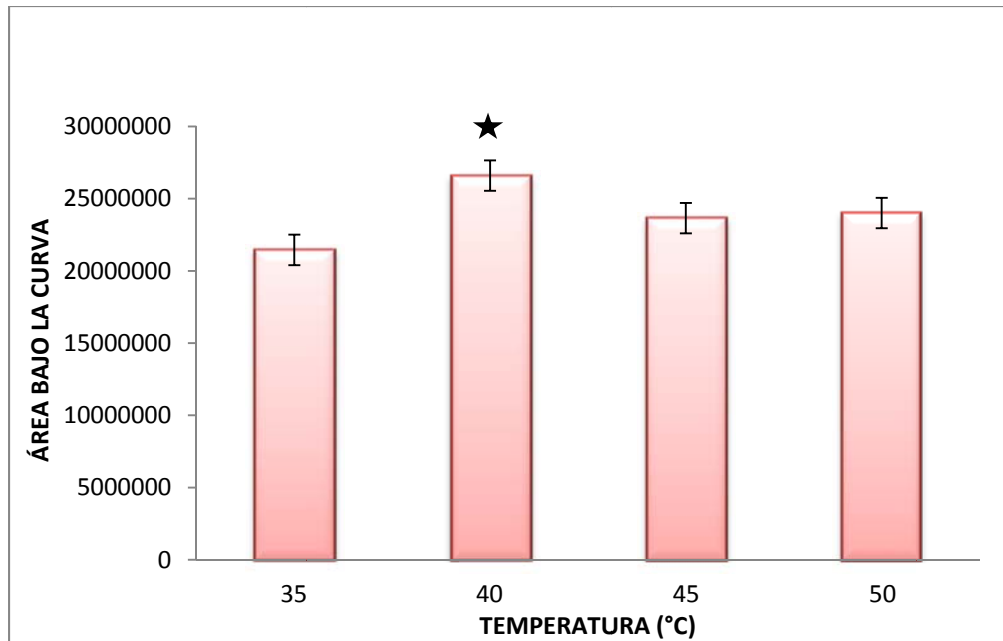


Figura 10. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de vino blanco

En la Figura 11 se presenta la gráfica del efecto de la variable tiempo de extracción sobre el área bajo la curva de los picos de los compuestos volátiles. Se puede observar que la mayor área se obtuvo a los 180 min, sin embargo esta no presenta diferencia significativa con un tiempo de extracción de 120 min por lo que se decidió utilizar 120 min como el mejor tiempo de extracción para los compuestos volátiles de vino. La alta concentración de compuestos obtenidos en los valores más altos de tiempo de extracción lo explica Pawliszyn (1997), quien menciona que conforme se aumenta el tiempo de extracción, la concentración de los compuestos volátiles se incrementará en la fibra, hasta alcanzar un equilibrio definido como el estado en el cual la cantidad del analito extraído se mantiene constante. Sin embargo, cuando se analiza la fracción volátil y semivolátil de un alimento, el tipo de compuestos que se extraen con la técnica SPME es muy distinto y precisan tiempos muy variables para alcanzar el equilibrio. Para los volátiles el tiempo para alcanzar el equilibrio es muy corto y para algunos compuestos semivolátiles el tiempo necesario para llegar al punto de equilibrio es muy elevado, en estos casos se opta por hacer un corte en el tiempo de extracción para no alargar el análisis (Pawliszyn, 1997).

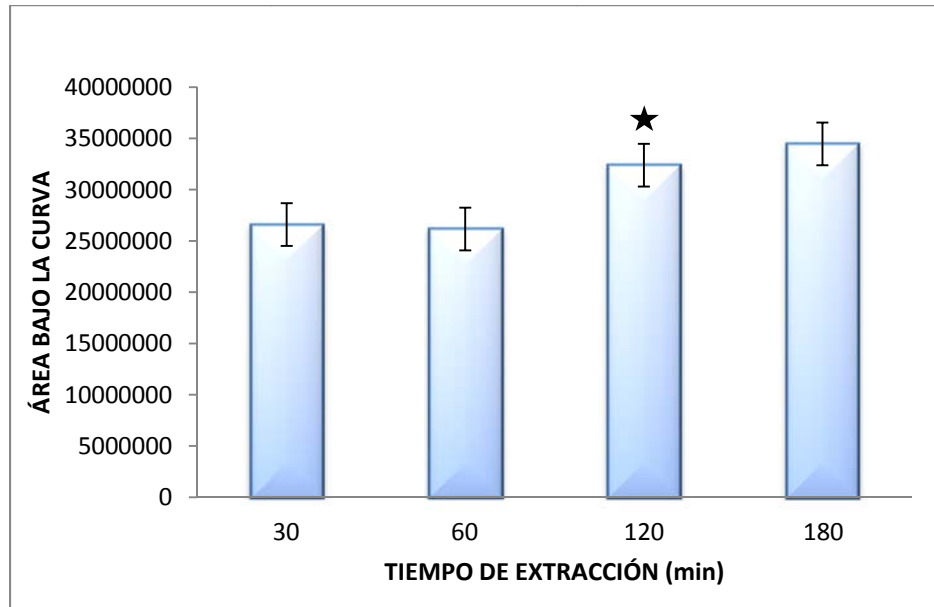


Figura 11. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de vino blanco

En lo que se refiere al análisis de adición de sal, se observó que los valores de mayor área bajo la curva se obtuvieron añadiendo sal a la muestra (Figura 12), por lo que se tomó este nivel como la mejor condición de la técnica de extracción HS-SPME para los compuestos volátiles de vino. El efecto que tiene la sal (efecto *salting out*) en la técnica HS-SPME es explicado por Pawliszyn (1997), quien menciona que la presencia de cloruro de sodio en las muestras incrementa la extracción de compuestos volátiles debido a que modifica el coeficiente de partición líquido-gas de los analitos. La adición de sal mejora la eficiencia de extracción al disminuir la solubilidad de los analitos en la solución, lo que aumenta la cantidad de analitos absorbidos en la fibra (Wu y col., 2000). La adición de sal en vinos ya ha sido reportada en otros trabajos. Ortega-Heras y col. (2002) utilizaron sal para propiciar el efecto *salting out* en métodos de espacio de cabeza para el estudio de la composición del aroma en vino.

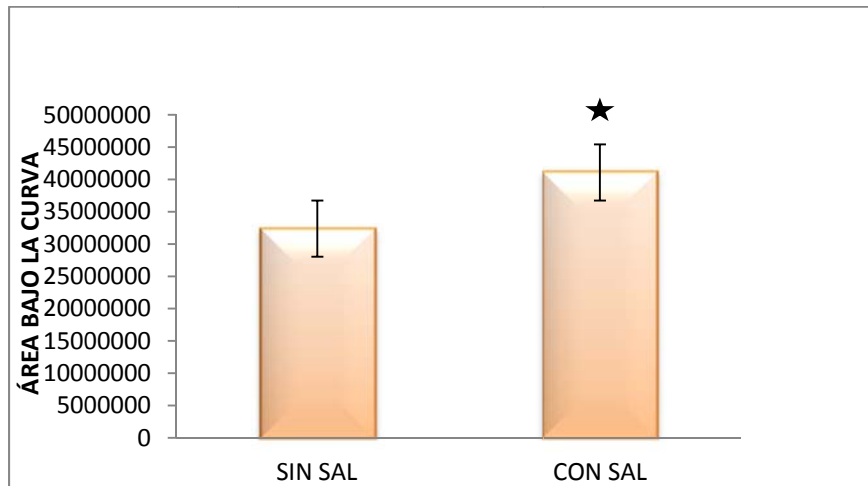


Figura 12. Evaluación del efecto de la adición de sal en los compuestos volátiles de vino blanco

4.1.2. Técnica HS-SPME para queso manchego

Después de la exploración de diferentes niveles de los factores (cantidad de muestra, temperatura, tiempo de extracción y sal) estudiados para queso, se encontró que los niveles (en cada factor explorado) que permitieron una mejor extracción de los compuestos volátiles por espacio de cabeza - microextracción en fase sólida (HS-SPME) fueron 5 g de vino blanco, 45 °C, 120 minutos con adición de sal.

En la Figura 13 se muestra la grafica que relaciona la cantidad de muestra contra el área bajo la curva de los compuestos presentes en los cromatogramas. La mayor área se obtuvo con 5 g de muestra y el área menor con los niveles de 10 y 16 g. Aunque los 3 niveles tuvieron valores cercanos, por simplicidad se decidió usar 5 g de muestra para la técnica HS-SPME en queso. Lo anterior se puede explicar considerando el trabajo de Pawliszyn (1997) quien hace referencia que cantidades de muestra mayores a la mitad del frasco donde están contenidas, pueden ocasionar una disminución en la eficiencia de extracción de compuestos volátiles, demostrando con esto que no se necesita una gran cantidad de muestra para el análisis de compuestos volátiles en queso. Frank y col., (2004) utilizaron cantidades de muestra pequeñas (7g) para la caracterización de compuestos de aroma de queso Cheddar por medio de SPME y mencionan que la cantidad utilizada fue suficiente para realizar una buena caracterización.

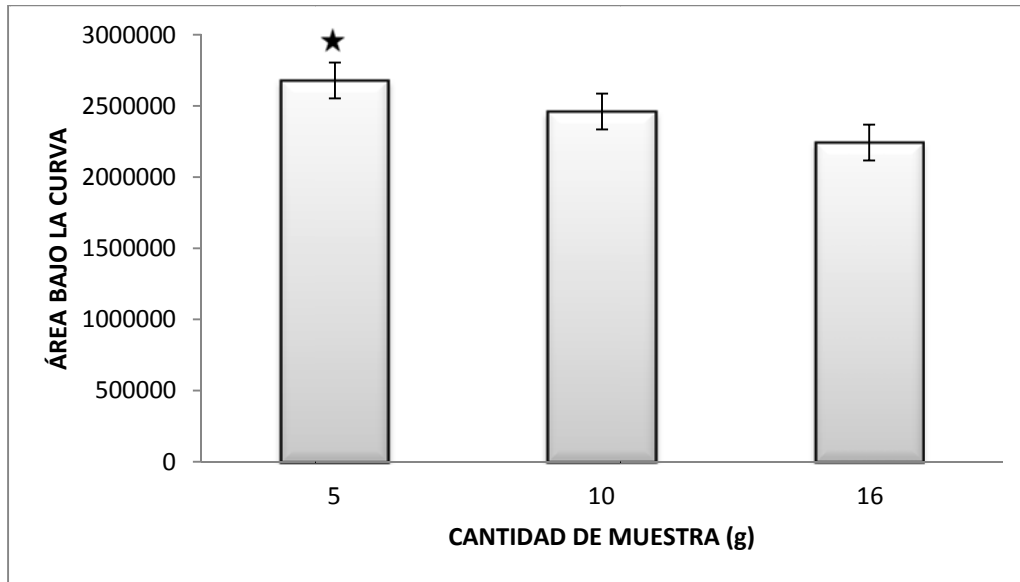


Figura 13. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de queso manchego

En cuanto al análisis del efecto de la temperatura en queso, los picos con mayor área bajo la curva se obtuvieron con una temperatura de 50 °C como se observa en la Figura 14, sin embargo la temperatura de 45 °C se encuentra muy cercana a estos valores ya que no hay diferencia significativa entre los tratamientos de 50 y 55 °C. Considerando lo anterior se eligió el tratamiento de 45 °C como la mejor temperatura de extracción de los compuestos volátiles de queso. La gráfica también muestra que con 55 °C el área bajo la curva disminuye ligeramente por lo que no siempre una alta temperatura nos proporcionara la mayor cantidad de compuestos volátiles extraídos por la fibra. El efecto de la temperatura sobre los compuestos volátiles es explicado por Pawliszyn (2002), quien menciona que un aumento de la temperatura de extracción facilita el transporte de los analitos de la solución hacia el espacio de cabeza, acelerando la sorción de sustancias sobre la fibra. Sin embargo, un aumento excesivo de temperatura puede provocar una prematura desorción. Menciona que generalmente la temperatura óptima depende de la composición de la matriz, de sus componentes y de la fase estacionaria utilizada. Wolf y col (2010) realizaron un estudio de la composición química del perfil de compuestos volátiles de queso Reggiano argentino, en su estudio utilizaron una temperatura de 45 °C como condición de extracción de la técnica SPME.

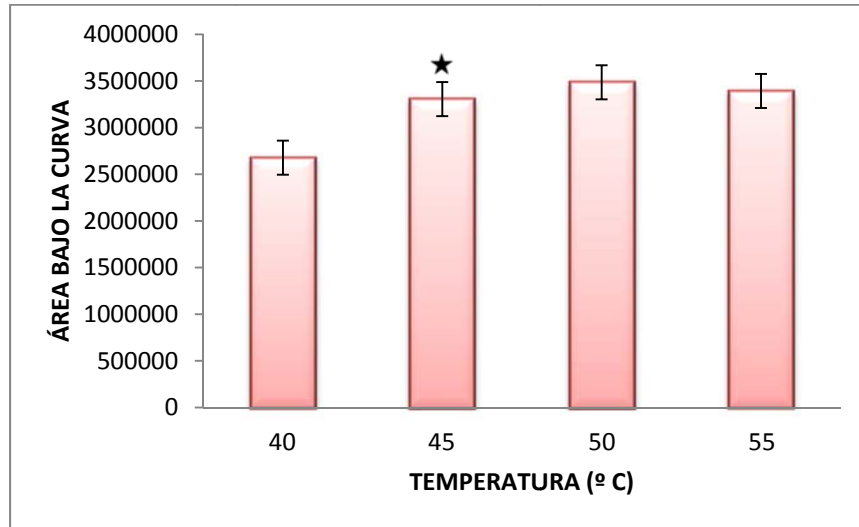


Figura 14. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de queso manchego

En la Figura 15 se presentan las áreas obtenidas para los picos detectados en queso por efecto del tiempo de extracción; las áreas más grandes corresponden a 120 y 180 minutos, por lo que se decidió utilizar 120 minutos como el tiempo de extracción de compuestos volátiles de queso debido a que no hay diferencia significativa con el tiempo de 180 minutos. La explicación de porqué a tiempos prolongados se extrae mayor cantidad de compuestos es realizada por Pawliszyn (2002), quien menciona que un tiempo de extracción largo favorece a la ocupación de más sitios en la fibra por las moléculas del analito, sin embargo con un tiempo demasiado prolongado en donde todos los sitios están ocupados no afecta a la eficiencia de pre-concentración y a veces puede causar desorción.

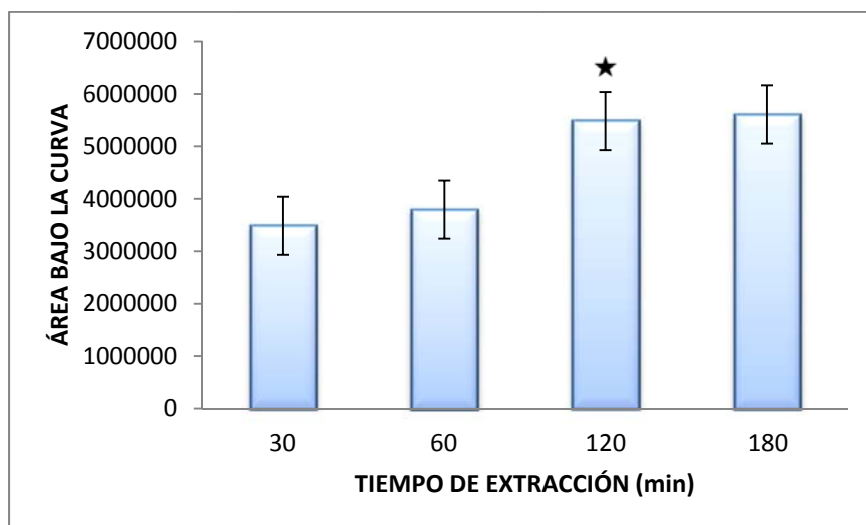


Figura 15. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de queso manchego

En la evaluación del efecto del contenido de sal en la muestra de queso, las mayores áreas de los compuestos se obtuvieron en los tratamientos donde se añade sal a la muestra. Esto se observa en la Figura 16 donde el área más grande bajo la curva corresponde a la muestra de queso que contiene sal, aunque el incremento en sensibilidad no fue mucho con respecto a la muestra sin sal, se decidió utilizar sal, pero probablemente hubiera sido lo mismo no utilizarla. El efecto de la sal en quesos manchegos ha sido estudiado anteriormente. Escriche y col (1999) realizaron un estudio sobre el desarrollo de compuestos volátiles en el queso manchego y como puede ser afectado por el contenido de sal en niveles altos, mencionan que el contenido de sal tiene una influencia en la acción de las enzimas y microorganismos responsables del desarrollo de compuestos volátiles.

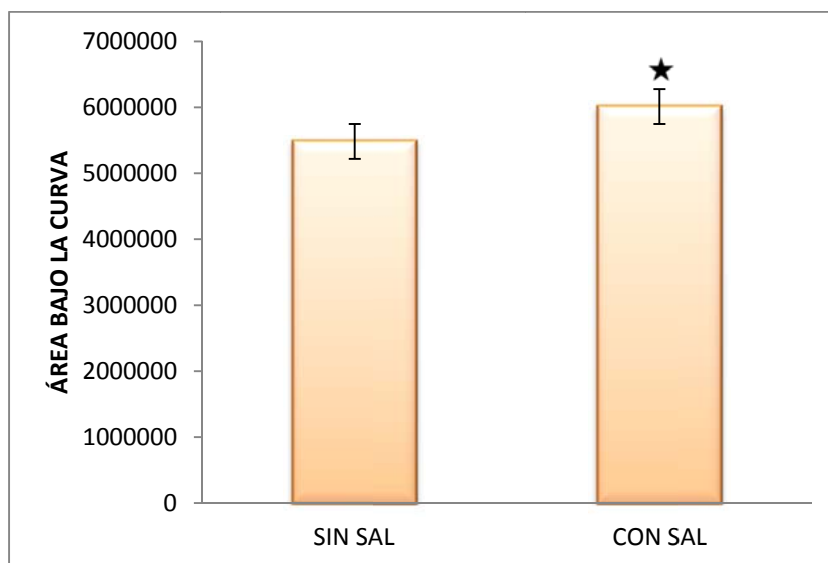


Figura 16. Evaluación del efecto de la adición de sal en los compuestos volátiles de queso manchego

4.1.3. Técnica HS-SPME para jamón cocido

En el estudio de los diferentes niveles de los factores (cantidad de muestra, temperatura, tiempo de extracción y sal) de extracción para jamón, se encontró que los niveles (en cada factor explorado) que permitieron una mejor extracción de los compuestos volátiles por HS-SPME fueron 10 g de vino blanco, 50 °C, 120 min con adición de sal.

En el análisis los compuestos volátiles del jamón, se determinó que la mayor área bajo la curva se obtuvo al extraer 10 g de muestra y esta es significativamente mayor que el área bajo la curva correspondiente a los valores de 5 y 16 g de muestra (Figura 17). Estos resultados permitieron establecer 10 g como la mejor cantidad de muestra para el análisis de los compuestos volátiles de jamón. Se comparó esta cantidad de muestra con cantidades utilizadas para la extracción de compuestos volátiles en matrices parecidas (jamón curado), encontrando valores muy cercanos a 10 g. Sánchez-Peña y col., (2005) realizaron la caracterización de jamones curados Franceses y Españoles, en la cual se utilizó SPME como técnica de extracción con cantidades de muestra de 5 a 10 g.

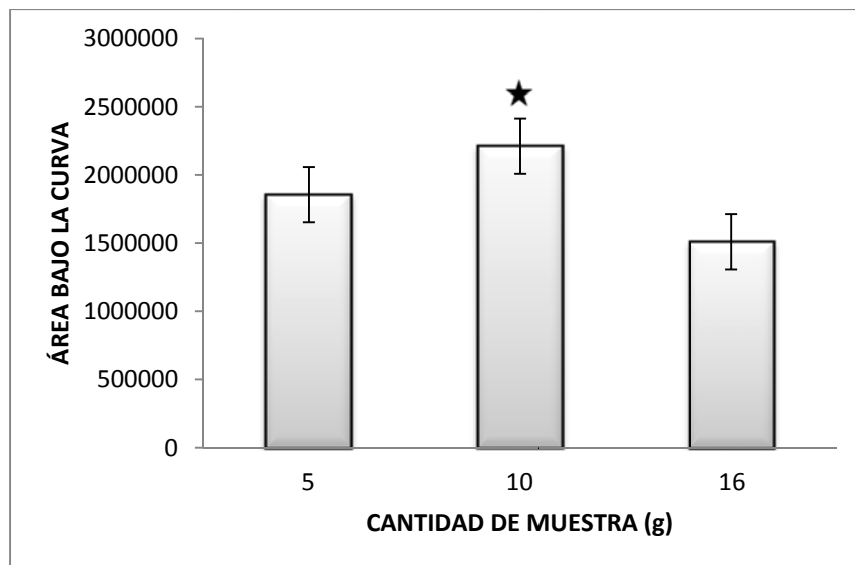


Figura 17. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de jamón cocido

En cuanto al análisis del efecto de la temperatura en los componentes de las muestras de jamón, los cromatogramas que presentaron mayor área en los picos correspondieron al ensayo que empleó una temperatura de 50 °C con una diferencia significativa con respecto a los valores obtenidos a 35, 40 y 45 °C (Figura 18) por lo que se eligió 50 °C como la mejor temperatura para la extracción de los compuestos volátiles de jamón. Se comparó esta temperatura con otras temperaturas utilizadas para la extracción de compuestos volátiles en matrices parecidas (jamón curado), encontrando valores muy cercanos a 50 °C. García-González y col., (2008), utilizaron una temperatura de 40 °C para el análisis de compuestos volátiles de jamones curados. Sánchez-Peña y col (2005) realizaron la caracterización de jamones curados franceses y españoles, en su estudio utilizaron a la SPME como técnica de concentración de compuestos volátiles ocupando una temperatura de 45° C para la extracción de los compuestos, la cual se encuentra cercana a la temperatura utilizada en este trabajo.

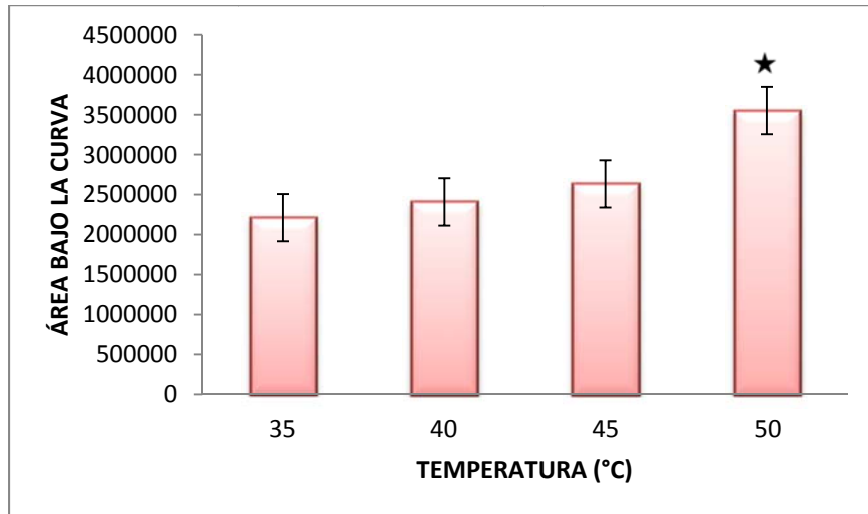


Figura 18. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de jamón cocido

En la evaluación del efecto del tiempo de extracción, se observó que la mayor área de los compuestos se obtuvo con un tiempo de extracción de 180 min. En la Figura 19 se muestran los tiempos ensayados y se observa que el área de mayor tamaño corresponde a 180 min sobresaliendo de los valores correspondientes a 30, 60 y 120 min. Sin embargo en 120 min la línea de error se traslapa con la de 180 min, lo que indica que no hay diferencia significativa. De acuerdo a esto se eligió 120 minutos como el mejor tiempo de extracción de compuestos volátiles de jamón. Sánchez Peña y col., (2005) tomaron un tiempo de extracción de 180 minutos para el análisis de compuestos volátiles de jamones curados, debido a que no exploraron niveles de tiempo inferiores, que quizás les hubiera ayudado a agilizar el análisis al reducir el tiempo de extracción, tal como se hizo en este trabajo.

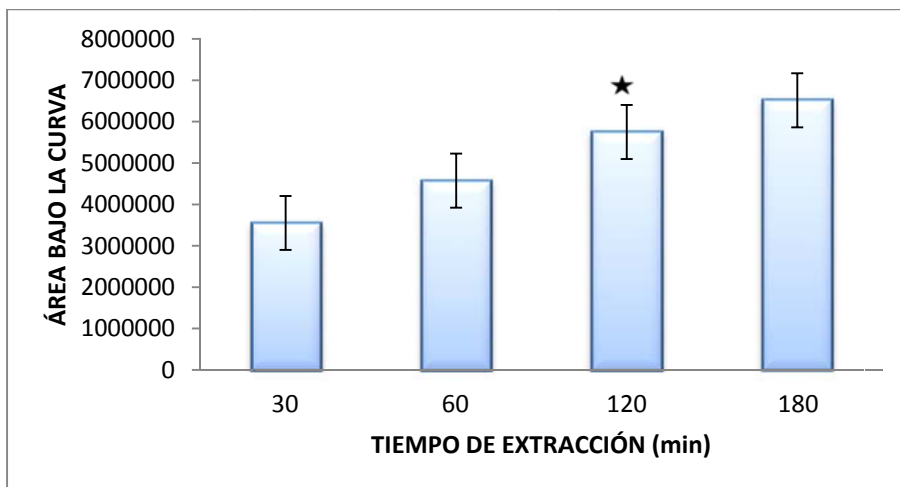


Figura 19. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de jamón cocido

Al realizar el tratamiento para evaluar el efecto de la adición de sal se observó que los valores de mayor area bajo la curva se obtuvieron cuando se agrega sal a las muestras de jamón que se refleja en una mayor cantidad de compuestos volatiles de las muestras. La Figura 20 muestra que el área mas grande bajo la curva corresponde a las muestras con sal. De acuerdo a esto, la adición de sal en las muestras está dentro de las mejores condiciones para la extracción de los compuestos volatiles de jamón. Como se ha dicho anteriormente con los demás alimentos Pawliszyn (1997) explica que la presencia de cloruro de sodio en las muestras incrementa la extracción de compuestos volátiles debido a que modifica el coeficiente de partición líquido-gas de los analitos, liberando un porcentaje mayor de la fracción volátil.

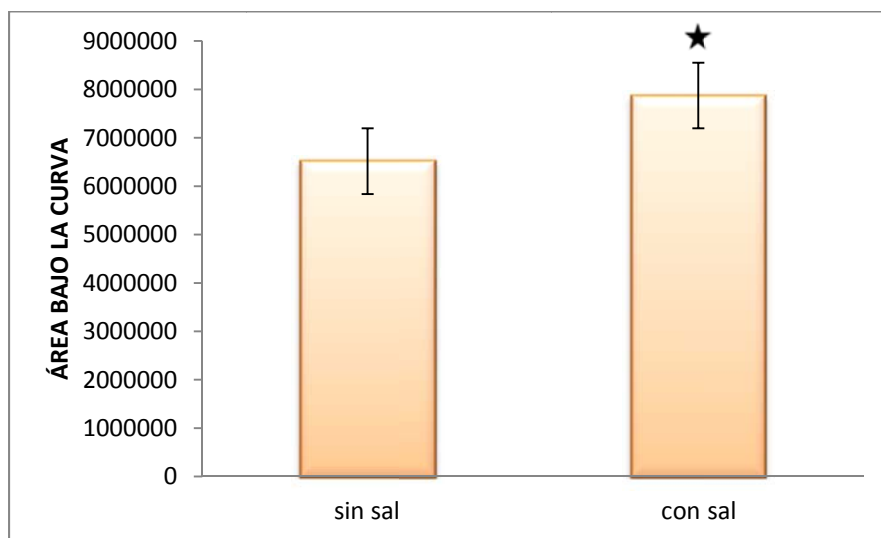


Figura 20. Evaluación del efecto de la adición de sal en los compuestos volátiles de jamón cocido

4.1.4. Técnica HS-SPME para papa frita

En el estudio de los diferentes niveles de los factores (cantidad de muestra, temperatura, tiempo de extracción, adición de agua y agitación) de extracción para papa frita, se encontró que los niveles (en cada factor explorado) que permitieron una mejor extracción de los compuestos volátiles por espacio de cabeza - microextracción en fase sólida (HS-SPME) fueron 5 g, 45 °C, 60 min, con agua y con agitación.

En el análisis del efecto de la cantidad de muestra en los componentes de las muestras de papa frita, se determinó que la mayor área de los componentes en los cromatogramas se obtuvo con 5 g de muestra superando de manera significativa a los niveles de 1, 3 y 10 g, por lo que se eligió 5 g como la mejor cantidad de muestra para la extracción de los compuestos volátiles de papa frita. Un antecedente sobre la elección de esta cantidad de muestra para la extracción de compuestos volátiles de papa frita por medio de SPME se muestra en el trabajo de Majcher y col., (2009) donde utilizaron 5 g de muestra para extraer compuestos volátiles de papa frita y compararlos con otros métodos de extracción.

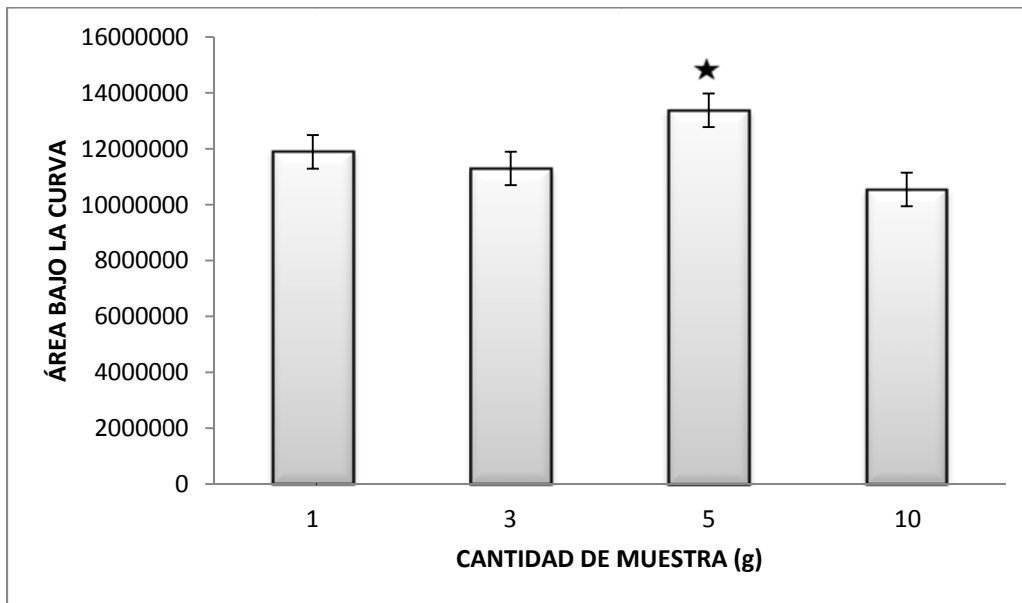


Figura 21. Evaluación del efecto de la cantidad de muestra en los compuestos volátiles de papa frita

En cuanto al análisis del efecto de la temperatura en los componentes de las muestras de papa frita, el área de mayor tamaño se obtuvo a 45 °C. En la Figura 22 el área más grande bajo la curva se obtiene a 45 °C, superando a los niveles de 50 y 55 °C. Estos resultados permitieron establecer el más bajo de los niveles como la mejor temperatura para la extracción de los compuestos volátiles. Este comportamiento puede ser explicado porque algunos compuestos volátiles regresan del aire hacia la matriz y pueden quedar atrapados por la gelatinización que se produce en la matriz por altas temperaturas. Vinaixa y Col., (2005) utilizaron 50 °C para extraer compuestos volátiles de papa frita y detectar compuestos de rancidez por medio de espectrometría de masas, por lo que la elección de 45 °C como temperatura de extracción en este trabajo está dentro de los niveles utilizados en otras metodologías SPME para la extracción de compuestos volátiles de papa frita.

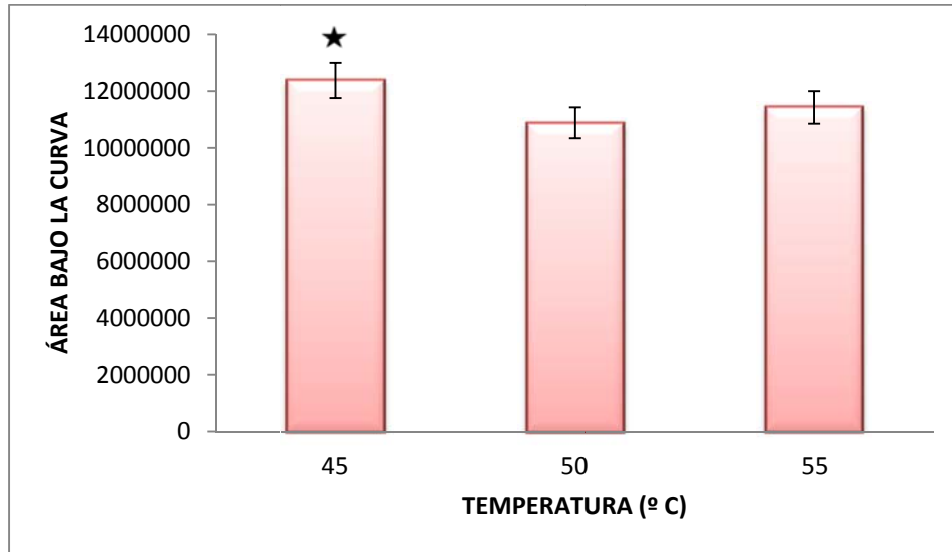


Figura 22. Evaluación del efecto de la temperatura en los compuestos volátiles de papa frita

En el análisis realizado para la obtención del mejor tiempo de extracción de los compuestos volátiles de papa frita, se observó que la mayor area de los componentes se obtuvo con 120 min de extracción superando a los niveles obtenidos a 30, 60 y 180 min. Sin embargo no hay diferencia significativa entre el nivel de 120 min y el de 60 min, por lo que se eligió por mayor simplicidad 60 min como el tiempo de extracción de los compuestos volátiles de papa frita. Este tiempo de extracción ha sido reportado anteriormente en otros trabajos. Lojzova y col., (2009) utilizaron un tiempo de extracción en SPME de 60 min para analizar compuestos de aroma formados por la reacción de Maillard en papas fritas.

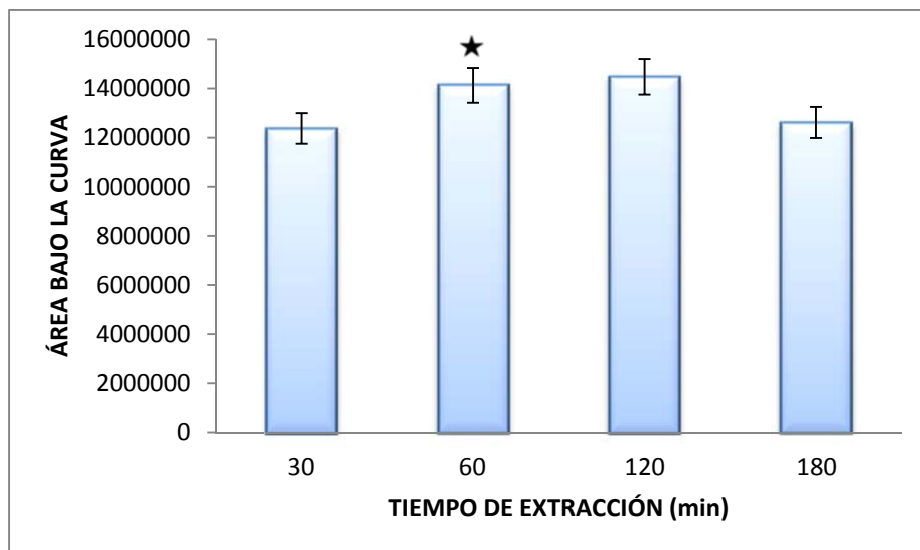


Figura 23. Evaluación del efecto del tiempo de extracción en los compuestos volátiles de papa frita

En la evaluación del efecto de la variable agitación se observó que cuando la muestra no se agitaba se formaba una masa evitando la liberación de los compuestos volátiles. Los picos con mayor área bajo la curva se obtuvieron cuando la muestra permanecía agitada. Esto se puede ver en la Figura 24 donde el área mas grande bajo la curva corresponde a la muestra con agitación. En base a esto la agitación fue tomada como condición indispensable para la extacción de los compuestos volátiles a partir de papa frita. Pawliszyn (1997) menciona que la agitación afecta de forma importante la velocidad de transferencia de masa y una disminución de la velocidad de agitación conlleva a un incremento del tiempo de extracción como una consecuencia del aumento en el transporte de masa a través de la capa estacionaria de agua que rodea la fibra.

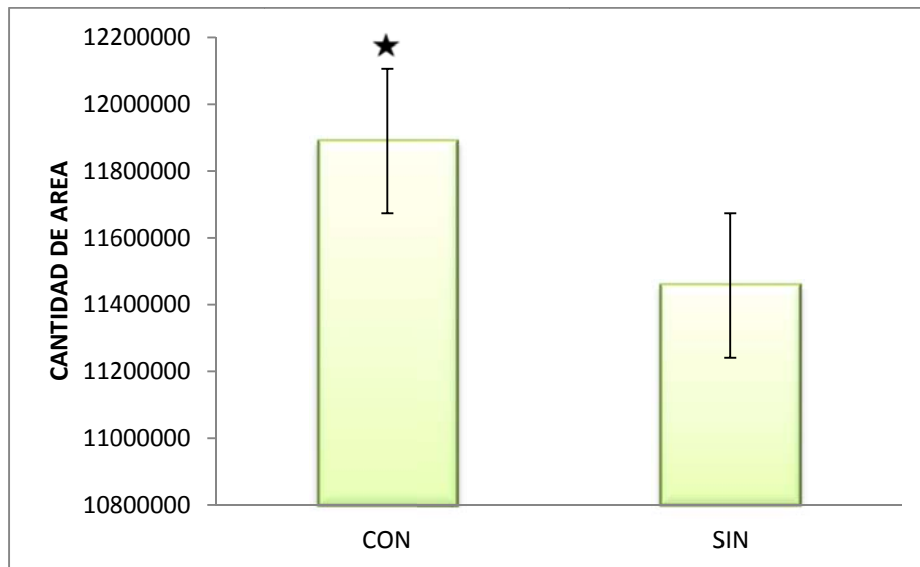


Figura 24. Evaluación del efecto de la agitación en los compuestos volátiles de papa frita

En el análisis de adición de agua en la muestra de papa frita, la mayor área de los compuestos fue obtenida con la muestra sin agua. Este efecto se puede observar perfectamente en la Figura 25 donde el valor más grande de área pertenece a la muestra sin agua, sin embargo la línea de error es más grande que la línea de error de la muestra con agua, indicando una gran variabilidad en las áreas de los compuestos de las muestras sin agua. Este efecto pudo haber ocurrido debido a que la agitación en las muestras sin agua no fue homogénea, reflejando una alta variabilidad en los valores de sus áreas. Con base en los resultados observados, se eligió añadir agua a la muestra ya que se obtenía menos variaciones en las mediciones y se tenía una mejor agitación.

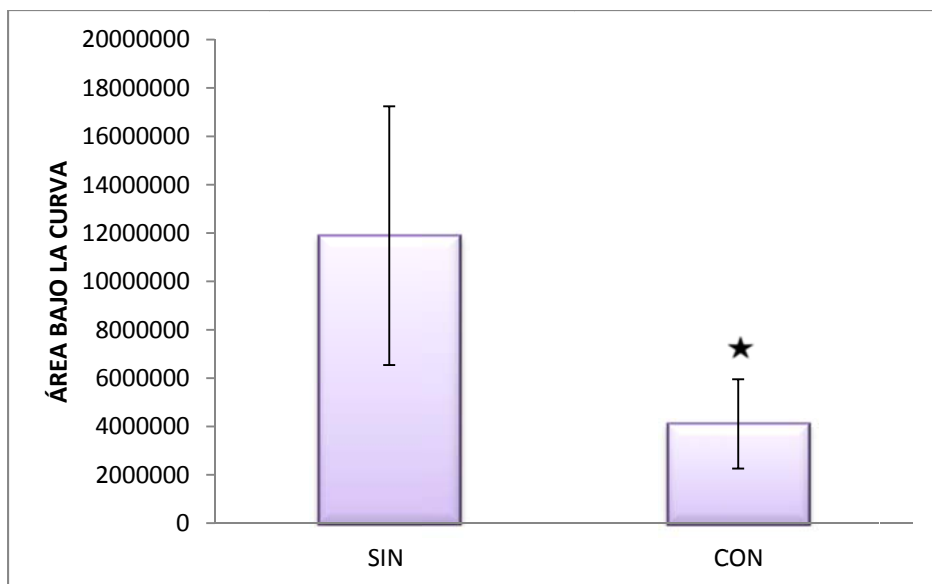


Figura 25. Evaluación del efecto del agua en los compuestos volátiles de papa frita

4.2 PERFIL DE COMPUESTOS VOLÁTILES

Los compuestos que fueron extraídos por la técnicas HS-SPME, separados por cromatografía de gases e identificados por espectrometría de masas, de cada uno de los alimentos en sus diferentes calidades, forman los perfiles químicos para cada alimento, obteniendo 184 compuestos en los productos de vino blanco, 129 compuestos para los productos de queso manchego, 120 compuestos en los productos de jamón cocido y 122 compuestos en los productos de papas fritas.

4.2.1. Perfil de compuestos volátiles de vino blanco

En el análisis realizado a los productos de diferente calidad de vino blanco se encontraron 6 aldehídos, 12 cetonas, 9 ácidos, 74 ésteres, 4 pirasinas, 26 alcoholes, 7 compuestos de azufres, 7 furanos, 11 bencenos, 2 terpenos, 22 hidrocarburos y 4 compuestos misceláneos (ver Anexo 2).

González Álvarez y col., (2011) realizaron el análisis de compuestos volátiles de 5 vinos blancos, encontrando 39 compuestos volátiles importantes para el sabor del vino blanco, entre los que mencionan como importantes a los alcoholes, terpenos, esteroides, fenoles, aldehídos y compuestos de azufre. Gómez-Míguez y col., (2007) reportaron una lista de compuestos que influyen en el sabor del vino blanco entre los que destacan tres ácidos: el ácido hexanoico, el ácido decanoico y el ácido acético, los cuales fueron encontrados en el perfil de compuestos volátiles que se obtuvo en este trabajo.

4.2.2. Perfil de compuestos volátiles de queso manchego

En el análisis realizado a los productos de diferente calidad de queso manchego se encontraron 9 aldehídos, 6 cetonas, 7 ácidos, 27 esteroides, 4 pirazinas, 15 alcoholes, 3 compuestos de azufres, 13 bencenos, 4 terpenos, 34 hidrocarburos y 7 compuestos misceláneos (ver Anexo 2). Van Leuven y col., (2008) obtuvieron un perfil de compuestos volátiles de varios tipos de quesos gouda en el cual se han reportado características semejantes al queso manchego. Los autores detectaron 63 compuestos volátiles que fueron clasificados en los siguientes grupos funcionales: aldehídos, cetonas, ácidos, esteroides, lactonas, compuestos de azufre y alcoholes. Dentro de los aldehídos importantes para el sabor del queso gouda se encuentran el heptanal y el nonanal; en las cetonas la 2-Heptanona y la 2-Undecanona y dentro de los ácidos se encuentran el ácido butanoico, el ácido hexanoico, el ácido nonanoico y el ácido decanoico. Todos estos compuestos fueron encontrados en el perfil de compuestos volátiles de queso que fue obtenido en este trabajo.

4.2.3. Perfil de compuestos volátiles de jamón cocido

En el análisis realizado a los productos de diferente calidad de jamón cocido se encontraron 18 aldehídos, 4 cetonas, 6 ácidos, 7 esteroides, 1 pirasina, 33 alcoholes, 4 compuestos de azufres, 3 furanos, 14 bencenos, 9 terpenos, 20 hidrocarburos y 1 compuesto misceláneo (ver Anexo 2). Leroy y col., (2009) realizaron un análisis del jamón cocido encontrando un perfil de 35 compuestos volátiles importantes para el sabor. Entre los compuestos identificados se encuentran el tolueno, hexanal, dodecano, D-limoneno, estireno, tridecano, 1-hexanol, nonanal, ácido acético, benzaldehído, 1-octanol, 1-Nonanol y Fenol. Estos compuestos también fueron identificados en el perfil de compuestos volátiles de jamón cocido realizado en el presente trabajo.

4.2.4. Perfil de compuestos volátiles de papa frita

En el análisis realizado a los productos de diferente calidad de papa frita se encontraron 26 aldehídos, 12 cetonas, 5 ácidos, 15 ésteres, 20 pirazinas, 17 alcoholes, 4 compuestos de azufres, 3 furanos, 22 bencenos, 3 terpenos, 31 hidrocarburos y 14 compuestos misceláneos (ver Anexo 2). Van Loon y col., (2005) determinaron un perfil de compuestos volátiles importantes para el sabor de papa frita determinando 122 compuestos por medio de GS-MS. Algunos de los compuestos identificados fueron hexanal, nonanal, decanal, (E)-2-nonanal, 2-hexanal, 2-5-dimetilpirazina, 2-etil-6-metilpirazina, 3-etil-2,5-dimetilpirazina, 2-etil-3,5-dimetilpirazina, 2,3-dietil-5-metilpirazina, 2,3-dietil-5-metilpirazina, 3,5-dietil-5-metilpirazina, 1-octen-3-ol y limoneno. Estos compuestos también fueron identificados en el perfil de compuestos volátiles de papa frita realizado en el presente trabajo.

4.3. EVALUACIÓN DE LOS ALIMENTOS MEDIANTE DEL PANEL DESCRIPTIVO CUANTITATIVO

En muchas ocasiones es cuestionado el uso del panel de jueces entrenado por el empleo de un bajo número de jueces; sin embargo el uso de un panel asegura una buena respuesta, debido a que su entrenamiento se realiza de forma adecuada para minimizar las variaciones en las respuestas. No siempre se necesita de un número elevado de personas para la evaluación de un alimento, ya que un panel de jueces con un grupo de personas reducido es más que suficiente, siempre y cuando se siga un entrenamiento adecuado. Así, el uso de 5 jueces entrenados para el análisis descriptivo cuantitativo considerado en el presente estudio fue adecuado, ya que permitió un rápido entrenamiento, la obtención de respuestas concretas, así como una buena evaluación de los productos de diferente calidad de cada alimento.

4.3.1. Evaluación de los productos de diferente calidad de vino blanco

La Tabla 13 presenta los atributos que generó el panel de jueces durante las 3 primeras sesiones de entrenamiento y sobre los cuales se trabajó a lo largo de su desarrollo. Se obtuvieron 8 atributos de olor y 4 atributos de sabor definidos de manera unánime por el panel de jueces entrenados y su presencia fue comprobada por medio de una sustancia de referencia.

Tabla 13. Atributos seleccionados por el panel sensorial para vino

OLOR	SABOR
Cascara de toronja	Ciruela pasa
Cereal	Acido
Manzana	Astringente
Pungente	Amargo
Col cocida	
Hule	
Madera	
Floral	

Cadot y col., (2010) evaluaron sensorialmente varios vinos a través de un panel sensorial descriptivo cuantitativo utilizando atributos semejantes a los que se encontraron en este trabajo; algunos de los atributos utilizados fueron pimiento, madera, ácido, ciruela, amargo y astringente. En la Tabla 14, se muestra las calificaciones impartidas por los jueces del panel sensorial hacia los 4 productos de diferente calidad de vino blanco, los cuales fueron evaluados conforme a los atributos sensoriales ya mencionados. La evaluación fue realizada una vez que el panel de jueces estuviera completamente familiarizado con los atributos, calificando cada uno de los productos de diferente calidad en una escala del 0 al 14.

Tabla 14. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de vino

OLOR	<i>Vino a 4 °C</i>	<i>Vino al sol</i>	<i>Vino a 40 °C</i>	<i>Vino normal</i>
<i>Cáscara de toronja</i>	5.4	2.4	5.4	5.4
<i>Cereal</i>	1.9	4.2	3.6	3.9
<i>Manzana</i>	6.4	8.8	8.4	8.8
<i>Pungente</i>	3.8	2.9	5.6	6.8
<i>Col cocida</i>	7	3	2.6	6.6
<i>Hule</i>	5	3	2.5	5.5
<i>Madera quemada</i>	4.6	2.2	2.5	3.9
<i>Floral</i>	4.8	9	5	6
SABOR				
<i>Ciruela pasa</i>	4.5	8	5	4.1
<i>Acido</i>	7.4	3.4	4.6	6.6
<i>Astringente</i>	8.3	4.6	5.8	9
<i>Amargo</i>	7.5	3.8	6.6	5.4

Se realizó un análisis de componentes principales (Figura 26) con las calificaciones emitidas por el panel de jueces entrenados, el cual muestra la tendencia de cada atributo sensorial hacia del vino de diferente calidad. Se puede observar que los atributos que definen el sabor y el olor de un vino

normal son pungente, astringencia, toronja y hule, en el vino a 4 °C los atributos que definen su sabor y olor son amargo, madera quemada, col y acido, para el vino al sol los atributos que lo describen mejor son ciruela y floral y en el vino a 40 °C los atributos que definen su sabor y olor son cereal y manzana. De acuerdo a esto podemos decir que los vinos modificados en su calidad con temperatura y exposición a la luz solar presentan un sabor y un olor más dulce. En cuanto al vino almacenado en refrigeración y el vino en condiciones normales presentaron notas más astringentes y amargas. Green y Frankmann, (1987) mencionan que muchos factores pueden afectar la capacidad de una persona para detectar e identificar sensaciones gustativas al probar un vino, entre ellos la temperatura. Mencionan que el enfriamiento reduce la sensibilidad a los azúcares y alcaloides amargos, no obstante a esto las bajas temperaturas parecen aumentar la percepción de la amargura y de la astringencia.

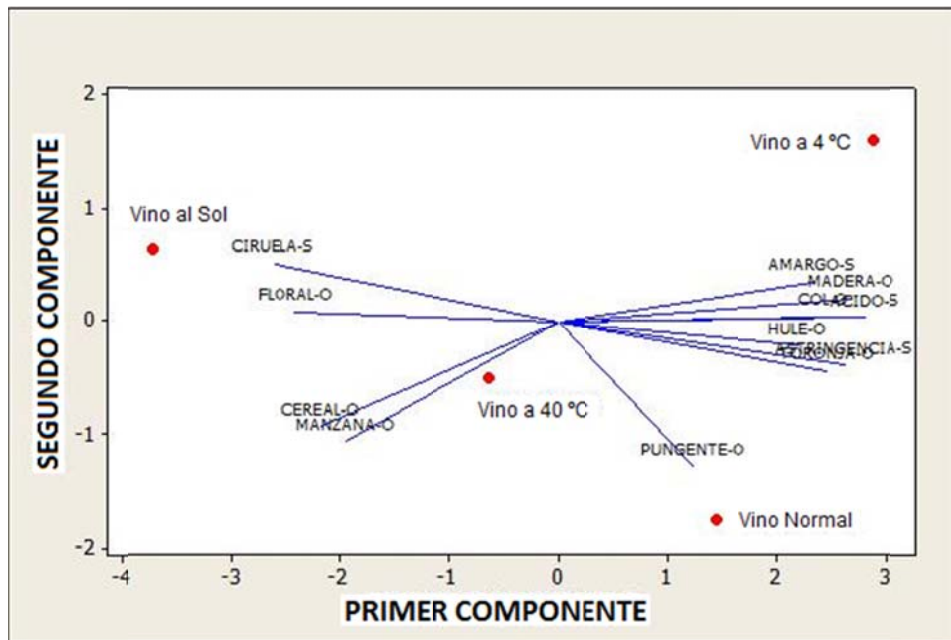


Figura 26. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de vino blanco.

González Álvarez y col., (2011) realizaron la caracterización sensorial de 5 tipos de vinos blancos, utilizando un panel sensorial cuantitativo de jueces entrenados y el análisis de componentes principales; 3 de los vinos utilizados presentaron mayor afinidad con notas cítricas, pungentes, ácidas y astringentes, lo cual coincide a lo obtenido en este trabajo donde el vino en condiciones normales es descrito en su mayoría en olor y sabor por los atributos toronja (notas cítricas), pungente y astringente. De acuerdo a esto se puede decir que los atributos elegidos para describir el sabor y olor del vino en condiciones normales son favorables para ser evaluarlo sensorialmente.

4.3.2. Evaluación de los productos de diferente calidad de queso manchego

La Tabla 15 presenta los atributos que generó el panel de jueces entrenado durante las 3 primeras sesiones de entrenamiento y sobre los cuales se trabajó durante su desarrollo. Se obtuvieron 6 atributos de olor y 5 atributos de sabor definidos de manera unánime por el panel de jueces entrenados y su presencia fue comprobada por medio de una sustancia de referencia.

Tabla 15. Atributos seleccionados por el panel sensorial para queso

OLOR	SABOR
Papaya	Umami
Nata	Acido
Leche agria	Salado
Huevo	Dulce
Paja	Crema
Pies	

Van Leuven y col., (2008) realizaron una caracterización de quesos gouda por medio de un análisis químico y de un panel de jueces descriptivo cuantitativo el cual utilizo 6 atributos de olor y 5 atributos de sabor, el mismo número de atributos que se utilizó en este trabajo, entre los atributos utilizados que concuerdan con los atributos que se utilizaron este trabajo, se encuentran crema, dulce, sal, huevo, nata, animal (paja), agrio (acido) y frutal (papaya).

En la Tabla 16 se presentan las calificaciones otorgadas por los jueces del panel sensorial hacia los 3 productos de diferente calidad de queso manchego, los cuales fueron evaluados conforme a los atributos sensoriales ya mencionados. La evaluación fue realizada una vez que el panel de jueces estuviera completamente familiarizado con los atributos, calificando cada uno de los productos de diferente calidad en una escala del 0 al 14.

Tablas 16. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de queso

OLOR	<i>Queso al sol</i>	<i>Queso a 4 °C</i>	<i>Queso normal</i>
<i>Papaya</i>	6.8	6.4	3.8
<i>Nata</i>	4.6	4.8	5.8
<i>Leche agria</i>	1.3	8.7	5.4
<i>Huevo</i>	3.8	2.3	2.4
<i>Paja</i>	2	6	3.8
<i>Pies</i>	3.8	5.3	2.1
SABOR			
<i>Umami</i>	2.8	6.8	6.8
<i>Acido</i>	5.1	9	4
<i>Salado</i>	3.6	5.1	5.8
<i>Dulce</i>	3.6	1.8	4.5
<i>Crema</i>	5.2	11.4	5

Se realizó un análisis de componentes principales (Figura 27) con las calificaciones emitidas por el panel de jueces entrenados, el cual muestra la tendencia de cada atributo sensorial hacia del queso de diferente calidad. Se observa que el sabor y olor del queso a 4 °C se describe en su totalidad con los atributos a crema, ácido, pies y papaya, para el queso expuesto al sol su sabor es descrito por el atributo a huevo y para el queso en condiciones normales su sabor y olor se describe con los atributos paja, leche agria, umami, salado, dulce y nata. De acuerdo a esto se puede decir que el queso en condiciones normales y el queso a 4 °C son descritos en su mayoría por todos los atributos, en contraste del queso expuesto al sol donde el atributo de olor a huevo es el que lo caracteriza. Van Leuven y col., (2008) encontraron que los quesos gouda (matriz semejante al queso manchego) presentan en mayor proporción atributos de olor y sabor como dulce, nata, amargo, frutal, floral y animal, comparando estos atributos con los obtenidos en este trabajo observamos semejanza con los atributos del queso en condiciones normales como dulce, nata, paja (animal) y con los atributos del queso a 4 °C como papaya (frutal), lo que indica que los atributos elegidos por el panel sensorial para evaluar la calidad del queso son adecuados para describir su sabor y olor.

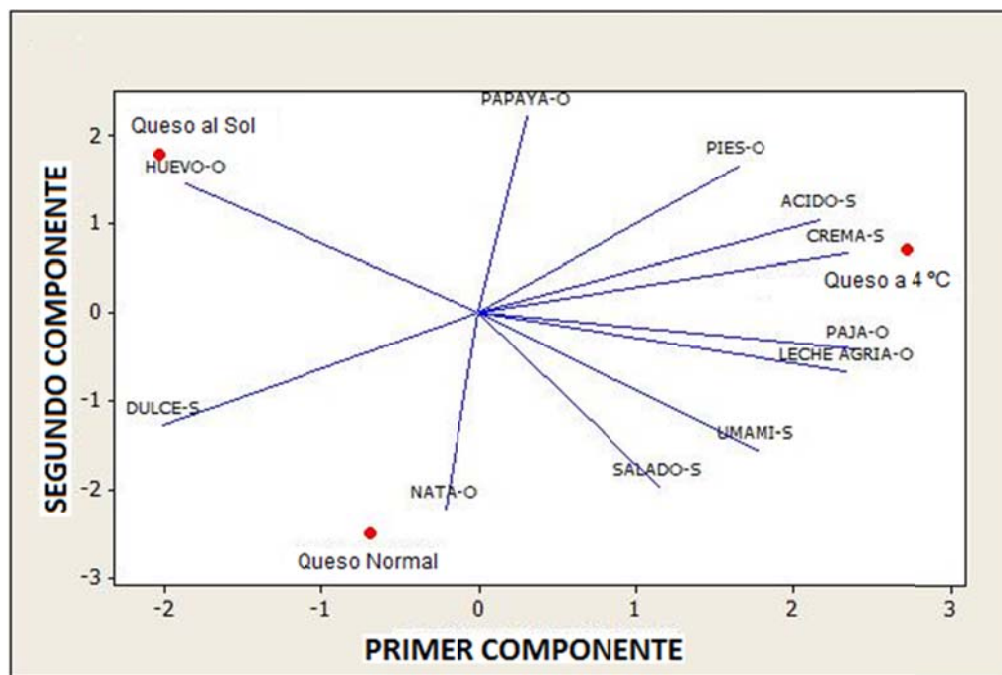


Figura 27. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de queso manchego.

4.3.3. Evaluación de los productos de diferente calidad de jamón cocido

La Tabla 17, presenta los atributos que generó el panel de jueces entrenado durante las 3 primeras sesiones de entrenamiento y sobre los cuales se trabajó durante su desarrollo. Se obtuvieron 4 atributos de olor y 7 atributos de sabor, los cuales fueron definidos de manera unánime por el panel de jueces entrenados y su presencia fue comprobada por medio de una sustancia de referencia.

Tabla 17. Atributos seleccionados por el panel sensorial para jamón.

OLOR	SABOR
Ahumado	Dulce
Carne cruda	Brócoli
Orina	Sal
Choquía	Umami
	Fierro
	Ácido
	Astringente

Jeremiah y col., (1996) estudiaron la relación que existe entre compuestos de aroma y atributos de sabor de jamón. Entre los atributos que compararon se encuentran algunos de los que fueron utilizados en este trabajo; entre ellos están sal, dulce, astringente, fierro y ácido.

En la Tabla 18 se muestra las calificaciones impartidas por los jueces del panel sensorial hacia los 4 productos de diferente calidad de jamón cocido, los cuales fueron evaluados conforme a los atributos sensoriales ya mencionados. La evaluación fue realizada una vez que el panel de jueces estuviera completamente familiarizado con los atributos, calificando cada uno de los productos de diferente calidad en una escala del 0 al 14.

Tabla 18. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de jamón.

	<i>Jamón al sol</i>	<i>Jamón a 4 °C</i>	<i>Jamón exp abiertamente</i>	<i>Jamón normal</i>
OLOR				
<i>Ahumado</i>	0.6	3.8	3.4	6.4
<i>Carne cruda</i>	10.2	4	3.2	3
<i>Orina</i>	11.4	1.8	2	1.1
<i>Choquía</i>	10.8	5.9	5.2	5.9
SABOR				
<i>Dulce</i>	2.9	5.4	5.4	4.6
<i>Brócoli</i>	6.2	5.8	5.8	4.4
<i>Sal</i>	5.4	5.4	5.4	3.7
<i>Umami</i>	7	5.8	5.8	6
<i>Fierro</i>	4.2	3.9	3.9	2.7
<i>Ácido</i>	8.4	3	3	1.9
<i>Astringente</i>	4.2	2.5	2.5	2.2

Se realizó un análisis de componentes principales (Figura 28) con las calificaciones emitidas por el panel de jueces entrenados, el cual muestra la tendencia de cada atributo sensorial hacia el jamón de diferente calidad. Se puede observar que los atributos que describen en una mayor parte al jamón expuesto abiertamente son sal, umami, fierro, astringente y vinagre; en el jamón al sol se encontró que los atributos que describen mejor su sabor y olor son brócoli, orina, carne cruda y choquía, mientras que el jamón a 4 °C y el jamón normal su sabor y olor se describe con los atributos dulce y ahumado. De acuerdo esto se puede decir que al no tener una conservación en refrigeración, el jamón puede llegar a presentar olores y sabores fuertes y en algunas veces desagradables para el consumidor. Delahounty y col., (1997) realizaron la caracterización sensorial de jamones cocidos por un panel entrenado, los atributos sensoriales utilizados para caracterizar jamones cocidos fueron rancidez, ahumado, plástico, salado, dulce, astringente y aditivos. Sárraga y col., (2007) evaluaron la calidad de jamones cocidos los atributos que utilizaron para evaluar el sabor y el olor fueron metálico, salado, dulce, amargo, sangre, añejado y pescado. Comparando estos atributos con los obtenidos en este trabajo encontramos atributos semejantes como sal, fierro (metálico), astringente, acido (amargo), dulce, ahumado, carne cruda (sangre) y pescado (olor a orina), de acuerdo a esto podemos decir que los atributos sensoriales proporcionados por el panel jueces son adecuados para evaluar el sabor y el olor del jamón cocido.

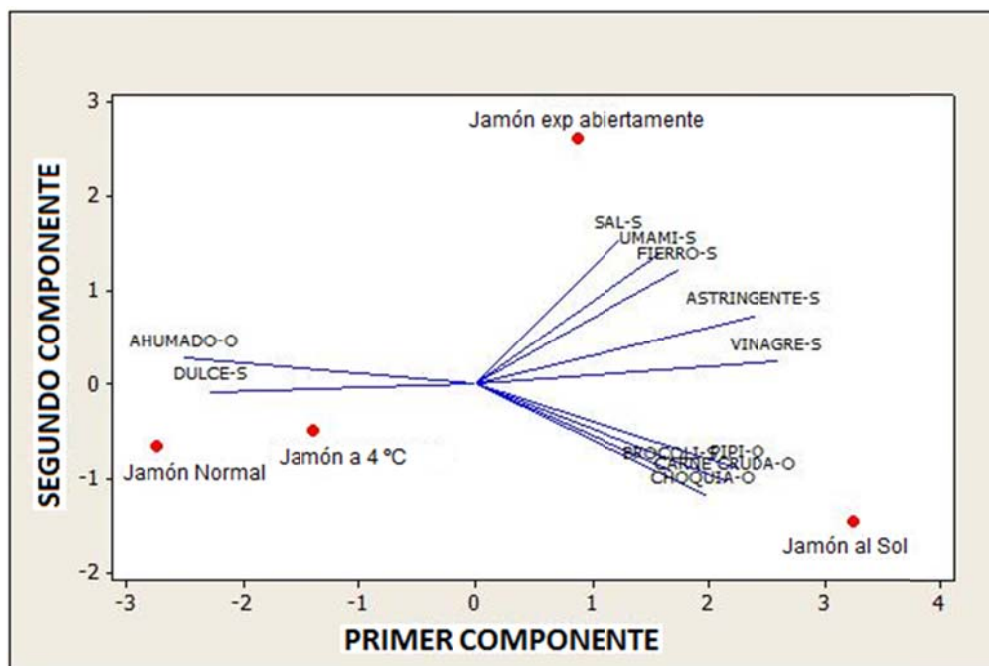


Figura 28. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de jamón cocido.

4.3.4. Evaluación de los productos de diferente calidad de papa frita

La Tabla 19 presenta los atributos que generó el panel de jueces entrenado durante las 3 primeras sesiones de entrenamiento y sobre los cuales se trabajó durante su desarrollo. Se obtuvieron 8 atributos de olor y 4 atributos de sabor, los cuales fueron definidos de manera unánime por el panel de jueces entrenados y su presencia fue comprobada por medio de una sustancia de referencia.

Tabla 19. Atributos seleccionados por el panel sensorial para papa frita.

OLOR	SABOR
Cáscara cruda	Cacahuate
Papa cruda	Buñuelo
Papa cocida	Sal
Cacahuate	Cáscara cocida
Buñuelo	Papa cocida
Tostado	Champiñón
	Aceite

En la Tabla 20, se muestra las calificaciones impartidas por los jueces del panel sensorial hacia los 3 productos de diferente calidad de papa frita, los cuales fueron evaluados conforme a los atributos sensoriales ya mencionados. La evaluación fue realizada una vez que el panel de jueces se familiarizo completamente con los atributos, calificando cada uno de los productos de diferente calidad en una escala del 0 al 14.

Tabla 20. Calificaciones obtenidas en los productos de diferente calidad de papa frita.

	<i>Papas al sol</i>	<i>Papas exp abiertamente</i>	<i>Papas normales</i>
OLOR			
Cáscara cruda	2	4	6.6
Papa cruda	1.6	3.4	5.2
Papa cocida	1.2	3.2	4.8
Cacahuate	0.5	1.6	5
Buñuelo	4.6	3.6	7.4
Tostado	0.7	0.7	4
SABOR			
<i>Cacahuate</i>	2.6	2.8	5.6
<i>Buñuelo</i>	2.8	5	9.4
<i>Sal</i>	2.1	6.4	8.6
<i>Cáscara cocida</i>	7	5.4	9.4
<i>Papa cocida</i>	5	5.5	6.4
<i>Champiñón</i>	5	5.2	3.4
<i>Aceite</i>	11.2	5.8	4.6

Se realizó un análisis de componentes principales (Figura 29) con las calificaciones emitidas por el panel de jueces entrenados, el cual muestra la tendencia de cada atributo sensorial hacia la papa frita de diferentes calidades. Se puede observar que en las papas al sol el atributo que describe su sabor en mayor proporción es el atributo a aceite, el atributo que describe el sabor en las papas expuestas abiertamente es la sal; mientras que en las papas en condiciones normales los atributos que definen el sabor y olor son buñuelo, tostado, cacahuate, cáscara cruda, cáscara cocida, champiñón, papa cruda y papa cocida. De acuerdo a esto podemos observar que las papas al sol y las papas expuestas abiertamente disminuyeron considerablemente su sabor al perder y concentrar atributos como el atributo aceite para el caso de las papas al sol. Ohnishi y Shibamoto, (1984) mencionan que el mecanismo de desarrollo de sabor a aceite es debido a la oxidación de los lípidos, la oxidación térmica implica la abstracción de un radical de hidrógeno, adición de oxígeno molecular para formar el radical peróxido, formación de hidroperóxido y después la descomposición para formar compuestos volátiles de sabor. Van Loon y col., (2005) realizaron un análisis de olfatometría de compuestos volátiles de papa frita en condiciones normales. Los atributos encontrados que describen el sabor de la papa frita en condiciones normales son papa cruda, papa cocida, cacahuate, caramelo, setas, dulce, etc. Estos atributos se asemejan a los obtenidos en este trabajo y los que se encuentran en mayor proporción en una papa frita en buenas condiciones.

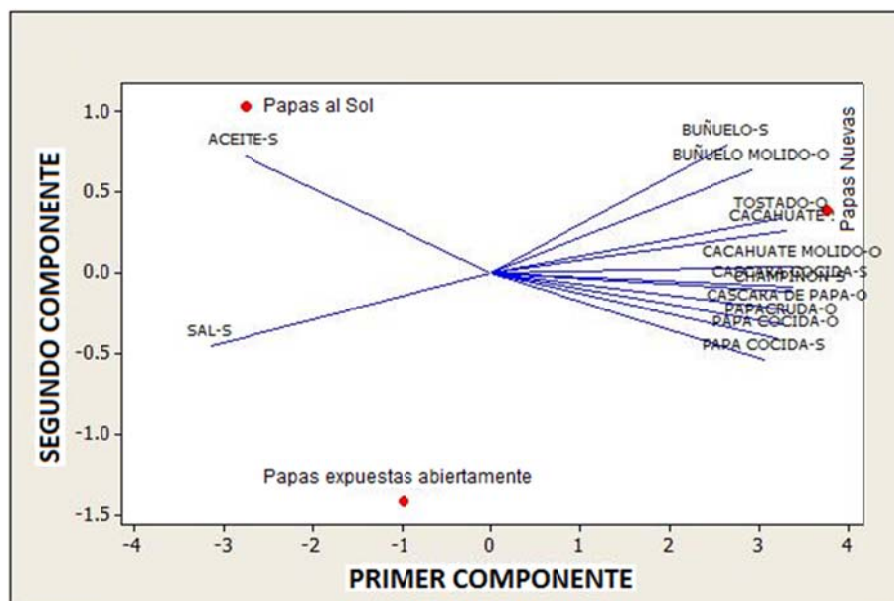


Figura 29. Análisis de componentes principales realizado a los atributos sensoriales de papa frita

4.4. ANÁLISIS MULTIVARIADO DE COMPONENTES PRINCIPALES DE COMPUESTOS VOLÁTILES

Se realizó un análisis de componentes principales haciendo uso de los compuestos obtenidos en el perfil de compuestos volátiles, con la finalidad de observar su tendencia en los alimentos de diferente calidad. De este análisis fueron elegidos los 10 compuestos más representativos para realizar un nuevo análisis de componentes principales. En los dos análisis se pudo observar la misma distribución de las muestras de diferente calidad lo que indica que los 10 compuestos que se eligieron en cada uno de los alimentos fueron los más importantes para evaluar la calidad de estos alimentos.

4.4.1. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de vino blanco

El análisis de componentes principales realizado con los 184 compuestos del perfil de compuestos volátiles se muestra en la Figura 30. De este análisis se eligieron los 10 vectores de mayor longitud o más representativos y se tomaron como los 10 compuestos principales para evaluar la calidad de los 4 productos de diferente calidad de vino blanco. Se realizó la búsqueda de las notas de sabor y aroma de cada compuesto en la bibliografía, para comparar posteriormente con lo obtenido en la evaluación sensorial del vino blanco en diferentes calidades (Tabla 21).

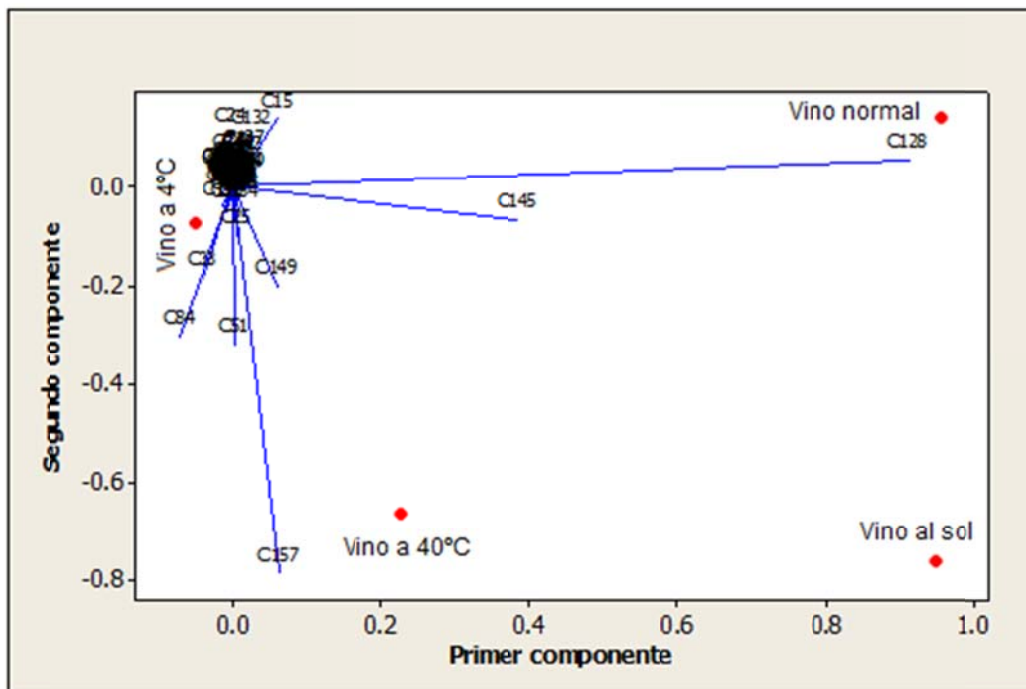


Figura 30. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de vino blanco.

Tabla 21. Compuestos principales seleccionados para vino blanco

	Nombre del compuesto	# CAS	Nota de sabor ^a	Nota de olor ^a
C1	Octanoato de etilo	000106-32-1	NR	Floral y frutal
C2	Ácido acético	000064-19-7	Amargo, ácido picante	Pungente, vinagre de cidra
C3	Decanoato de etilo	000110-38-3	Manzana dulce	Uva
C4	Acetato de etilo	000141-78-6	Uva dulce y matices de cereza	Frutal que recuerda a piña
C5	Ácido decanoico	000334-48-5	NR	Desagradable, olor a rancio
C6	Ácido benzoico	000065-85-0	Agrio	Almendras
C7	Ácido octanoico	000124-07-2	Rancio	Desagradable a quemado
C8	Hexanoato de etilo	000123-66-0	Frutas tropicales	Frutal que recuerda a piña
C9	Linalool	000078-70-6	NR	Floral
C10	Feniletil alcohol	000060-12-8	Inicialmente un sabor amargo y después dulce que recuerda a durazno	Olor a rosas

^a Burdock, (2009)

NR significa no reportado

Se realizó un análisis de componentes principales con los 10 compuestos seleccionados para vino blanco (Figura 31), en el cual se observa la misma distribución de los 4 productos de diferente calidad que se obtuvo en el análisis realizado con el perfil completo, lo que indica que los 10 compuestos elegidos son los más importantes o los que tienen mayor peso en el análisis de vino blanco. De acuerdo a esto se puede decir que el vino a 4 °C presenta en mayor cantidad los compuestos acetato de etilo, ácido octanoico, ácido decanoico, y ácido acético, los cuales tienen notas de sabor y olor como rancio, quemado, agrio, amargo y pungente, al comparar estas notas con los resultados obtenidos en el análisis sensorial (sección 4.3.1), se observa que son muy semejantes a los atributos que describen el sabor y olor de este vino. El vino expuesto al sol y el vino a 40 °C presentaron en mayor cantidad los compuestos ácido benzoico y decanoato de etilo este último contiene notas a manzana dulce y uva, que al compararlas con los resultados del

análisis sensorial se observa que son muy similares a los atributos que describen el sabor y el olor de estos vinos. En lo que se refiere al vino en condiciones normales presente en mayor proporción los compuestos octanoato de etilo, linalool y hexanoato de etilo este último presenta notas a frutas tropicales, que al compararlo con los resultados obtenidos en el análisis sensorial se asemeja al atributo a toronja el cual es uno de los atributos que describe el olor de este vino. De esto podemos concluir que los 10 compuestos elegidos aportan en gran medida al sabor y olor del vino blanco.

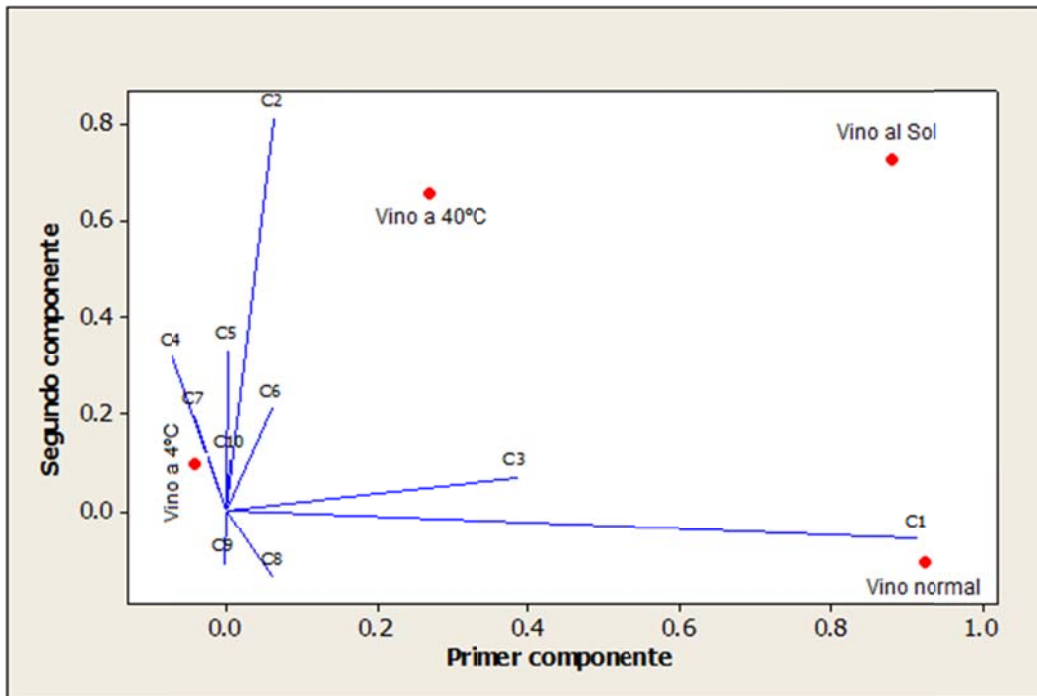


Figura 31. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de vino blanco.

4.4.2. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de queso manchego

El análisis de componentes principales realizado con los 129 compuestos del perfil de volátiles se muestra en la Figura 32. De este análisis se eligieron los 10 vectores de mayor longitud o más representativos, los cuales se tomaron como los 10 compuestos principales para evaluar la calidad de los 3 productos de diferente calidad de queso manchego. Se realizó la búsqueda de las notas de sabor y aroma de cada compuesto en la bibliografía, para comparar posteriormente con lo obtenido en la evaluación sensorial del queso manchego en diferentes calidades (Tabla 22).

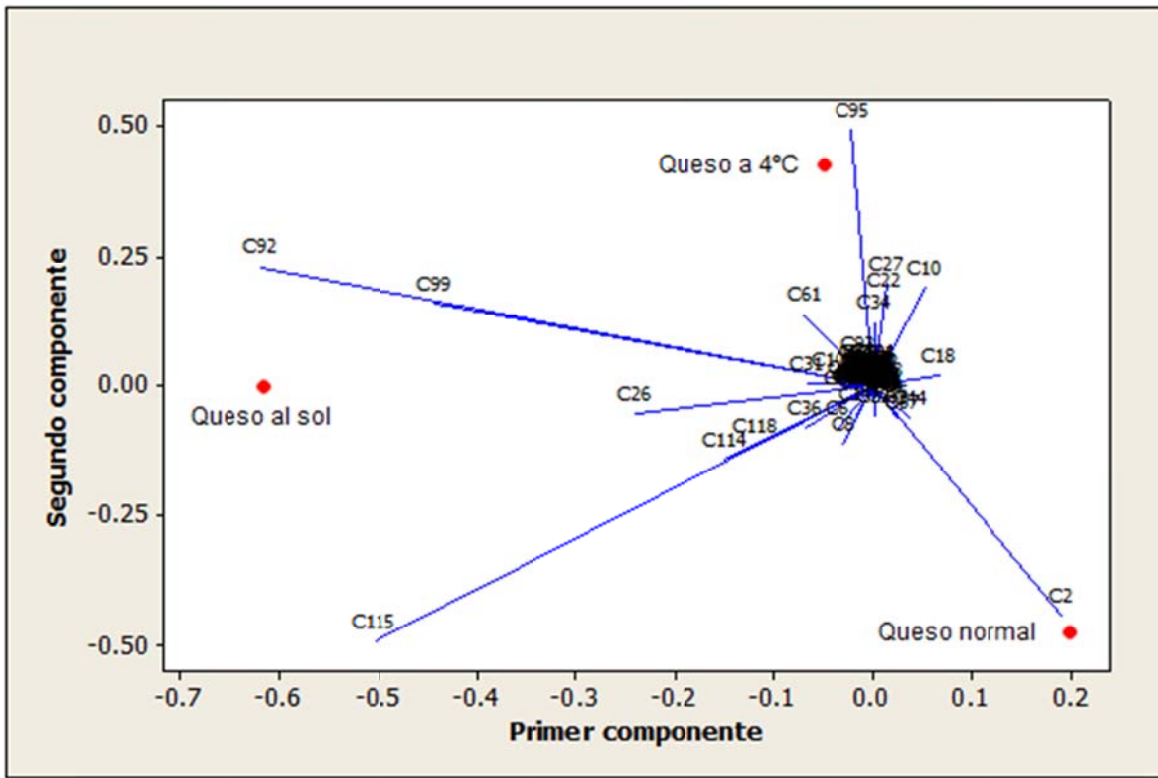


Figura 32. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de queso manchego.

Tabla 22. Compuestos principales seleccionados para queso manchego

	Nombre del compuesto	# CAS	Nota de sabor ^a	Nota de olor ^a
C1	Ácido acético	000064-19-7	Amargo, ácido picante	Pungente, vinagre de cidra
C2	Ácido butírico	000107-92-6	Ácido	Penetrante rancio a mantequilla
C3	Acido hexanoico	000142-62-1	Pungente, rancio, agrio	Olor a queso
C4	2,3-butanediol	000513-85-9	NR	NR
C5	Acetoína	000513-86-0	Mantequilla, crema	Yogurt
C6	Acido octanoico	000124-07-2	Rancio	Desagradable a quemado

C7	Butirato de etilo	000105-54-4	Dulce, piña	Frutal
C8	Hexanoato de etilo	000123-66-0	Frutas tropicales	Frutal que recuerda a piña
C9	Metoxi-fenil-oxima	1000222-86-6	NR	NR
C10	1,4-dicloro-benceno	000106-46-7	NR	NR

^a Burdock, (2009)

NR significa no reportado

Se realizó un análisis de componentes principales con los 10 compuestos seleccionados para queso manchego (Figura 33), en el cual se observa la misma distribución de los 3 productos de diferente calidad que se obtuvo en el análisis realizado con el perfil completo, lo que indica que los 10 compuestos elegidos son los más importantes o los que tienen mayor peso en el análisis de queso manchego. Observando la imagen se puede decir que en el queso a 4 °C presenta en mayor cantidad los compuestos Metoxi-fenil-oxima, 2,3-butanediol, ácido hexanoico y ácido acético, de los cuales los dos últimos presentan notas de sabor y olor como rancio, agrio, amargo pungente y olor a queso, al comparar estas notas con los resultados obtenidos en el análisis sensorial para queso manchego (sección 4.3.2), se observa parecido con algunos atributos que describen el sabor y olor de este queso como ácido y olor a pies (olor a queso). El queso expuesto al sol presento los compuestos ácido octanoico, hexanoato de etilo, butirato de etilo y ácido butírico, los cuales presentan notas a rancio, dulce, frutal y penetrante a mantequilla, al comparar sus notas sensoriales con los resultados del análisis sensorial se observó que ninguna de estas notas describen el atributo a huevo que caracteriza a este queso, sin embargo las notas se asemejan a otros atributos utilizados en el análisis sensorial como dulce, papaya (frutal) y pies (penetrante a mantequilla). En lo que se refiere al queso en condiciones normales presento en mayor proporción el compuesto Acetoína el cual contiene notas a mantequilla, crema y yogurt, que al compararlas con los resultados obtenidos en el análisis sensorial se pueden parecer a los atributos crema, nata y leche agria que describen el sabor de este queso. De acuerdo a esto podemos concluir que la mayoría de los compuestos elegidos aportan en gran medida al sabor y olor del queso manchego.

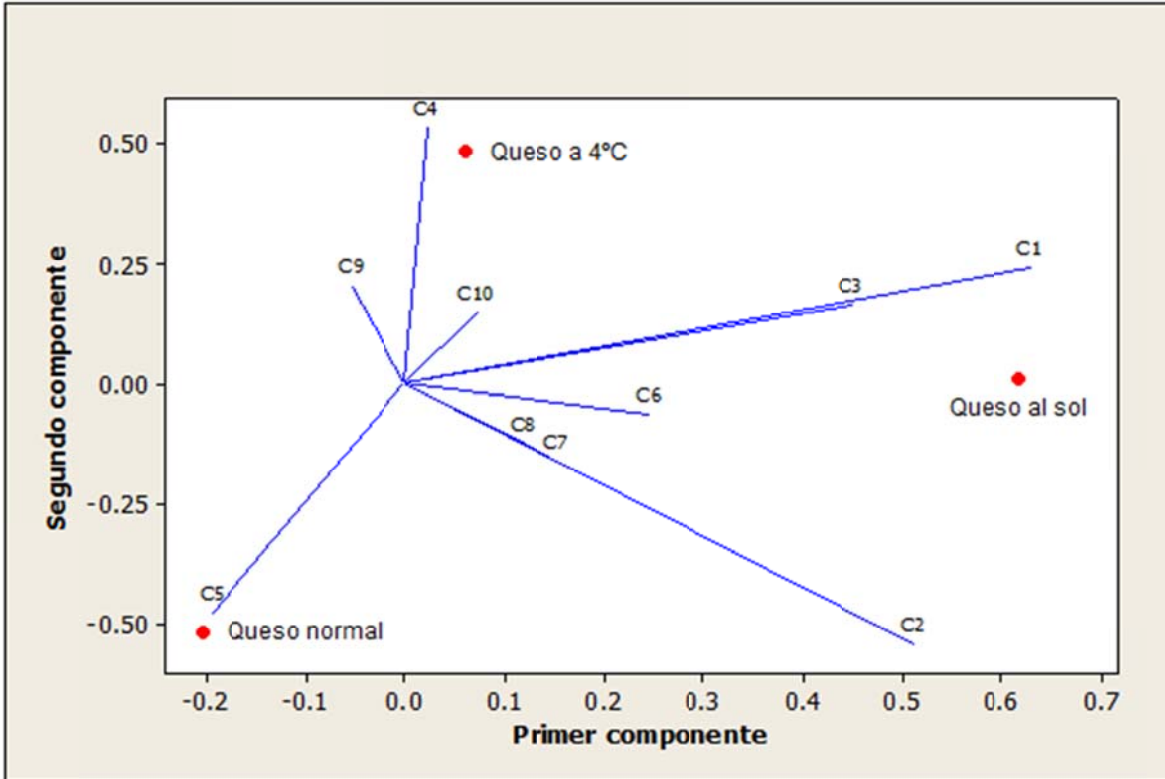


Figura 33. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de queso manchego.

4.4.3. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de jamón cocido

El análisis de componentes principales realizado con los 120 compuestos del perfil de compuestos volátiles se muestra en la Figura 34. De este análisis se eligieron los 10 vectores de mayor longitud o más representativos, los cuales se tomaron como los 10 compuestos principales para evaluar la calidad de los 4 productos de diferente calidad de jamón cocido. Se realizó la búsqueda de las notas de sabor y aroma de cada compuesto en la bibliografía, para comparar posteriormente con lo obtenido en la evaluación sensorial del jamón cocido en diferentes calidades (Tabla 23).

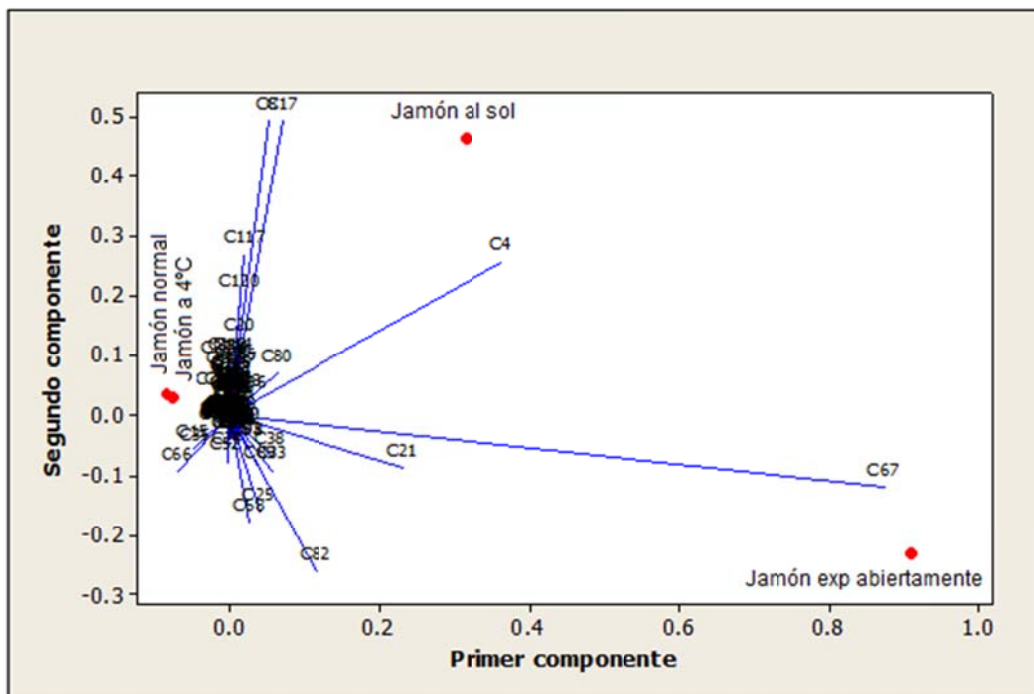


Figura 34. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de jamón cocido.

Tabla 23. Compuestos principales seleccionados para jamón cocido

	Nombre del compuesto	# CAS	Nota de sabor ^a	Nota de olor ^a
C1	Ácido sórbico	000110-44-1	NR	NR
C2	Ácido acético	000064-19-7	Amargo, ácido picante	Pungente, vinagre de cidra
C3	Hexanal	000066-25-1	Verde, Manzana, cítricos	Verde penetrante a frutas
C4	Benzaldehído	000100-52-7	Almendras amargas	Almendras amargas
C5	1,4-dicloro-benceno	000106-46-7	NR	NR
C6	2,4-Hexadieno-1-ol	000111-28-4	Frural, tropical, verde	Vegetal
C7	Ácido nonanoico	000112-05-0	Dulce, cremoso	Olor a grasa
C8	Linalool	000078-70-6	NR	Floral
C9	2-pentil-furano	003777-69-3	NR	NR
C10	D-Limoneno	005989-27-5	Cítricos	Limón

^a Burdock, (2009)

NR significa no reportado

Se realizó un análisis de componentes principales con los 10 compuestos seleccionados para jamón cocido (Figura 35), en el cual se observa la misma distribución de los 4 productos de diferente calidad que se obtuvo en el análisis realizado con el perfil completo, lo que indica que los 10 compuestos elegidos son los más importantes o los que tienen mayor peso en el análisis de jamón cocido. De la imagen se puede decir que el jamón expuesto al sol presenta en mayor cantidad los compuestos ácido nonanoico, hexanal, benzaldehído, ácido acético los cuales presentan notas de sabor y olor como grasa, manzana, frutal, amargo, pungente, al comparar estas notas con los resultados obtenidos en el análisis sensorial para jamón cocido (sección 4.3.3), se observa parecido con algunos atributos que describen el sabor y olor de este jamón como choqía y carne cruda (olor a grasa). El jamón expuesto abiertamente presento los compuestos ácido sórbico, 2,4-hexadieno-1-ol, linalool y limoneno los cuales presentan notas a frutal, vegetal, floral y limón, al comparar sus notas con los resultados del análisis sensorial se observó que ninguna de estas notas describen los atributos de este jamón, sin embargo las notas se asemejan a otros atributos utilizados en el análisis sensorial como dulce (frutal) y brócoli (vegetal). En lo que se refiere al jamón en condiciones normales y al jamón a 4 °C presentaron en menor proporción cada uno de los compuestos, lo que puede explicar lo obtenido en el panel sensorial donde estos jamones presentaban un sabor más tenue que el de los demás jamones (expuesto al sol y expuesto abiertamente). De acuerdo a esto podemos concluir que la mayoría de los compuestos elegidos aportan en gran medida al sabor y olor del jamón cocido.

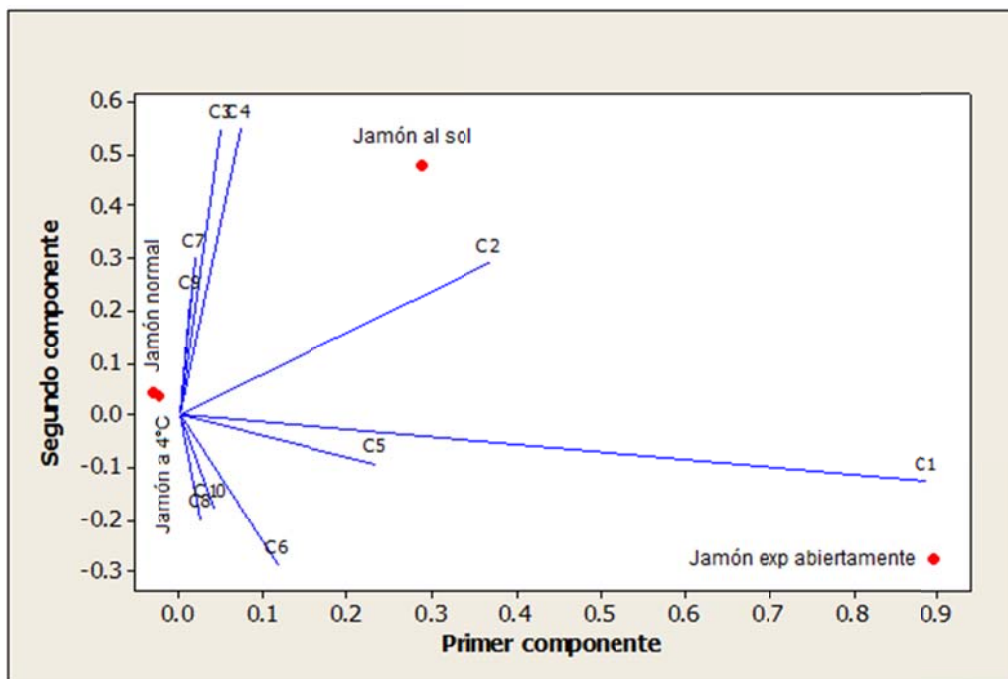


Figura 35. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de jamón cocido.

4.4.4. Análisis de componentes principales de los compuestos volátiles de papa frita

El análisis de componentes principales realizado con los 122 compuestos del perfil de compuestos volátiles se muestra en la Figura 36. De este análisis se eligieron los 10 vectores de mayor longitud o más representativos, los cuales se tomaron como los 10 compuestos principales para evaluar la calidad de los 4 productos de diferente calidad de papa frita. Se realizó la búsqueda de las notas de sabor y aroma de cada compuesto en la bibliografía, para comparar posteriormente con lo obtenido en la evaluación sensorial del jamón cocido en diferentes calidades (Tabla 24).

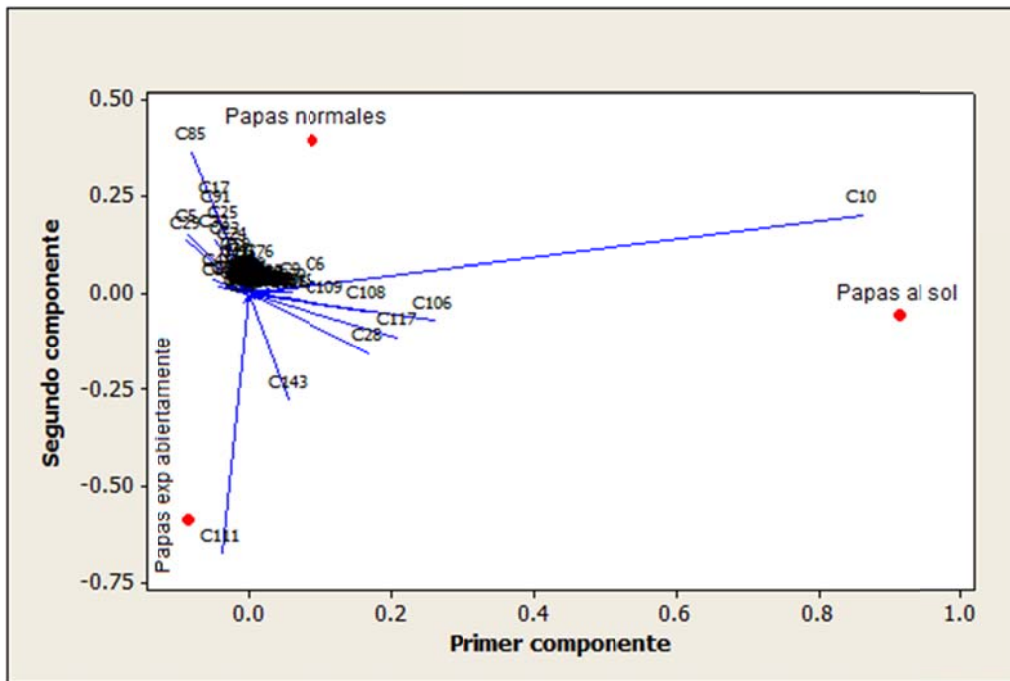


Figura 36. Análisis de componentes principales realizado a los compuestos volátiles de papa frita.

Tabla 24. Compuestos principales seleccionados para papa frita

	Nombre del compuesto	# CAS	Nota de sabor ^a	Nota de olor ^a
C1	Hexanal	000066-25-1	Verde, Manzana, cítricos	Verde penetrante a frutas
C2	1,4-dicloro-benceno	000106-46-7	NR	NR
C3	(E)-2-Heptenal	018829-55-5	NR	NR
C4	2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexametil-, (all-E)-	000111-02-4	NR	NR

C5	Nonanal	000124-19-6	Cítricos	Naranja
C6	Metoxi-fenil-oxima	1000222-86-6	NR	NR
C7	D-Limoneno	005989-27-5	Cítricos	Limón
C8	1-Octen-3-ol	003391-86-4	Champiñón	NR
C9	2,5-dimetilpirazina	000123-32-0	Nueces, avellanas, papa, mohoso	Papa, terroso
C10	Ácido hexanoico	000142-62-1	Pungente, rancio, agrio	Olor a queso

^a Burdock, (2009)

NR significa no reportado

Se realizó un análisis de componentes principales con los 10 compuestos seleccionados para papa frita (Figura 37), en el cual se observa la misma distribución de los 3 productos de diferente calidad que se obtuvo en el análisis realizado con el perfil completo, lo que indica que los 10 compuestos elegidos son los más importantes o los que tienen mayor peso en el análisis de papa frita. De la imagen se puede decir que las papas expuestas al sol presentan en mayor cantidad los compuestos (E)-2-heptenal, 1-Octen-3-ol, nonanal y D-limoneno, de los cuales los dos últimos presentan notas de sabor y olor a cítricos, en lo que se refiere a las papas expuestas abiertamente el compuesto que se encuentra en mayor proporción es 1,4 diclorobenceno el cual no contiene ninguna nota de sabor y olor registrada en alimentos, al no presentar notas de olor y aroma de estos compuestos nos dice que la mayoría de los compuestos detectados no influyen en el sabor de las papas fritas, sin embargo si influyen en la distribución de las muestras de diferente calidad. En lo que se refiere a las papas en condiciones normales presentaron en mayor proporción los compuestos ácido hexanoico y 2,5 dimetil prizanina los cuales presentan notas de sabor y olor como pungente, agrio, nueces, avellanas, papa, mohoso y terroso, al comparar estas notas con los resultados obtenidos en el análisis sensorial para papa frita (sección 4.3.4), se observa el parecido con algunos atributos que describen el sabor y el olor de estas papas como cáscara de papa (terroso), champiñones (mohoso), cacahuete (nueces), papa cruda (papa) y papa codida (papa). De acuerdo a esto se puede concluir que no todos los compuestos elegidos para el análisis influyen de manera significativa en el sabor de las papas en diferente calidad, sin embargo son los que explican la mayor variabilidad del sistema de acuerdo a lo observado en los análisis de componentes principales.

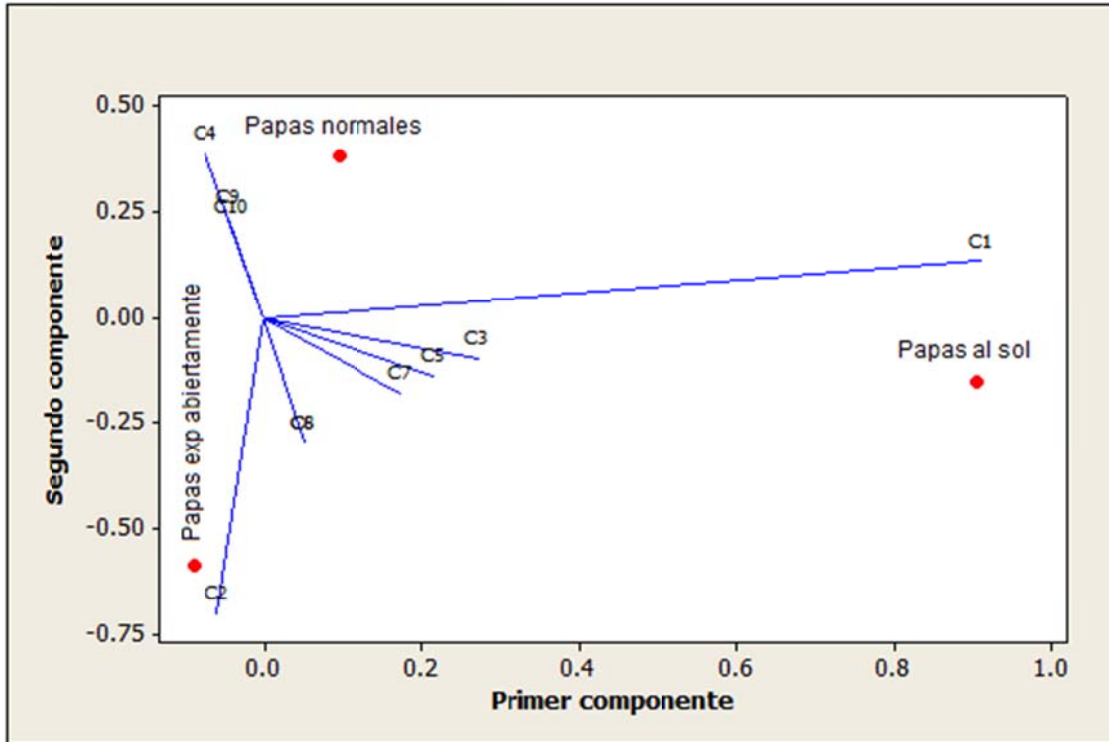


Figura 37. Análisis de componentes principales realizado a los 10 compuestos representativos de papa frita.

4.5. ANÁLISIS POR MONITOREO DE IONES MOLECULARES

Se seleccionaron los 4 iones moleculares de mayor abundancia de los espectros de masas de los 10 compuestos principales para cada alimento en estudio, con la finalidad de realizar un análisis de monitoreo de ion seleccionado (SIM) de estos iones y discriminar aquellos compuestos que no fueron elegidos como principales, es decir los compuestos sobrantes del perfil químico. El objetivo fue optimizar el análisis químico de compuestos volátiles para que los resultados de este análisis se enfocaran a los compuestos seleccionados como principales en el análisis multivariado (sección 4.4). Marsili (1999) utilizó la metodología del ion seleccionado para monitorear un rango de valores de masas en el estudio de malos olores en leche, menciona que la implementación de la metodología SIM ayudo a optimizar el análisis enfocándose solamente en los compuestos que producían los malos olores. Ruiz-Samblás y col. (2010) utilizaron la metodología SIM para el seguimiento de iones característicos en el análisis de triglicéridos en aceite de oliva, mencionan que el uso de SIM fue muy útil para eliminar las interferencias que aparecieron en el espectro de masas, ya estas pueden impedir la interpretación satisfactoria de los espectros.

4.5.1. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de vino blanco

Los iones de mayor abundancia y los tiempos de retención para los 10 compuestos principales de vino blanco se muestran en la Tabla 25. Estos iones fueron elegidos en base a los espectros de masas de cada compuesto, eligiendo los cuatro iones de mayor abundancia que presentara su espectro.

Tabla 25. Iones de los compuestos principales para vino blanco

Nombre del compuesto	# CAS	T.R	Iones
Acetato de etilo	000141-78-6	2.207	43,45,61,70
Ácido acético	000064-19-7	2.828	45, 43, 60, 46
Hexanoato de etilo	000123-66-0	13.049	88,99,43,281
Linalool	000078-70-6	17.695	71,93,41,43
Feniletíl alcohol	000060-12-8	18.658	91,92,122,65
Octanoato de etilo	000106-32-1	23.089	88, 101, 57, 127
Ácido octanoico	000124-07-2	23.196	60,101,73,55
Ácido benzoico	000065-85-0	24.341	105,122,60,77
Ácido decanoico	000334-48-5	28.751	60,73,41,129
Decanoato de etilo	000110-38-3	29.382	88, 101, 73, 41

Se realizó un análisis de ion seleccionado a los productos de diferente calidad de vino blanco en un rango de masas de 41-281 m/z con la finalidad de monitorear los iones de mayor abundancia de los 10 compuestos principales, este análisis se comparó con los resultados del análisis realizado en la obtención del perfil de compuestos volátiles, es decir con el escaneo completo de los iones. En la Figura 38 se muestran dos cromatogramas. El de la Figura 38a. se refiere al perfil de todos los compuestos volátiles presentes en vino blanco a 4 °C y el de la Figura 38b. al de ion seleccionado realizado al mismo alimento. Claramente se observa que ambos cromatogramas siguen la misma tendencia, lo que sugiere que el monitoreo de los iones de los compuestos principales es suficiente para realizar el análisis de los productos de diferente calidad y de esta forma optimizar el análisis químico monitoreando solamente los compuestos principales de vino blanco.

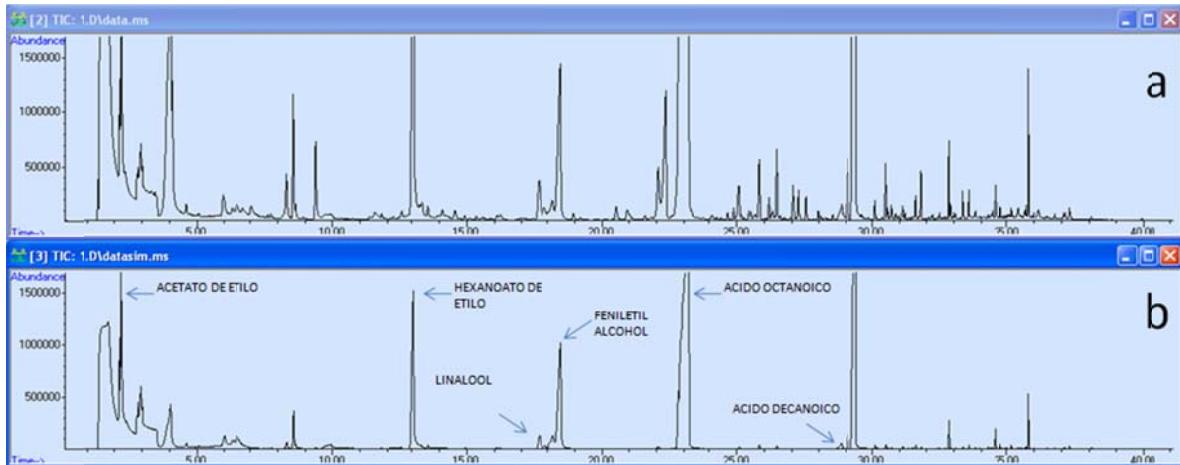


Figura 38. Comparación de cromatogramas de vino blanco a 4 °C

al modo SIM.

4.5.2. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de queso manchego

Los iones de mayor abundancia y los tiempos de retención para los 10 compuestos principales de queso manchego se muestran en la Tabla 26. Estos iones fueron elegidos en base a los espectros de masas de cada compuesto, eligiendo los cuatro iones de mayor abundancia que presentara su espectro.

Tabla 26. Iones de los compuestos principales para queso manchego

Nombre del compuesto	# CAS	T.R	Iones
Ácido acético	000064-19-7	3.266	43,45,60,42
Acetoína	000513-86-0	3.62	45,43,88,42
Butirato de etilo	000105-54-4	5.899	71,43,88,60
2,3-butanediol	000513-85-9	6.253	45,60,43,57
Ácido butírico	000107-92-6	7.569	60,73,42,41
Metoxi-fenil-oxima	1000222-86-6	9.967	133,151,135,134
Hexanoato de etilo	000123-66-0	12.985	88,60,43,99
1,4-dicloro-benceno	000106-46-7	13.328	146,148,111,75
Ácido hexanoico	000142-62-1	13.702-13.970	60,73,41,43
Ácido octanoico	000124-07-2	22.243-22.704	60,73,105,122

Se realizó un análisis de ion seleccionado a los productos de diferente calidad de queso manchego en un rango de masas de 41-151 m/z con la finalidad de monitorear los iones de mayor abundancia de los 10 compuestos principales de queso manchego, este análisis se comparó con los resultados del análisis realizado en la obtención del perfil de compuestos volátiles, es decir con el escaneo completo de los iones. En la Figura 39 se muestran dos cromatogramas. La Figura 39a. se refiere al perfil de todos los compuestos volátiles presentes en queso manchego a 4 °C y el de la Figura 39b. al de ion seleccionado realizado al mismo alimento. Podemos observar que ambos cromatogramas siguen la misma tendencia y una alta depuración de los picos cromatograficos en el cromatograma obtenido de la metodología SIM, lo que sugiere que el monitoreo de los iones de los compuestos principales es suficiente para realizar el análisis de los productos de diferente calidad y de esta forma optimizar el análisis químico, monitoreando solamente los compuestos principales de queso manchego.

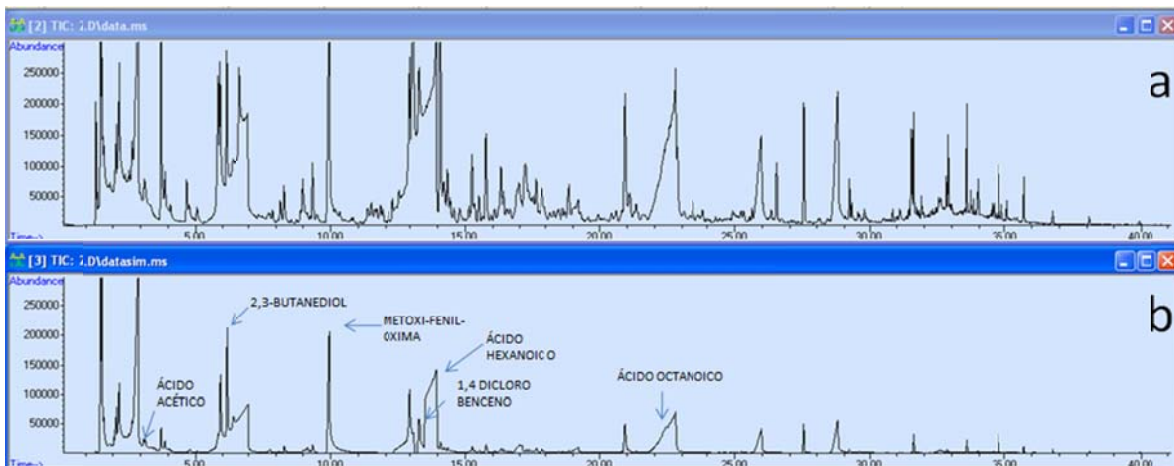


Figura 39. Comparación de cromatogramas de queso manchego a 4 °C
el modo SIM.

4.5.3. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de jamón cocido

Los iones de mayor abundancia y los tiempos de retención para los 10 compuestos principales de jamón cocido se muestran en la Tabla 27. Estos iones fueron elegidos en base a los espectros de masas de cada compuesto, eligiendo los cuatro iones de mayor abundancia que presentara su espectro.

Tabla 27. Iones de los compuestos principales para jamón cocido

Nombre del compuesto	# CAS	T.R	Iones
Ácido acético	000064-19-7	3.855	43,45,60,42
Hexanal	000066-25-1	5.814	56,44,41,57
2,4-Hexadieno-1-ol	000111-28-4	10.01	55,41,133,83
Benzaldehído	000100-52-7	11.326	106,105,77,51
2-pentil-furano	003777-69-3	12.6	81,82,41,138
1,4-dicloro-benceno	000106-46-7	13.338	146,148,111,75
D-Limoneno	005989-27-5	14.12	68,93,67,79
Linalool	000078-70-6	17.641	71,43,41,93
Ácido sórbico	000110-44-1	18.701	97,67,112,39
Ácido nonanoico	000112-05-0	26.075	60,73,57,41

Se realizó un análisis de ion seleccionado a los productos de diferente calidad de jamón cocido en un rango de masas de 41-148 m/z con la finalidad de monitorear los iones de mayor abundancia de los 10 compuestos principales, este análisis se comparó con los resultados del análisis realizado en la obtención del perfil de compuestos volátiles, es decir con el escaneo completo de los iones. En la Figura 40 se muestran dos cromatogramas. El de la Figura 40a. se refiere al perfil de todos los compuestos volátiles presentes en el jamón expuesto abiertamente y el de la Figura 40b. al de ion seleccionado realizado al mismo alimento. Claramente se observa que ambos cromatogramas siguen la misma tendencia así como una depuración en cuanto al cromatograma donde se utilizó la metodología SIM, lo que sugiere que el monitoreo de los iones de los compuestos principales es suficiente para realizar el análisis de los productos de diferente calidad y de esta forma optimizar el análisis químico monitoreando solamente los compuestos principales de jamón cocido.

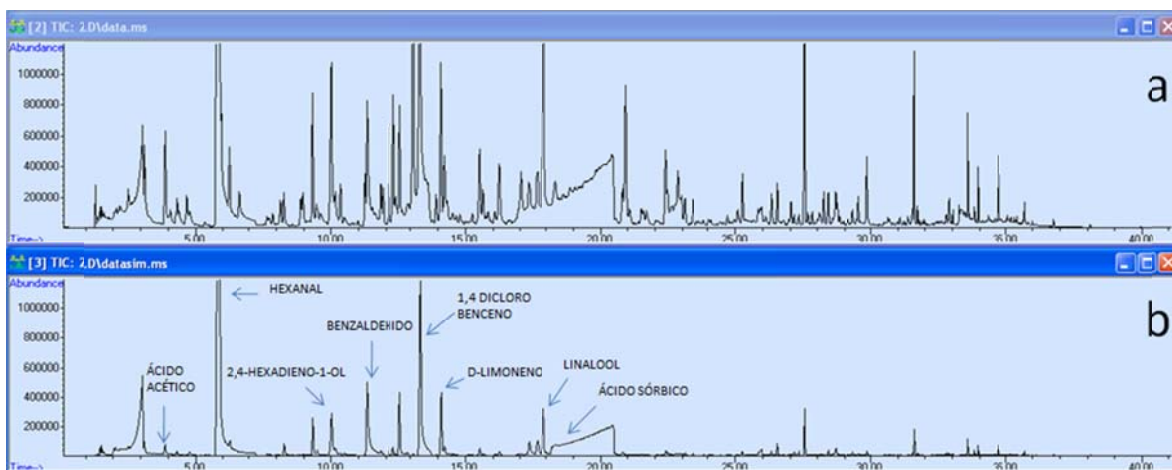


Figura 40. Comparación de cromatogramas de jamón cocido expuesto abiertamente

al modo SIM.

4.5.4. Análisis por monitoreo de iones moleculares de los compuestos principales de papa frita

Los iones de mayor abundancia y los tiempos de retención para los 10 compuestos principales de papa frita se muestran en la Tabla 28. Estos iones fueron elegidos en base a los espectros de masas de cada compuesto, eligiendo los cuatro iones de mayor abundancia que presentara su espectro.

Tabla 28. Iones de los compuestos principales para papa cocida

Nombre del compuesto	# CAS	T.R	IONES
Hexanal	000066-25-1	5.814	44,56,41,57
2,5-dimetilpirazina	000123-32-0	9.56	108,42,39,40
Metoxi-fenil-oxima	1000222-86-6	9.838	133,151,135,134
1-Octen-3-ol	003391-86-4	10.742	43,57,72,134
(E)-2-Heptenal	018829-55-5	11.229	55,83,27,39
Ácido hexanoico	000142-62-1	12.45	60,73,41,43
1,4-dicloro-benceno	000106-46-7	13.338	146,148,111,75
D-Limoneno	005989-27-5	14.13	68,67,93,79
Nonanal	000124-19-6	17.844	57,41,43,56
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene,2,6,10,15,19,23-hexametil-, (all-E)-	000111-02-4	36.725	69,81,41,95

Se realizó un análisis de ion seleccionado a los productos de diferente calidad de papa frita en un rango de masas de 27-151 m/z con la finalidad de monitorear los iones de mayor abundancia de los 10 compuestos principales de papa frita, este análisis se comparó con los resultados del análisis realizado en la obtención del perfil de compuestos volátiles, es decir con el escaneo completo de los iones. En la Figura 41 se muestran dos cromatogramas. La Figura 41a. se refiere al perfil de todos los compuestos volátiles presentes en las papas en condiciones normales y el de la Figura 41b. al de ion seleccionado realizado al mismo alimento. Podemos observar que ambos cromatogramas siguen la misma tendencia y una alta depuración de los picos cromatograficos en el cromatograma obtenido de la metodología SIM, lo que sugiere que el monitoreo de los iones de los compuestos principales es suficiente para realizar el análisis de los productos de diferente calidad y de esta forma optimizar el análisis químico, monitoreando solamente los compuestos principales de papa frita.

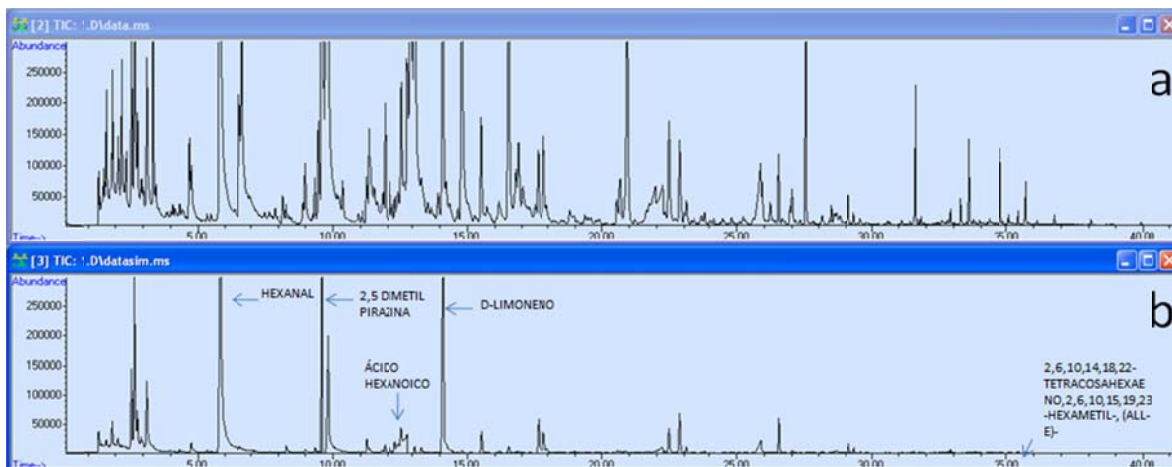


Figura 41. Comparación de cromatogramas de papas fritas en condiciones normales

4.6. REDES NEURONALES

Las redes neuronales realizadas para evaluar la calidad de los 4 alimentos mostraron buenos resultados durante la validación o *test*, ya que con los mismos datos de áreas de los compuestos principales utilizados en el entrenamiento, la red neuronal predijo la misma calidad de los alimentos con una probabilidad de acierto del 100 %. En cuanto a las redes neuronales obtenidas para la predicción de cantidad de atributo sensorial de cada alimento, se encontraron excelentes resultados durante la etapa de validación o *test* al predecir la misma cantidad de atributo obtenida en las calificaciones proporcionadas por el panel de jueces entrenados. Estos resultados son lógicos debido a que se usaron los mismos datos del entrenamiento en la validación, sin embargo queda en duda la robustez de la red para nuevos casos de predicción es decir para nuevos valores de las variables independientes. Bishop (1995), menciona que una red neuronal deberá ser capaz de generalizar y dar respuestas correctas ante patrones de estímulos nuevos, en otras palabras que una vez terminado el aprendizaje una red debe de generalizar, ante entradas similares a las de su juego de ensayo producir salidas correctas. Sin embargo menciona que hay que tener en cuenta que es muy difícil conseguir la capacidad de generalización de una red sin utilizar grandes cantidades de datos y que estos sean muy variados. De acuerdo a esto podemos decir que las redes neuronales construidas para los 4 alimentos quedan muy limitadas y será necesario reentrenarlas con nuevos datos para que estas proporcionen una respuesta correcta a nuevos estímulos.

CONCLUSIONES

El panel de jueces proporcionó atributos sensoriales muy parecidos a los ya reportados en otros trabajos para vino blanco, queso manchego, jamón cocido y papa frita. Se logró entrenar de buena forma al panel de jueces y con esto llevar a cabo una evaluación cuantitativa, identificando los atributos que se presentan en mayor cantidad en cada uno de los productos de diferente calidad de los alimentos.

El análisis químico arrojó 4 perfiles de compuestos volátiles únicos para los alimentos de diferente calidad, esto fue posible gracias al desarrollo de las técnicas SPME para la extracción los compuestos volátiles de los alimentos y al uso de la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas para la separación e identificación de estos compuestos.

El análisis multivariado proporcionó una mejor explicación de las muestras de los alimentos en sus diferentes calidades, ya que permitió un mejor entendimiento del comportamiento de estas en el perfil sensorial y en el perfil compuestos volátiles. El análisis de componentes principales realizado con los datos obtenidos del panel sensorial permitió distinguir los atributos sensoriales que definen a un alimento en una determinada calidad. En lo que se refiere al análisis de componentes principales realizado con los datos obtenidos en los perfiles de compuestos volátiles, permitió la identificación de los compuestos de mayor importancia o los que marcaban una mayor variabilidad en los alimentos. La selección de estos compuestos fue la clave para explicar el comportamiento de las muestras en sus diferentes calidades y para el desarrollo de las redes neuronales.

La metodología de ion seleccionado permitió una depuración del perfil de compuestos volátiles y con esto el seguimiento de los 10 compuestos principales seleccionados para cada alimento. Lo que implica una optimización en el análisis de espectrometría de masas de los compuestos volátiles de cada alimento.

Las redes neuronales realizadas mostraron resultados aceptables respecto a los datos con los que fueron entrenadas. La red construida para determinar la calidad de los alimentos demostró que puede predecir la calidad en la que se encuentra el alimento con un alto grado de confiabilidad. La red construida para determinar la cantidad de atributo sensorial pudo predecir valores semejantes de atributos sensoriales a los obtenidos por el panel de jueces entrenados. De acuerdo a esto, se puede decir que las 2 redes neuronales proporcionan resultados confiables, conforme a los datos con los que fueron entrenadas; sin embargo se recomienda seguir entrenando a las redes con nuevos datos para proporcionarle nuevos casos de entrenamiento, así como probar diferentes arquitecturas cambiando el número de capas y las funciones de activación de las neuronas, con la finalidad de obtener una red neuronal más robusta capaz de generalizar una respuesta correcta.

En lo que se refiere a la metodología desarrollada de nariz electrónica, se pudo demostrar que se puede lograr una correlación entre el análisis sensorial y el análisis químico de un alimento y con esto desarrollar una metodología para evaluar su calidad, esto se pudo comprobar para los 4 alimentos en estudio (vino blanco, queso manchego, jamón cocido y papa frita), sin embargo se sugiere que en un trabajo a futuro se ponga a prueba la eficacia de la metodología, evaluando su respuesta de predicción de calidad ante nuevos valores de los compuestos principales de cada alimento.

BIBLIOGRAFÍA

- Ampuero, S., Bosset, J. O. (2003). *The electronic nose applied to dairy products: A review*. Sensors and Actuators B, 94, 1–12.
- Araghipour N., J. Colineau, A. Koot, W. Akkermans, J.M. Moreno Rojas, J. (2008). *Geographical origin classification of olive oils by PTR-MS*. Food Chem, 108, 374–383.
- Ballester, J. (2004). *Mise en evidence d'un espace sensorial et caractérisation des marqueurs relatifs à l'arome des vins issus du cépage Chardonnay*. PhD Thesis, Université de Bourgogne, Dijon, Francia & Universidad Politecnica de Valencia, España.
- Battenfeld, J., Sorensen, J. (2001). *Heat treatment of cheese milk: effect on proteolysis during cheese ripening*. International Dairy Journal, 11, 567–574.
- Bellesia F., Pinettia A., Pagnonia U. M., Rinaldib R., Zucchia C., Cagliotic L., Palyi G. (2003). *Volatile components of Grana Parmigiano-Reggiano type hard cheese*. Food Chemistry, 83, 55–61.
- Bende, M. y Nordin, S. (1997). *Perceptual learning of olfaction: professional wine tasters versus controls*. Physiology and Behaviour, 62, 1065–1070.
- Bishop C. M. (1995). *Neural Networks for Pattern Recognition*. Oxford University Press, USA.
- Blanda G., Cerretani L., Comandini P. (2010). *Investigation of off-odour and off-flavour development in boiled potatoes*. Food Chemistry, 118, 283–290.
- Bolzoni L., Barbieri G., Virgili R. (1996). *Changes in volatile compounds of parma ham during maturation*. Food Chem, 43, 301–310.
- Burdock G. A. (2009). *Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients*. 6ª Ed, CRC Press, Orlando, Florida, USA.
- Cadot Y., Caillé S., Samson A., Barbeau G., Cheynier V. (2010). *Sensory dimension of wine typicality related to a terroir by Quantitative Descriptive Analysis, Just About Right analysis and typicality assessment*. Analytica Chimica Acta, 660, 53–62.
- Carrillo J. D., Garrido-López Á., Teresa Tena M. (2006). *Determination of volatile oak compounds in wine by headspace solid-phase microextraction and gas chromatography–mass spectrometry*. Journal of Chromatography A, 1102, 25–36.
- Castillo-Sanchez, J., Mejuto, J. C., Garrido, J., Garcia-Falcon, S. (2006). *Influence of wine-making protocol and finig agents on the evolution of the anthocyanin content, colour and general organoleptic quality of Vinhao wines*. Food Chemistry, 97, 130–136.
- Cayot N. (2007). *Sensory quality of traditional foods*. Food Chemistry, 101, 154–162.
- Che Man Y.B., Liu J.L., Rahman R.A., Jamilah B. (1999). *Shelf-life of fried potato chips using palm olein, soybean oil and their blends*, J. Food Lipids, 6, 287–298.

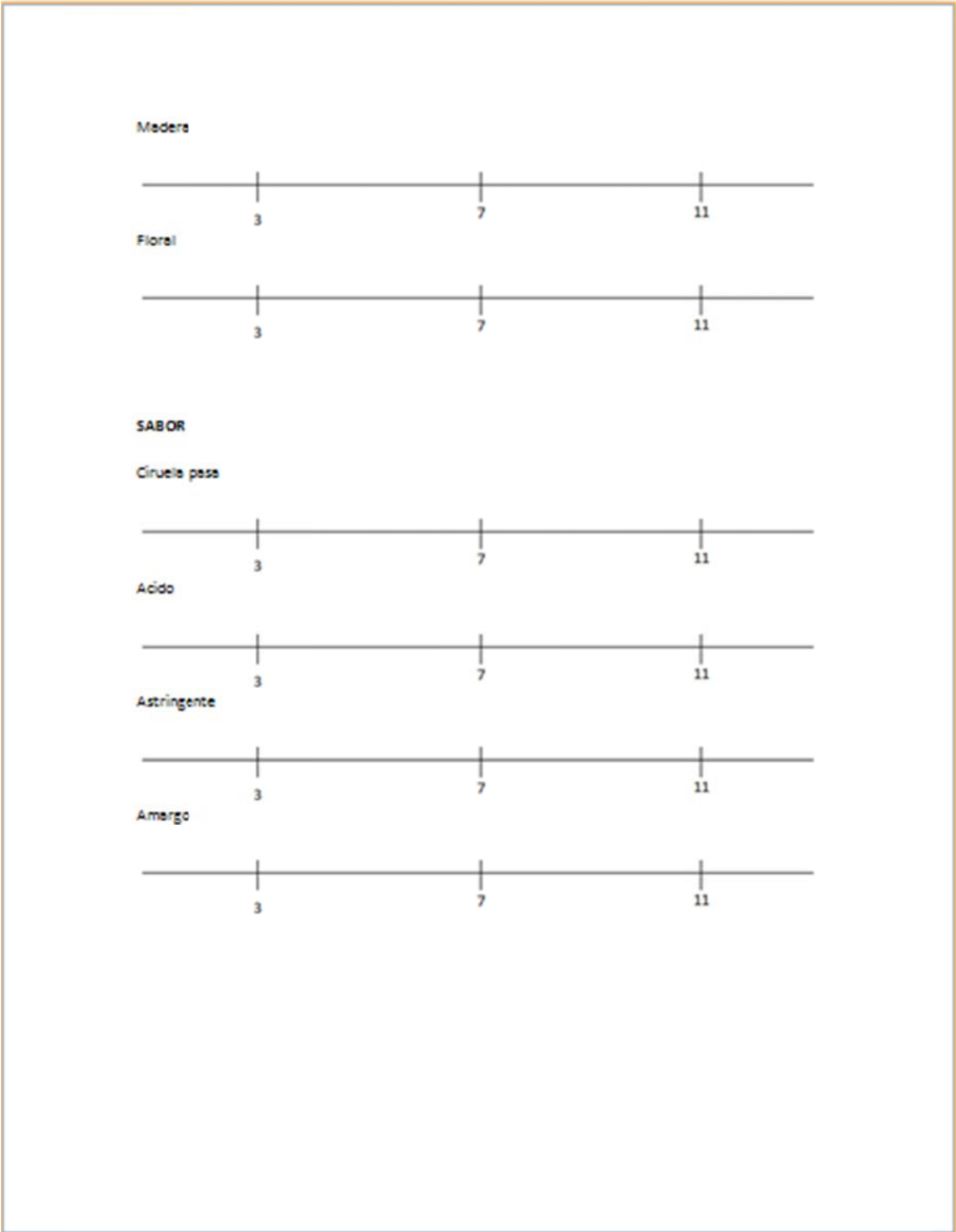
- Cheng Q., Sun D. (2005). **Application of PLSR in correlating physical and chemical properties of pork ham with different cooling methods**. Meat Science, 70(4), 691–69.
- Delahunty C. M., McCord A., Morrissey P. A. (1997). **Sensory characterization of cooked hams by untrained consumers using free-choice profiling**. Food Quality and Preference, 8, 381–388.
- Distel, H. y Hudson, R. (2001). **Judgement of odor intensity is influenced by subject's knowledge of the odor source**. Chem. Senses, 26, 247–251.
- Escriche I., Fuentes C., Gonzalez C. (2000). **Development of Medium Volatility Compounds in Manchego-type Cheese as Affected by Salt Content and Salting Method**. Journal Of Food Composition And Analysis, 13, 827–836.
- Ferreira M. M. C., Morgano, M. A., Queiroz, S. C. N., Mantovani, D. M. B. (2000). **Relationships of the minerals and fatty acid contents in processed turkey meat products**. Food Chemistry, 69(3), 259–265.
- Frank D. C., Owen C., Patterson J., (2004). **Solid phase microextraction (SPME) combined with gas-chromatography and olfactometry-massspectrometry for characterization of cheese aroma compounds**. Lebensm.-Wiss. u.-Technol., 37, 139–154.
- García M., Alexandre M., Gutiérrez J., Horrillo M.C. (2006). **Electronic nose for ham discrimination**. Sensors and Actuators B, 114, 418–422.
- García, C. Berdagué J.J., Antequera T., López-Bote C., Córdoba J.C., Ventanas, J. (1991). **Volatile components of dry cured Iberian ham**. Food Chem, 41 23–32.
- García-González Diego L., Tena Noelia, Aparicio-Ruiz Ramón, Morales Maria T. (2008). **Relationship between sensory attributes and volatile compounds qualifying dry-cured hams**. Meat Science, 80, 315–325.
- Gaspardo Brigitta, Procida Giuseppe, Toso Barbara, Stefanon Bruno. (2008). **Determination of volatile compounds in San Daniele ham using headspace GC–MS**. Meat Science, 80, 204–209.
- Ghasemi-Varnamkhasti M., Saeid Mohtasebi S.S., (2010). **Maryam. Biomimetic-based odor and taste sensing systems to food quality and safety characterization: An overview on basic principles and recent achievements**. Journal of Food Engineering, 100, 377–387.
- Gómez-Míguez M. José, Cacho Juan F., Ferreira Vicente, Vicario Isabel M., Heredia Francisco J. (2007). **Volatile components of Zalema white wines**. Food Chemistry, 100, 1464–1473.
- González Álvarez M., González-Barreiro C., Cancho-Grande B., Simal-Gándara J. (2011). **Relationships between Godello white wine sensory properties and its aromatic fingerprinting obtained by GC–MS**. Food Chemistry, 129, 890–898.
- Green B. G. y Frankmann. S. P. (1987). **The effect of cooling the tongue on the perceived intensity of taste**. Chem. Senses 12, 609–619.

- Holland, J. F., Gardner, B. D. (2002). *The advantages of GC-TOFMS for flavor and fragrance analysis, in Flavor, Fragrance, and Odor Analysis*. Marcel Dekker, New York.
- Hoskins J. C. y Himmelblau D. M. (1992). *Process control via artificial neural networks and reinforcement learning*. Computers & chemical engineering, 16, 241–251.
- Jackson Ronald. (2008). *Wine Science: Principles and applications*. 3rd ed. Elsevier Inc. California, USA.
- Jennings, W. M., Mittlefehldt, E., Strempe, P. (1997). *Analytical Gas Chromatography*. 2nd ed., Academ. Press, San Diego.
- Jeremiah L.E., Ball R.O., Uttaro B., Gibson L.L. (1996). *The relationship of chemical components to flavor attributes of bacon and ham*. Food Research International, 29, 457-464.
- Jou, K. D., Harper, W. J. (1998). *Pattern recognition of Swiss cheese aroma compounds by SPME/GC and an electronic nose*. Milchwissenschaft, 53(5), 259–263.
- Kataoka, H., Lord, H.L., Pawliszyn, J., (2000). *Applications of solid-phase microextraction in food analysis*. Journal of Chromatography, 880, 35–62.
- Kubickova, J., Grosch, W. (1997). *Evaluation of potent odorants of Camembert cheese by dilution and concentration techniques*. International Dairy Journal, 7, 65–70.
- Lavanchy, P., B´erodier, F., Zannoni, M., Noel, Y., Adamo, C., Squella, J., (1993). *L’evaluation sensorielle de la texture des fromages a` pate dure ou semi-dure*. Etude Interlaboratoires. LWT, 26, 59–68.
- Lawless, H. T., Heymann, H. (1998). *Sensory Evaluation of Food*. Principles and Practices. Chapman & Hall, New York, USA.
- Leroy F., Vasilopoulos C., Van Hemelryck S., Falony G., De Vuyst L. (2009). *Volatile analysis of spoiled, artisan-type, modified-atmosphere-packaged cooked ham stored under different temperatures*. Food Microbiology, 26, 94–102.
- Lojzova L., Riddellova K., Hajslova J., Zrostlikova J., Schurek J., Cajka T. (2009). *Alternative GC–MS approaches in the analysis of substituted pyrazines and other volatile aromatic compounds formed during Maillard reaction in potato chips*. Analytica Chimica Acta, 641, 101–109.
- Luna G., Aparicio R., García-Gonzalez, D.L. (2005). *A tentative characterization of white dry-cured hams from Teruel (Spain) by SPME-GC*. Food Chem, 97, 621–630.
- Majcher M., Jeleń H.H. (2009). *Comparison of suitability of SPME, SAFE and SDE methods for isolation of flavor compounds from extruded potato snacks*. Journal of Food Composition and Analysis, 22, 6, 606-612.
- Marsili R. (2002). *Flavor, Fragrance and Odor Analysis*, Marcel Dekker, Inc., New York.
- Marsili R. 1993. *Controlling the Quality of Fats and Oils*. <http://www.foodproductdesign.com>.

- Marsili R. (1999). **SPME-MS-MVA as an Electronic Nose for the Study of Off-Flavors in Milk**. J. Agric. Food Chem., 47 (2), 648-654.
- Meilgaard, M. G., Civille, G. V., Carr B. T. (1999). **Sensory Evaluation Techniques**. 3th edition, CRC Press, Boca Raton, New York.
- Mingo, S. A., y Stevenson, R. J. (2007). **Phenomenological differences between familiar and unfamiliar odors**. Perception, 36, 931-947.
- Moskowitz, H. R. (1975). **Application of sensory assessment to food evaluation**. Methods of ratio scaling. Lebensm.-Wiss & Technol, 8(6), 249.
- Muller A., Steinhart H. (2007). **Recent developments in instrumental analysis for food quality**. Food Chemistry, 102, 436-444.
- Muriel E., Antequera T., Petro M.J., Andre A.I., Ruiz J. (2004). **Volatile compounds in Iberian dry-cured loin**. Meat Science, 68, 391-400.
- Mussinan, C., Morello, M.J. (1998). **Flavor Analysis**. Amer. Chem. Soc. Washington, D.C. USA. p. 389.
- Nickerson, G.B., Likens, S.T. (1966). **Gas chromatographic evidence for the occurrence of hop oil components in beer**. Journal of Chromatography 2, 677-678.
- Ortega-Heras M., González-SanJosé M.L., Beltrán S. (2002). **Aroma composition of wine studied by different extraction methods**. Analytica Chimica Acta, 458, 85-93.
- Ohnishi S. y Shibamoto T. (1984). **Volatile compounds from heated beef fat and beef fat with glycerine**. Journal Agriculture Food Chemistry, 32, 987.
- Pawliszyn, J. (1997). **Solid Phase Microextraction, theory and practice**. Ed. Wiley-VCH, New York.
- Pawliszyn, J. (2002). **Solid phase microextraction**. In: Issaq (Ed.), Acentury of separation science. New York: Marcel Dekker Inc. 399-419
- Peri C. (2006). **The universe of food quality**. Food Quality and Preference, 17, 3-8.
- Peris M., Escuder-Gilabert L., (2009). **A 21st century technique for food control: Electronic noses**. Analytica Chimica Acta, 638, 1-15.
- Reeves, C. A., & Bednar, D. A. (1994). **Defining quality: Alternatives and implications**. Acad. Manage, 19, 419-445.
- Reineccius G. (2006). **Flavor Analysis in Flavor Chemistry and Technology**. 2nd ed. Chapter 3. CRC Press. Taylor & Francis Group. Boca Raton, FL, USA.
- Reineccius, G. A. (2006). **Flavor Technology. In: Flavor Chemistry and Technology**. Taylor and Francis Group. Boca Raton, FL, USA.
- Rétiveau, A., Chambers, D. H., Esteve, E. (2005). **Developing a lexicon for the flavour description of French cheeses**. Food Quality and Preference, 16, 517-527.

- Ritchey, J. G., and Waterhouse, A. L. (1999). **A standard red wine: Monomeric phenolic analysis of commercial Cabernet Sauvignon wines**. Am. J. Enol. Vitic. 50, 91–100.
- Rivas-Cañedo A., Fernández-García E., Nuñez M. (2009). **Volatile compounds in dry-cured Serrano ham subjected to high pressure processing. Effect of the packaging material**. Meat Science, 82, 162–169.
- Rocha Sílvia M., Coutinho Paula, Barros António, Delgadillo Ivonne, Coimbra Manuel A. (2006). **Rapid tool for distinction of wines based on the global volatile signature**. Journal of Chromatography A, 1114, 188–197.
- Ruiz J., García C., Muriela E., Andrés A.I., Ventanas J. (2002). **Influence of sensory characteristics on the acceptability of dry-cured ham**. Meat Science, 61, 347–35.
- Ruiz J., Ventanas J., Cava J., Timón L., García C. (1998). **Sensory characteristics in Iberian Ham**. Food Res, 31, 53–58.
- Ruiz-Samblása C., González-Casadoa A., Cuadros-Rodríguez L. Sánchez-Peña, C. M., **Application of selected ion monitoring to the analysis of triacylglycerols in olive oil by high temperature-gas chromatography/mass spectrometry**. Talanta, 82, 1, 255–260.
- Luna, G., Garcia-Gonzalez, D. L., Aparicio, R. (2005). **Characterization of French and Spanish dry-cured hams: influence of the volatiles from the muscles and the subcutaneous fat quantified by SPME-GC**. Meat Science, 69 (4), 635–645.
- Sárraga C., Guàrdia M.D., Díaz I., Guerrero L., García Regueiro J.A., Arnau J. (2006). **Nutritional and sensory quality of porcine raw meat, cooked ham and dry-cured shoulder as affected by dietary enrichment with docosahexaenoic acid (DHA) and α -tocopheryl acetate**. Meat Science, 76, 377–38.
- Schaller E., Bosset J.O., Escher F. (1998). **Electronic noses and their application to food: a review**. Lebensm Technol, 31, 305.
- Schieberle, P., (1995). **Quantification of important roast-smelling odorants in popcorn by stable isotope dilution assay and model studies on flavor formation during popping**. Journal of Agricultural and Food Chemistry 43, 2442–2448.
- Shahidi F. (1994). **Flavor of Meat and Meat Products**, Chapman and Hall Cornwall, UK, pp. 1–3.
- Shen N., Duvick S., White P., Pollack L. (1999). **Oxidative stability and AromaScan analyses of corn oils with altered fatty acid content**. J.Am. Oil Chem. Soc., 76 (12), 1425–1429.
- Skoog D. A., Holler, F. L., Nieman T. A. (2001). **Principles of Instrumental Analysis**. McGraw Hill. 5ta. Ed. España.
- Stuiver, M. (1958), Ph.D. Thesis, Rijks University, Groningen. Países Bajos.
- Sundaram Gunasekaran (2008), **Quality Evaluation of Cheese**. Computer Vision Technology for Food Quality Evaluation, 447-479.

- TNO. (1995), ***Volatile Compounds in Foods***, AJ Zeist, Países Bajos Nutrition and Food Research.
- Van Leuven I., Van Caelenberg T., Dirinck P. (2008). ***Aroma characterisation of Gouda-type cheeses***. International Dairy Journal, 18, 790–800.
- Van Loon A.M., Linssen P.H., Legger A., Posthumus Maarten A., Voragen Alphons G.J. (2005). ***Identification and olfactometry of French fries flavour extracted at mouth conditions***. Food Chemistry, 90, 417–425.
- Vilanova M., Genisheva Z., Masa A., Oliveira J. M.. (2010). ***Correlation between volatile composition and sensory properties in Spanish Albariño wines***. Microchemical Journal, 95, 240-246.
- Vinaixa M., Vergara A., Duran C., Llobet E., Badia C., Brezmes J., Vilanova X., Correig X. (2005). ***Fast detection of rancidity in potato crisps using e-noses based on mass spectrometry or gas sensors***. Sensors and Actuators B, 106, 67–75.
- Virgili R., Parolari G. (1996). ***Production industrielle et qualite´ sensorielle***. Lavoisier Technique et Documentation, Paris, p. 99.
- Wasserman P. D. (1989). ***Neural computing: theory and practice***. Van Nostrand Reinhold Co. New York, NY, USA.
- Wolf I.V., Perotti M.C., Berna S.M. (2010). ***Study of the chemical composition, proteolysis, lipolysis and volatile compounds profile of commercial Reggianito Argentino cheese: Characterization of Reggianito Argentino cheese***. Food Research International, 43, 1204–1211.
- Wu, J., Xie, W., y Pawliszyn, J. (2000). ***Automated in tube solid-phase microextraction coupled with HPLC–ES–MS for the determination of catechins and caffeine in tea***. Analyst, 125, 2216–2222.



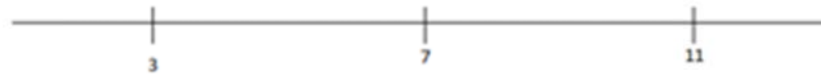
ENTRENAMIENTO DEL PANEL SENSORIAL DE QUESO MANCHEGO

Nombre: _____ Fecha: _____

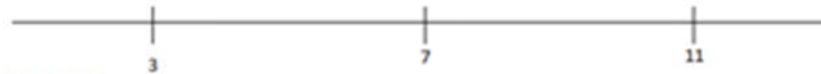
Instrucciones: Pruebe cada una de las muestras codificadas con tres dígitos, califique cada atributo acomodándolos en la escala observada, según la percepción que tenga del atributo. Tomando la escala 3 como la de menor cantidad, la de 7 como mediana y la de 11 como la más intensa.

OLOR

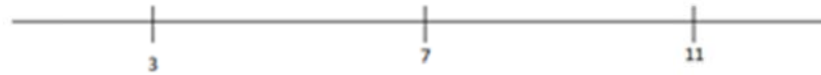
Papaya



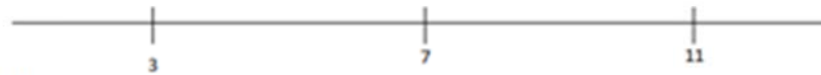
Nota



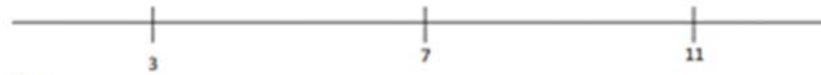
Leche agria



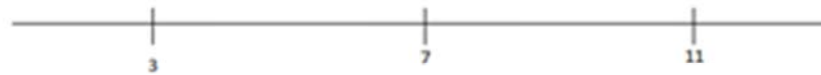
Huevo

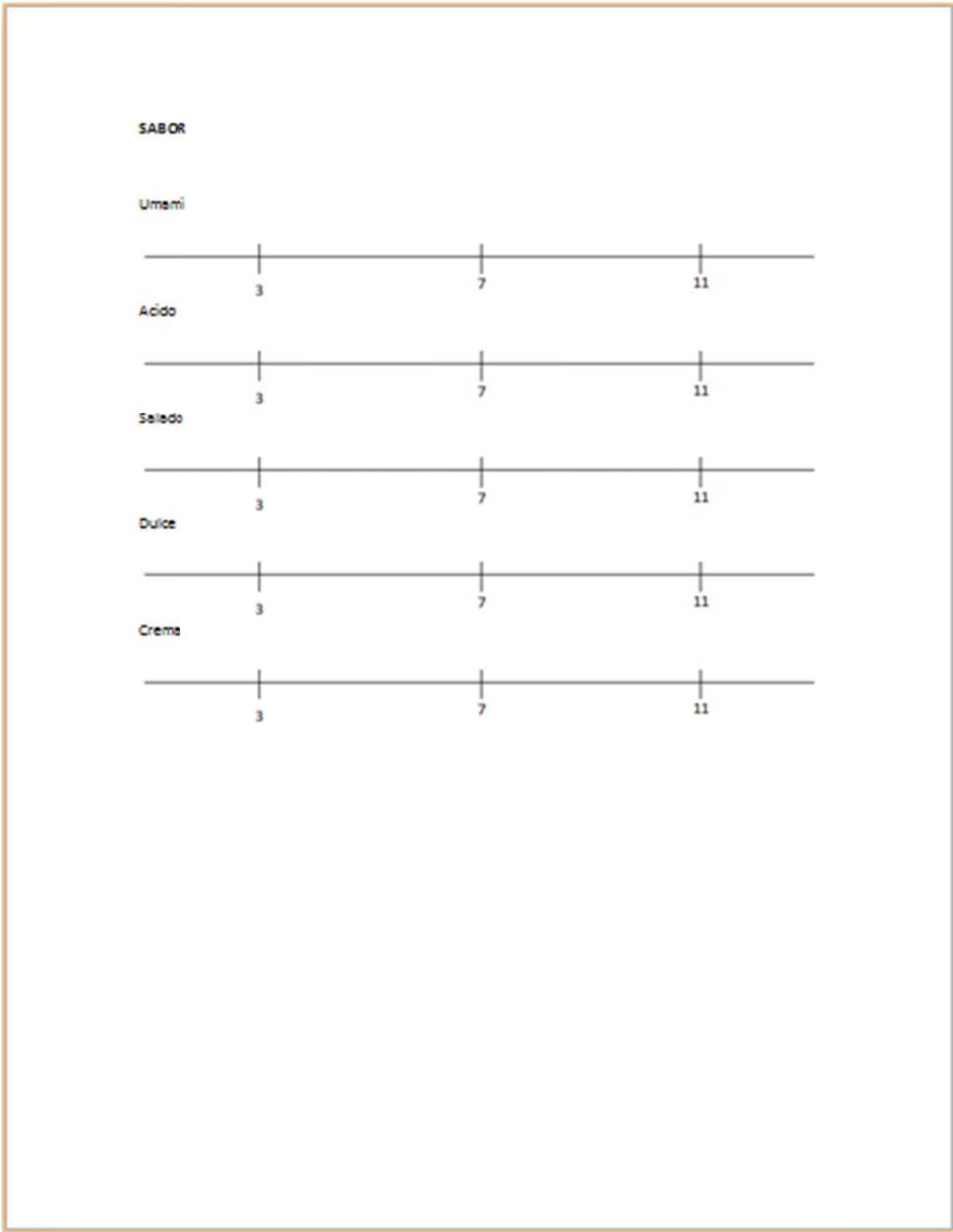


Paja



Pies





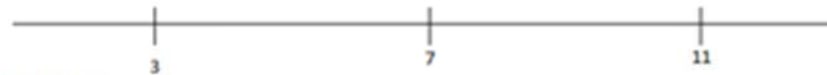
ENTRENAMIENTO DEL PANEL SENSORIAL DE JAMÓN COCIDO

Nombre: _____ Fecha: _____

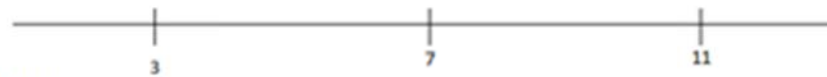
Instrucciones: Pruebe cada una de las muestras codificadas con tres dígitos, califique cada atributo acomodándolos en la escala observada, según la percepción que tenga del atributo. Tomando la escala 3 como la de menor cantidad, la de 7 como mediana y la de 11 como la más intensa.

OLOR

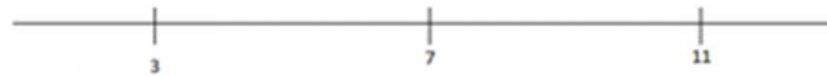
Ahumado



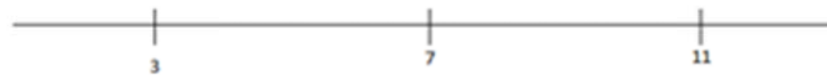
Cerme cruda



Orina

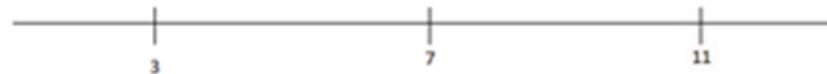


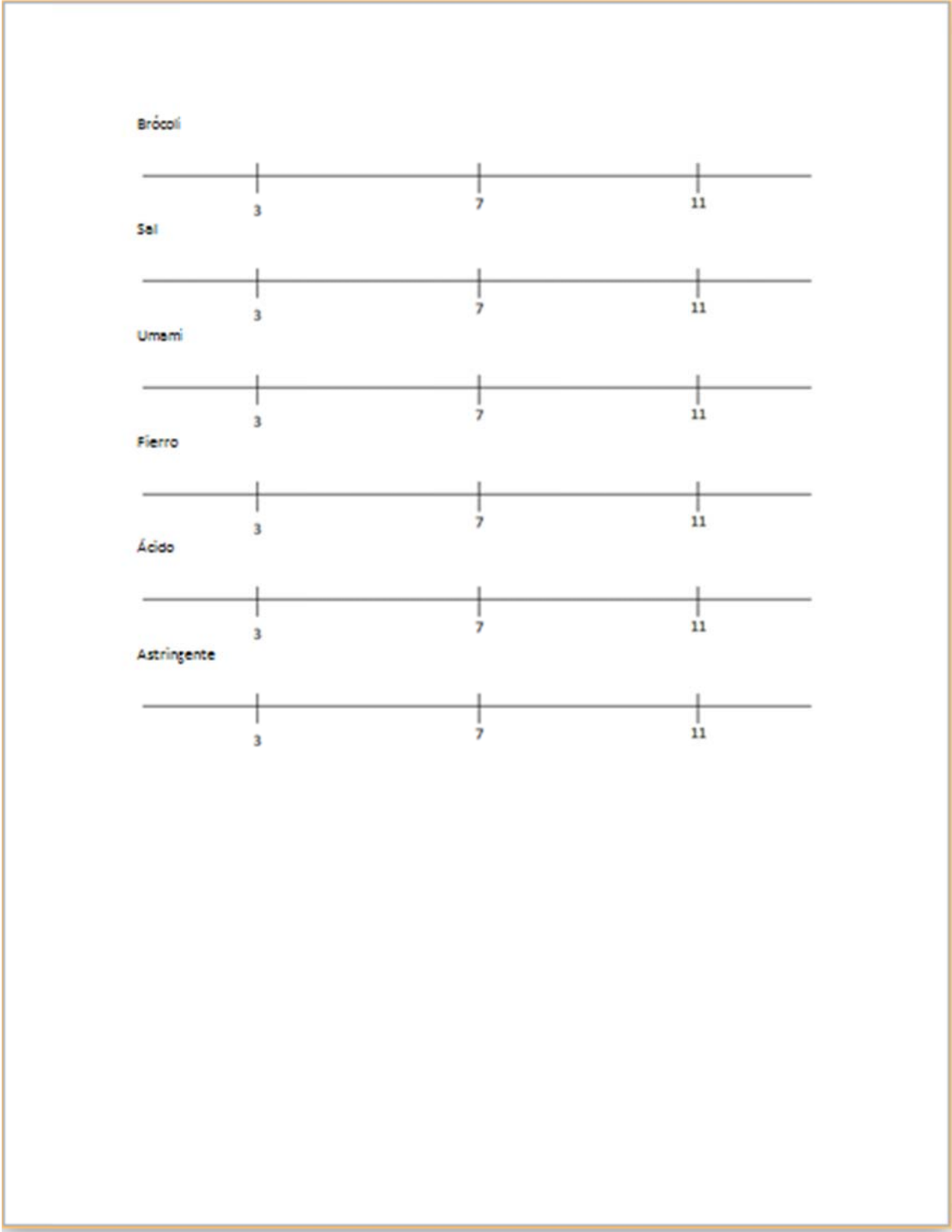
Choqué



SABOR

Dulce





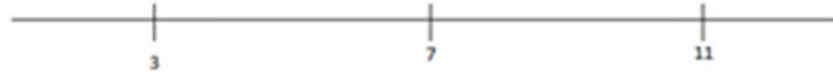
ENTRENAMIENTO DEL PANEL SENSORIAL DE PAPA FRITA

Nombre: _____ Fecha: _____

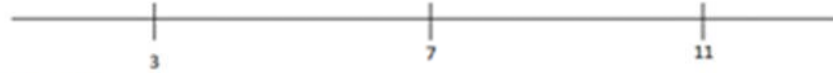
Instrucciones: Pruebe cada una de las muestras codificadas con tres dígitos, califique cada atributo acomodándolas en la escala observada, según la percepción que tenga del atributo. Tomando la escala 3 como la de menor cantidad, la de 7 como mediana y la de 11 como la más intensa.

OLOR

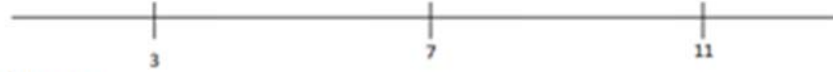
Cescara cruda



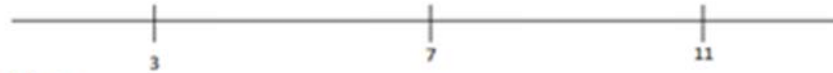
Papa cruda



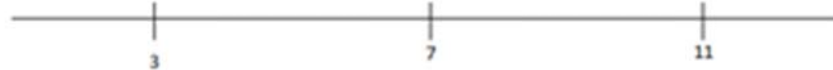
Papa cocida



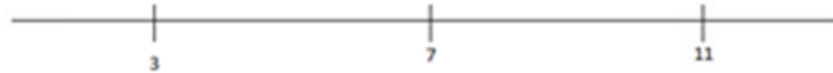
Cacahuete

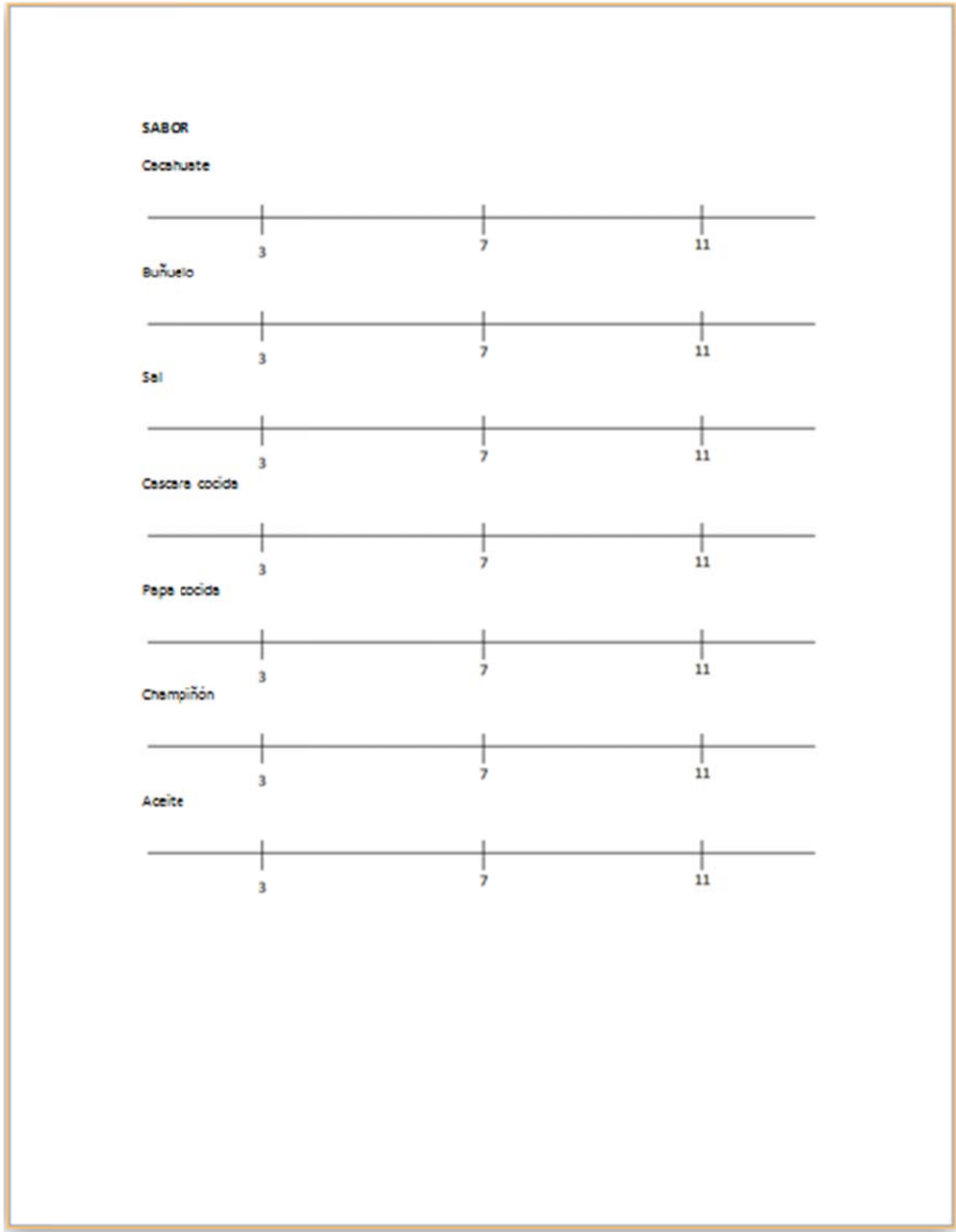


Buñuelo



Tostado





Anexo 2. Perfiles de copuestos volatiles

Perfil de compuestos volátiles de vino blanco

Nombre	# de cas	Vino nuevo	Vino a 4° c	Vino al sol	Vino a 40° c
Sulfur dioxide	007446-09-5	137317139	126798456	135041741	22981473
1-Butanol, 3-methyl-	000123-51-3	107196952	111730036	110350866	112043471
2,3-Butanediol	000513-85-9	465555713	214800921	266256207	281537142
Furfural	000098-01-1	249795115	245762588	303943120	455631372
Butanoic acid, 2-methyl-, ethyl ester	007452-79-1	51141620	42984802	65857630	0
3-Hexen-1-ol, (Z)-	000928-96-1	0	31511283	0	0
2-Furanmethanol	000098-00-0	157126751	167165740	138925528	106339989
1-Hexanol	000111-27-3	602106067	673238305	590863753	563290728
1-Butanol, 3-methyl-, acetate	000123-92-2	533280517	543180669	533658651	325747550
1-Butanol, 2-methyl-, acetate	000624-41-9	0	106303956	108408445	0
Butanoic acid, 3-hydroxy-, ethyl ester	005405-41-4	0	26596473	43549483	20346492
Benzaldehyde	000100-52-7	66306796	76079803	83404210	76337585
2-Furancarboxaldehyde, 5-methyl-	000620-02-0	169381883	184098877	172802818	151585239
1-Propanol, 3-(methylthio)-	000505-10-2	65788330	57154894	97831622	43815282
Hexanoic acid, ethyl ester	000123-66-0	2273954522	2262686123	2456109940	1122560830
Hexanoic acid	000142-62-1	273026255	249448823	368128511	175509885
D-Limonene	005989-27-5	82799810	71148257	79724063	61441744
Benzyl Alcohol	000100-51-6	329288406	390890454	321539314	287267759
Ethyl 2-hexenoate	027829-72-7	52431782	43414421	62806448	28806760
1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-	013877-91-3	61650514	41677837	0	0
2-Furancarboxylic acid, ethyl este	000614-99-3	62949899	50322539	61857139	64133240
Isoamyl lactate	019329-89-6	0	110568292	0	0
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-trien-7-o	035447-99-5	0	59030148	0	0
1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-	000078-70-6	749696265	889164971	606506344	344871130
Phenylethyl Alcohol	000060-12-8	5407541951	5174829421	5471193343	5827816959
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (.+/-)-	021368-68-3	0	38880137	0	0
2H-Pyran, 3,6-dihydro-4-methyl-2-(2-methyl-1-propenyl)-	001786-08-9	157428672	173054023	216148465	205711064
Acetic acid, phenylmethyl ester	000140-11-4	49447841	54528622	0	0
Benzoic acid, ethyl ester	000093-89-0	46914037	32634181	85376879	0
Phenol, 4-ethyl-	000123-07-9	469702870	472594602	502907468	525086221
Butanedioic acid, diethyl ester	000123-25-1	3940488785	4048261562	4092492092	4155192842
3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.4-trimethyl-	000098-55-5	759071636	872568005	790631027	882883870
Octanoic Acid	000124-07-2	1895870234	2341227313	2402517523	2773108623
6-Octen-1-ol, 3,7-dimethyl-, (R)-	001117-61-9	137515062	170758992	0	0
Bicyclo[4.1.0]hept-2-ene, 3,7,7-trimethyl-	000554-61-0	0	29477020	0	55277744
Benzeneacetic acid, ethyl ester	000101-97-3	127866688	132671518	153429440	116466184

Isopentyl hexanoate	002198-61-0	35112659	65896784	0	0
Acetic acid, 2-phenylethyl ester	000103-45-7	506038659	504097252	511910945	380018431
Phenol, 4-ethyl-2-methoxy-	002785-89-9	613177706	594459831	632811557	648171612
Ethyl hydrogen glutarate	1000342-34-3	71138421	57022041	72709752	83590613
2(3H)-Furanone, 5-butyldihydro-4-methyl-, cis-	055013-32-6	113286876	119767996	114513304	112489142
Nonanoic acid, ethyl ester	000123-29-5	108774173	117864814	220221854	0
Tridecane	000629-50-5	54883417	69210820	83629014	67031392
2-Methoxy-4-vinylphenol	007786-61-0	81864953	63536321	0	47349104
cis-3-Methyl-4-octanolide	039638-67-0	365274760	400042996	433110834	369514358
Benzoic acid, 2-amino-, methyl ester	000134-20-3	0	43489498	0	0
Benzenepropanoic acid, ethyl ester	002021-28-5	101700567	41748218	78320550	0
Naphthalene, 1,2-dihydro-1,1,6-trimethyl-	030364-38-6	62860637	63926146	83137111	49893046
Eugenol	000097-53-0	79449803	84476328	0	54226751
Phenol, 2-methoxy-4-propyl-	002785-87-7	115805689	99326251	115150335	85197287
n-Decanoic acid	000334-48-5	596501348	953408539	1701897447	1464807303
Ethyl 9-decenoate	067233-91-4	0	232465108	0	0
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	0	39138185	0	0
Octanoic acid, 3-methylbutyl ester	002035-99-6	68702901	114223240	0	0
Octanoic acid, 2-methylbutyl ester	1000330-94-4	31400360	52124945	85095626	0
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (E)-	003796-70-1	142160811	177280630	98355931	113861477
3-Bromobenzoic acid, pentadecyl ester	1000281-95-1	0	167028451	0	0
Undecanoic acid, ethyl ester	000627-90-7	51761818	48004987	107665250	0
Pentadecane	000629-62-9	0	35232593	0	0
Butylated Hydroxytoluene	000128-37-0	231593570	217170758	225423059	133997376
Lilial	000080-54-6	12342960	23746415	34385973	13775556
Hexanoic acid, 3-hydroxy-, ethyl ester	002305-25-1	0	85079554	95702141	51335272
1,6,10-Dodecatrien-3-ol, 3,7,11-trimethyl-	007212-44-4	83147297	105539134	0	0
Dodecanoic acid, ethyl ester	000106-33-2	260219671	207009961	353504155	22680107
Dodecanoic acid, 1-methylethyl ester	010233-13-3	74455603	105795524	85341740	70877792
Heptanal, 2-(phenylmethylene)-	000122-40-7	27952461	36527030	28450224	14824996
Ethyl 13-methyl-tetradecanoate	1000336-61-5	56808035	60621734	75808793	20345883
n-Hexyl salicylate	006259-76-3	53599149	76586543	57122235	29459306
Octanal, 2-(phenylmethylene)-	000101-86-0	54301835	32189545	0	51320397
Tetradecanoic acid, ethyl ester	000124-06-1	347587550	255032672	414599879	64932209
Dodecane, 2,6,11-trimethyl-	031295-56-4	0	37685568	0	0
2-Ethylhexyl salicylate	000118-60-5	40009828	34236003	39807568	21309282
Isopropyl Myristate	000110-27-0	101746081	105808829	0	102047329
Hexadecanoic acid, ethyl ester	000628-97-7	312354904	216272289	170599587	57696953
Phthalic acid, butyl isohexyl este	1000309-03-6	0	106321470	0	0

Pentadecanoic acid, ethyl ester	041114-00-5	126574248	108281291	151136880	57966479
Homosalate	000118-56-9	48954096	45678661	36992347	23803960
Hexadecanoic acid, methyl ester	000112-39-0	52912226	40090352	57255137	25122072
i-Propyl 14-methyl-pentadecanoate	1000336-62-4	33614380	69977194	0	0
Ethyl Oleate	000111-62-6	79096233	57531579	57558240	23467969
(E)-9-Octadecenoic acid ethyl este	006114-18-7	15263138	32539885	62373709	0
Methyl 17-methyl-octadecanoate	1000336-21-8	189748687	32329555	0	0
Eicosane	000112-95-8	53523661	22756250	0	14738394
Ethyl Acetate	000141-78-6	995731014	2718307325	2691992478	1953245397
1-Propanol, 2-methyl-	000078-83-1	1341270429	1524861968	1388118650	1163597118
Butane, 1-(ethenylthio)-	004789-70-2	17511821	16465024	31559714	0
Benzene, 1,3-dichloro-	000541-73-1	0	244367509	0	0
2H-Pyran, tetrahydro-4-methyl-2-(2-methyl-1-propenyl)-	016409-43-1	21129498	18955398	0	0
2,6-Dimethyl-1,3,5,7-octatetraene,E,E-	000460-01-5	95073535	57747085	73844931	54582913
5,7-Octadien-2-ol, 2,6-dimethyl-	005986-38-9	14707215	21637874	0	28920823
Bicyclo[3.1.0]hexane, 6-isopropylidene-1-methyl-	024524-57-0	0	23547687	0	17860540
Cyclopropane, 1-ethyl-2-heptyl-	074663-86-8	0	40944377	0	0
Phenol, 2-methoxy-3-(2-propenyl)-	001941-12-4	0	62274405	87692390	0
2(3H)-Furanone, 5-butyldihydro-	000104-50-7	0	16778278	0	0
1-Pentadecene	013360-61-7	0	11487972	0	0
Nonanoic acid, 5-methyl-, ethyl ester	116530-40-6	82368872	27572889	89974204	0
Heptadecanoic acid, ethyl ester	014010-23-2	95301233	131127163	65553470	0
Ethyl 9-hexadecenoate	054546-22-4	144118099	80323377	0	51916733
2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl	000502-69-2	54211395	52050215	0	0
Cyclopenta[g]-2-benzopyran, 1,3,4,6,7,8-hexahydro-4,6,6,7,8,8-hexamethyl-	001222-05-5	57654075	61473079	0	53257680
Dodecanoic acid, 10-methyl-, methyl ester	005129-65-7	0	38575277	0	21771533
Cyclohexadecane	000295-65-8	0	27565554	0	0
Octadecanoic acid, ethyl ester	000111-61-5	46784185	37384809	50936282	8691419
Butanoic acid, ethyl ester	000105-54-4	210927984	265957024	244002361	187496358
Butanoic acid, 3-hydroxy-, ethyl ester, (.+/-)-	035608-64-1	34990002	30830227	0	0
Benzene, 1,2-dichloro-	000095-50-1	0	199119854	0	0
1,3,6-Octatriene, 3,7-dimethyl-, (Z)-	003338-55-4	0	45581271	77825174	33542641
trans-Rose oxide	000876-18-6	0	36659941	45761108	0
Octanoic acid, methyl ester	000111-11-5	0	59448800	0	0
Cyclohexene, 1-methyl-3-(1-methylethenyl)-, (.+/-)-	000499-03-6	35410757	69111140	124765988	46493417
Bromoacetic acid, decyl ester	005436-93-1	0	49169551	0	0
Pentanedioic acid, diethyl ester	000818-38-2	38727079	64215909	124603914	39858327
2-Propenoic acid, 3-phenyl-, ethylester, (E)-	004192-77-2	33428572	24931355	0	0

1,19-Eicosadiene	014811-95-1	0	42997634	0	0
2-(1-Cyclohexenyl)cyclohexanone	001502-22-3	33953350	38192596	0	0
Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethylidene)-	000586-62-9	18740132	30132095	63309648	0
Ethyl tridecanoate	028267-29-0	71480085	85094158	148424392	0
7-Acetyl-6-ethyl-1,1,4,4-tetramethyltetralin	000088-29-9	86369137	87332956	83550508	57108639
Pentadecanoic acid, 14-methyl-, methyl ester	005129-60-2	0	58627456	0	22704975
Dibutyl phthalate	000084-74-2	86009482	109269267	80087389	37465967
1-Hexadecanol, 2-methyl-	002490-48-4	0	48332736	0	0
Isopropyl Palmitate	000142-91-6	70546104	79962955	52914840	24554421
Phenol, o-(2,4-dinitroanilino)-	006358-23-2	14296843	39558483	0	13835154
Propane, 1-(ethenylthio)-	016330-21-5	14892426	0	0	0
.beta.-Myrcene	000123-35-3	103070997	0	0	0
2-Hexenoic acid, ethyl ester	001552-67-6	63882259	0	0	0
Methyl salicylate	000119-36-8	82009487	0	88283404	0
Octanoic acid, ethyl ester	000106-32-1	8506415246	0	8278704380	2231725548
Butanedioic acid, hydroxy-, diethyl ester, (+/-)-	000626-11-9	67967544	0	86901912	57651247
1-Dodecanol	000112-53-8	33604950	0	0	0
Nonanoic acid	000112-05-0	27875694	0	0	32615328
2(3H)-Furanone, 5-butyldihydro-4-methyl-	039212-23-2	412186969	0	0	0
2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	000719-22-2	30125422	0	0	0
Pyridine-3-carboxamide, oxime, N-(2-trifluoromethylphenyl)-	288246-53-7	26682108	0	0	8145931
Cyclopentanetridecanoic acid, methyl ester	024828-61-3	22958710	0	0	0
Eseroline, 7-bromo-, methylcarbamate(ester)	114546-23-5	23831570	0	0	0
.alpha.-Methyl-.alpha.-[4-methyl-3-pentenyl]oxiranemethanol	1000132-13-0	244547203	0	0	0
Cyclopropanemethanol, 2-isopropylidene-.alpha.-methyl-	017219-01-1	54888272	0	0	0
Cyclohexene, 3-methyl-6-(1-methylethylidene)-	000586-63-0	99997825	0	0	56943816
Cyclopropane, nonyl-	074663-85-7	72545383	0	0	0
1,3-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-86-5	62783062	0	0	0
1,6,10-Dodecatrien-3-ol, 3,7,11-trimethyl-, (E)-	040716-66-3	197877337	0	0	0
Benzene, 1-methyl-4-(1,2,2-trimethylcyclopentyl)-, (R)-	016982-00-6	62421061	0	0	0
Ethanone, 1-(3-methoxyphenyl)-	000586-37-8	39495184	0	0	0
Decanoic acid, ethyl ester	000110-38-3	3230117674	0	3670115629	708146701
Botran	000099-30-9	18637360	0	53773551	0
Methyl 10-methyl-dodecanoate	1000336-24-9	19882943	0	0	0
4-Amino-3-bromo-5-methylbenzenesulfonic acid	1000305-65-0	15049577	0	0	0
Benzoic acid	000065-85-0	0	0	981234369	0
Isobornyl acetate	000125-12-2	0	0	110935428	29792571

2(3H)-Furanone, dihydro-5-pentyl-	000104-61-0	0	0	38694342	0
4-tert-Butylcyclohexyl acetate	032210-23-4	0	0	61215064	0
1-Penten-3-one, 1-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	007779-30-8	0	0	49677395	16041642
Dodecanoic acid	000143-07-7	0	0	190929726	55553467
Pentanoic acid, 2,2,4-trimethyl-3-carboxyisopropyl, isobutyl ester	1000140-77-5	0	0	52401266	0
1,2-Benzisothiazole, 3-(hexahydro-1H-azepin-1-yl)-, 1,1-dioxide	309735-29-3	0	0	42632329	0
Acetic acid	000064-19-7	0	0	2382532782	1941634338
Glycerin	000056-81-5	0	0	72991485	0
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-, (Z)-	003879-26-3	0	0	70676093	116399031
Undecanoic acid, 2,8-dimethyl-, methyl ester	055955-74-3	0	0	29509679	0
Nonadecanoic acid, ethyl ester	018281-04-4	0	0	36157108	0
Tetradecanoic acid	000544-63-8	0	0	109699557	0
Butanoic acid, 2-methyl-	000116-53-0	0	0	21603674	17019971
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	0	0	45385845	0
2-Nonanone	000821-55-6	0	0	33621377	0
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (1R)-	000464-49-3	0	0	33314585	0
Cyclooctane	000292-64-8	0	0	56024797	0
Benzene, 2-(1,3-butadienyl)-1,3,5-trimethyl-	005732-00-3	0	0	133798097	0
9-Octadecenoic acid, ethyl ester	006512-99-8	0	0	34022837	0
1,3-Dioxolane, 2,4,5-trimethyl-	003299-32-9	0	0	ND	288593563
Benzeneacetaldehyde	000122-78-1	0	0	ND	39488758
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	000535-77-3	0	0	ND	14095131
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (1S)-	000464-48-2	0	0	ND	18795469
2(3H)-Furanone, 5-heptyldihydro-	000104-67-6	0	0	ND	22293721
2-Propenoic acid, 3-phenyl-, ethylester	000103-36-6	0	0	ND	21429536
Methyl tetradecanoate	000124-10-7	0	0	ND	23954901
N,N-Bis(2-hydroxyethyl)-2-aminoethanesulfonic acid	010191-18-1	0	0	ND	23126899
Cyclohexanol, 2-(1,1-dimethylethyl)-	013491-79-7	0	0	ND	60849836
Homomenthyl salicylate	052253-93-7	0	0	ND	20587465
1,2-Benzenedicarboxylic acid, butyl 2-methylpropyl ester	017851-53-5	0	0	ND	33325952
n-Propyl 9-octadecenoate	1000336-71-6	0	0	ND	8900180
Cyclohexanone, 2-cyclohexylidene-	001011-12-7	0	0	ND	29776545
1-Octadecene	000112-88-9	0	0	ND	27796275
i-Propyl hexadecanoate	1000336-63-4	0	0	ND	21657662

Perfil de compuestos volátiles de queso manchego

Nombre	# de cas	Queso Normal	Queso refrigerado	Queso al sol
Trichloromethane	000067-66-3	55493587	0	0
2-Butanone, 3-hydroxy-	000513-86-0	403953768	0	0
Toluene	000108-88-3	13332745.7	9343788	18032677
2-Buten-1-ol, 2-methyl-	004675-87-0	11115967	0	0
p-Xylene	000106-42-3	9923463.5	11031756	26131992
1-Hexanol	000111-27-3	53029546.5	21079745	105742061
Styrene	000100-42-5	7584019	0	0
2-Heptanone	000110-43-0	55331175	0	94664034
Heptanal	000111-71-7	12502872.3	0	0
Oxime-, methoxy-phenyl-__	1000222-86-6	386705555	474544258	311071229
Bicyclo[3.1.1]hept-2-ene, 2,6,6-trimethyl-, (.+/- .)-	002437-95-8	9222060	0	0
2-Heptenal, (E)-	018829-55-5	5224153	0	0
Benzaldehyde	000100-52-7	7760411.33	22348407	56673089
1-Heptanol	000111-70-6	25670672	0	46609466
.beta.-Pinene	000127-91-3	5534233.5	9457899	0
Benzene, 1,2-dichloro-	000095-50-1	46355603.3	0	0
Benzene, 1,3-dichloro-	000541-73-1	23692923	0	0
D-Limonene	005989-27-5	122158980	91823549	0
Naphthalene, decahydro-, trans-	000493-02-7	25424749	0	0
Decane, 4-methyl-	002847-72-5	8003714	0	0
1-Octanol	000111-87-5	12913477	7663538	20228410
Undecane	001120-21-4	33395401.7	132641225	29885216
Nonanal	000124-19-6	40137176	0	28880714
Cyclohexane, (4-methylpentyl)-	061142-20-9	27632678	0	0
cis-Decalin, 2-syn-methyl-	1000155-85-6	11431786	0	0
Octanoic Acid	000124-07-2	59419564.3	175308529	496341400
Dodecane	000112-40-3	55721592.7	172335561	51787217
Undecane, 3,6-dimethyl-	017301-28-9	26855726.3	11734020	0
Undecane, 2,6-dimethyl-	017301-23-4	7068199	0	0
Nonadecane, 9-methyl-	013287-24-6	10744146	0	0
Nonanoic acid	000112-05-0	17759093.3	61934039	140626379
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-propyl-	000698-76-0	17425315	15588603	0
2-Undecanone	000112-12-9	18559803.7	6488995	25684688
Tridecane	000629-50-5	32313605	108439134	40959120
Heptylcyclohexane	005617-41-4	11655389.5	12079274	0
n-Decanoic acid	000334-48-5	10660395.5	0	125552388

Butanoic acid, butyl ester	000109-21-7	13420895	0	0
Decanoic acid, ethyl ester	000110-38-3	4721504	12066222	23012115
Tetradecane	000629-59-4	13183725	12165890	0
Methoxyacetic acid, 2-tetradecyl ester	1000282-04-8	5287268	0	0
Cyclooctane, 1,2-dimethyl-	013151-94-5	11311152	0	0
2H-Pyran-2-one, tetrahydro-6-pentyl-	000705-86-2	36734923.5	31735358	68048869
Butylated Hydroxytoluene	000128-37-0	14311820	7446618	12986000
Propanoic acid, 2-methyl-, 1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propanediyl ester	074381-40-1	78623450	13371496	0
Propylparaben	000094-13-3	7822656.5	0	0
Benzophenone	000119-61-9	4979755.67	0	0
Cyclopentaneacetic acid, 3-oxo-2-pentyl-, methyl ester	024851-98-7	8349903.33	0	0
Cyclotetradecane	000295-17-0	3917188	0	0
Hexadecane	000544-76-3	10456420.5	0	9731179
2H-Pyran-2-one, 6-heptyltetrahydro	000713-95-1	9910759.67	10186312	37570068
Octanal, 2-(phenylmethylene)-	000101-86-0	2757967.67	0	0
Eicosane	000112-95-8	4310031.5	14386440	5631635
Octadecanal	000638-66-4	3853243.5	0	0
2-Hexadecene, 3,7,11,15-tetramethyl-, [R-[R*,R*-(E)]]-	014237-73-1	5133198.33	3323427	5488633
Phthalic acid, butyl isohexyl este	1000309-03-6	28685457	0	0
7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	082304-66-3	6022298.33	0	9149936
1,2-Benzenedicarboxylic acid, butyl 2-methylpropyl ester	017851-53-5	21367505.5	0	6476030
2-Pentanamine	000625-30-9	12665329	0	0
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	12838472	0	0
2-Heptenal, (Z)-	057266-86-1	6040997	0	3647281
Benzene, 1,4-dichloro-	000106-46-7	101219110	233173531	245435082
1-Octyl trifluoroacetate	002561-21-9	13148188	0	0
Decane, 3-methyl-	013151-34-3	20607043	0	0
Carbonic acid, isobutyl nonyl este	1000314-60-6	28427943	0	0
Naphthalene, decahydro-2-methyl-	002958-76-1	15844545	0	7659710
3-Aziridinopropionaldehyde carbethoxyhydrazone	1000255-13-6	27753414	0	0
Sulfurous acid, dodecyl 2-ethylhexyl ester	1000309-19-5	65073342	0	0
Undecane, 3-methyl-	001002-43-3	14373608	0	0
Nonyl trifluoroacetate	1000351-74-3	23565831	0	0
10-Methylnonadecane	056862-62-5	18141619	0	0
1-Iodoundecane	004282-44-4	10462704	0	0
Cyclohexane, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	003178-24-3	8509717	0	0
Decane, 1,1'-oxybis-	002456-28-2	4868657	0	0
Nonanoic acid, 5-methyl-, ethyl ester	116530-40-6	3940057	0	0

Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	003891-98-3	4750690	0	0
1-Tetradecanol	000112-72-1	9210951	4573747	0
Oxirane, heptadecyl-	067860-04-2	3426112	0	0
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	000084-69-5	26757092	0	0
Dibutyl phthalate	000084-74-2	4335650	3292283	0
.alpha.-Pinene	000080-56-8	6386621	4979556	0
Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	000638-36-8	36169494	0	0
Nonadecane	000629-92-5	5201181	0	24757943
Oxalic acid, cyclobutyl heptadecylester	1000309-70-7	4048214	0	0
Decanoic acid, silver(1+) salt	013126-67-5	5459414	0	0
Propanoic acid, 2-methyl-, 3-hydroxy-2,4,4-trimethylpentyl ester	074367-34-3	10089998	0	0
11H-Dibenzo[b,e][1,4]diazepin-11-one, 5-(3-aminopropyl)-5,10-dihydro	013450-73-2	29829550	0	0
2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyn-4,7-diol	000126-86-3	5885583	0	0
Heneicosane, 11-(1-ethylpropyl)-	055282-11-6	4842121	0	0
Undecyl trifluoroacetate	1000351-74-6	6630004	0	8338224
Pyridine-3-carboxamide, oxime, N-(2-trifluoromethylphenyl)-	288246-53-7	3132927	0	0
Cyclopentanetridecanoic acid, methyl ester	024828-61-3	2793294	0	0
Acetic acid	000064-19-7	0	538056983	1167815330
Disulfide, dimethyl	000624-92-0	0	33850893	28177272
2-Buten-1-ol, 3-methyl-	000556-82-1	0	17046182	23523816
2,3-Butanediol	000513-85-9	0	329750554	98081862
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9	0	5167922	0
Propanal, 3-(methylthio)-	003268-49-3	0	26882226	30624861
Dimethyl trisulfide	003658-80-8	0	23944155	24022770
Hexanoic acid	000142-62-1	0	379212690	831782016
Benzeneacetaldehyde	000122-78-1	0	31180898	73902155
1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-85-4	0	15504028	0
n-Amylcyclohexane	029949-27-7	0	9359201	0
Ethanol, 2-phenoxy-	000122-99-6	0	10483006	16979741
Caprolactam	000105-60-2	0	15646113	0
1-Tridecene	002437-56-1	0	5417772	0
7-Hexadecene, (Z)-	035507-09-6	0	4260885	0
Z-8-Hexadecene	1000130-87-5	0	3773104	0
Methoxyacetic acid, heptadecyl ester	1000282-99-1	0	3062607	0
Pentadecanoic acid, ethyl ester	041114-00-5	0	2102497	0
Tritetracontane	007098-21-7	0	2685862	0
E-3-Pentadecen-2-ol	1000130-83-8	0	1988626	0
Cyclohexan-1,4,5-triol-3-one-1-carboxylic acid	1000128-45-5	0	0	33274236

1-Pentanol	000071-41-0	0	0	22675820
Butanoic acid, ethyl ester	000105-54-4	0	0	256208151
Butanoic acid	000107-92-6	0	0	866294815
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1	0	0	10182591
.beta.-Myrcene	000123-35-3	0	0	7241100
Hexanoic acid, ethyl ester	000123-66-0	0	0	203357569
Benzyl Alcohol	000100-51-6	0	0	26368373
Phenylethyl Alcohol	000060-12-8	0	0	33139839
1-Nonanol	000143-08-8	0	0	17234144
Octanoic acid, ethyl ester	000106-32-1	0	0	44978669
1-Hexadecene	000629-73-2	0	0	12203800
11,13-Dimethyl-12-tetradecen-1-olacetate	1000130-81-0	0	0	21771946
Dodecanoic acid, ethyl ester	000106-33-2	0	0	24907732
Pentanoic acid, 2,2,4-trimethyl-3-carboxyisopropyl, isobutyl ester	1000140-77-5	0	0	27035508
Titanium tetrachloride	007550-45-0	0	0	8537176
Trichloroacetic acid, hexadecyl ester	074339-54-1	0	0	6113653
2-Octadecyl-propane-1,3-diol	005337-61-1	0	0	4986606

Perfil de compuestos volátiles de jamón cocido.

Nombre	# de cas	Jamón normal	Jamón exp abiertamente	Jamón refrigerado	Jamón al sol
Trichloromethane	000067-66-3	59134488	65168463	100612458	98651457
2-Butenal	004170-30-3	37054634	0	30398257	36290022
Pentanal	000110-62-3	58038287	0	58450592	0
Acetic acid	000064-19-7	0	1.298E+09	51496728	1.023E+09
2-Butenal, 2-methyl-, (E)-	000497-03-0	63942546	49070072	0	0
Toluene	000108-88-3	47223146	87915688	102430096	78567217
Thiophene, 3-methyl-	000616-44-4	0	0	0	51260367
Hexanal	000066-25-1	295762378	309547742	219244230	815488831
Ethylbenzene	000100-41-4	35459024	51761323	35506201	32986414
p-Xylene	000106-42-3	64961270	88214627	39322325	60182803
Styrene	000100-42-5	0	71619752	51221880	39185495
Heptanal	000111-71-7	48892225	48234841	44671267	85510884
Propanal, 3-(methylthio)-	003268-49-3	89352818	111190179	93154248	64839612
Ethanone, 1-(2-furanyl)-	001192-62-7	97894274	0	0	0
Oxime-, methoxy-phenyl-_	1000222-86-6	518943863	373599754	554363812	382164199
1S-.alpha.-Pinene	007785-26-4	151539626	131736063	0	84433952
Benzaldehyde	000100-52-7	260498970	424000357	333160990	899127779
Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	028634-89-1	46869515	0	0	0
Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)-	018172-67-3	122115999	113345749	87791496	85289463
1-Octen-3-ol	003391-86-4	57357793	81968205	61204513	204629597
Benzene, 1,4-dichloro-	000106-46-7	668712010	1.717E+09	1.03E+09	1.25E+09
Benzene, 1,2-dichloro-	000095-50-1	166492946	0	0	124879175
Benzene, 1,3-dichloro-	000541-73-1	82766599	0	0	0
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	74365156	77106206	63837979	0
D-Limonene	005989-27-5	352134387	510877133	294807091	255429163
Benzeneacetaldehyde	000122-78-1	0	42025698	0	49298800
1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-85-4	78930860	101803850	64570762	125474177
Acetophenone	000098-86-2	59395042	79632998	55396388	53471405
Cyclooctane	000292-64-8	31571692	0	0	89408141
Phenol, 3-methyl-	000108-39-4	47318698	45097615	60818820	32780439
Pyrazine, tetramethyl-	001124-11-4	51048022	0	63169872	0
Phenol, 2-methoxy-	000090-05-1	312130064	271580310	228048997	224536803
Nonanal	000124-19-6	283495154	511014621	285571269	314879887
Maltol	000118-71-8	54679275	0	50818278	0

Acetic acid, 2-ethylhexyl ester	000103-09-3	42772904	0	265101592	0
3-Cyclohexen-1-ol, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-	000562-74-3	49880912	67341332	48862208	87982846
Octanoic Acid	000124-07-2	107400887	138472574	81321614	190606702
3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.4-trimethyl-	000098-55-5	0	239489119	53279918	74756472
Phenol, 2-methoxy-4-methyl-	000093-51-6	120803947	112384787	98777447	136594206
Dodecane	000112-40-3	81020166	81261953	81972012	75520145
Decanal	000112-31-2	56242689	84574652	50373448	42866816
Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-	001014-60-4	59673889	0	0	0
Eicosane	000112-95-8	45007133	41945456	0	43002207
Phenol, 4-ethyl-2-methoxy-	002785-89-9	76455958	65712499	38719220	86692195
Bornyl acetate	000076-49-3	32486376	43245271	0	0
Thymol	000089-83-8	103402265	0	0	0
Tridecane	000629-50-5	100637296	79824743	102566130	87468465
Hexadecane, 3-methyl-	006418-43-5	46707549	0	0	0
Eugenol	000097-53-0	108879200	74977301	91864782	72260963
Copaene	003856-25-5	42670251	45319851	37722765	48608239
Tetradecane	000629-59-4	61369365	47911693	42036891	63111598
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-	013877-93-5	88771882	87667363	73666713	0
Caryophyllene	000087-44-5	113521396	130300118	98822211	147534662
Cyclodecane	000293-96-9	46557920	0	0	0
Butylated Hydroxytoluene	000128-37-0	72560310	60259606	39884933	82275023
Propanoic acid, 2-methyl-, 1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propanediyl ester	074381-40-1	58214950	47301588	52909215	77484516
Propylparaben	000094-13-3	138875361	141022581	111924658	125264485
Benzophenone	000119-61-9	78503294	0	56283901	0
Tetradecanal	000124-25-4	0	0	0	90082813
2-Butenal, 3-methyl-	000107-86-8	53126364	0	0	0
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	56445965	0	42186587	0
Bicyclo[3.1.0]hexane, 4-methyl-1-(1-methylethyl)-, didehydro deriv.	058037-87-9	82010420	0	0	0
.alpha.-Pinene	000080-56-8	156676501	146998262	119848018	97739823
Bicyclo[3.1.0]hexane, 4-methylene-1-(1-methylethyl)-	003387-41-5	38823552	0	0	0
.beta.-Pinene	000127-91-3	118264837	0	0	0
1-Hexanol, 2-ethyl-	000104-76-7	217808781	0	243750869	0
Sorbic Acid	000110-44-1	70368667	3.299E+09	0	1.753E+09
1,6-Octadien-3-ol, 3,7-dimethyl-	000078-70-6	98952442	254937216	123520940	0
3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, (S)-	010482-56-1	0	0	0	43000514
Phenol, 2-methoxy-3-(2-propenyl)-	001941-12-4	108551167	0	77880193	75086999

Pentadecane	000629-62-9	0	32014128	0	38639827
Nonadecane	000629-92-5	0	37470559	0	0
Octadecanal	000638-66-4	0	0	0	40032290
o-Xylene	000095-47-6	58157378	0	0	0
1-Hexanol	000111-27-3	30923151	0	35295937	73738782
.beta.-Phellandrene	000555-10-2	49833910	0	0	0
Phenol, 4-methyl-	000106-44-5	46208871	62181005	0	0
Z-2-Octadecen-1-ol	1000131-11-0	31383964	0	0	0
1-Tridecene	002437-56-1	43030640	48406193	0	0
2,3-Butanediol	000513-85-9	0	211979129	0	194689775
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1	0	67349038	0	0
2,4-Hexadien-1-ol	000111-28-4	0	492672617	0	0
.alpha.-Phellandrene	000099-83-2	0	96033769	0	0
Phenol	000108-95-2	0	70078460	0	0
5-Hepten-2-ol, 6-methyl-	001569-60-4	0	43857767	0	0
Hexanoic acid	000142-62-1	0	40562094	0	100197766
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-87-6	0	64814395	35631068	46501996
Benzyl Alcohol	000100-51-6	0	47403030	0	37411211
7-Octen-2-ol, 2,6-dimethyl-	018479-58-8	0	173211295	0	0
Acetic acid, phenylmethyl ester	000140-11-4	0	92355095	58431178	54079559
Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,2.beta.,5.alpha.)-(./-./-)-	015356-70-4	0	61005650	0	0
1-Nonanol	000143-08-8	0	48820406	0	55800594
Octanoic acid, silver(1+) salt	024927-67-1	0	101345054	0	0
6-Octen-1-ol, 3,7-dimethyl-, (R)-	001117-61-9	0	43698511	0	0
2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-,(Z)-	000106-25-2	0	42358216	0	0
Cyclohexanol, 2-(1,1-dimethylethyl)-	013491-79-7	0	100034222	0	86709705
Propanoic acid, 2-methyl-, 3-hydroxy-2,4,4-trimethylpentyl ester	074367-34-3	0	45813581	0	0
2,4-Hexadienal, (E,E)-	000142-83-6	0	105174913	0	0
6-Hepten-1-ol, 2-methyl-	1000132-12-0	0	51701537	0	0
2-Nonenal, (E)-	018829-56-6	0	51409640	0	0
Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,2.alpha.,5.beta.)]-	002216-52-6	0	50538495	0	0
Isobornyl acetate	000125-12-2	0	53566864	0	0
n-Decanoic acid	000334-48-5	0	50000081	0	60069978
Hexadecanal	000629-80-1	0	0	0	48314346
2-Butenal, (Z)-	015798-64-8	0	39076209	0	0
Propanal, 2-methyl-3-phenyl-	1000131-87-6	0	0	67899071	0
Benzaldehyde, 4-(1-methylethyl)-	000122-03-2	0	0	62945393	0

Bacchotricuneatin c	066563-30-2	0	0	69839633	0
.alpha.-Cubebene	017699-14-8	0	0	31454874	0
Bicyclo[7.2.0]undec-4-ene, 4,11,11-trimethyl-8-methylene-, [1R-(1R*,4Z,9S*)]-	000118-65-0	0	0	59062825	84180222
Bicyclo[3.1.0]hex-2-ene, 2-methyl-5-(1-methylethyl)-	002867-05-2	0	0	62730671	49336679
Dimethyl trisulfide	003658-80-8	0	0	67040778	111712312
2-Methylene cyclopentanol	020461-31-8	0	0	31413605	0
Disulfide, dimethyl	000624-92-0	0	0	0	97474505
2-Cyclopenten-1-one, 2-hydroxy-3-methyl-	000080-71-7	0	0	0	62479311
1-Octanol	000111-87-5	0	0	0	65424682
Nonanoic acid	000112-05-0	0	0	0	288437981
1-Hexadecanol	036653-82-4	0	0	0	30164309
2,3-Dihydrofuran	001191-99-7	0	0	0	56315954
Furan, 2-pentyl-	003777-69-3	0	0	0	209971613

Perfil de compuestos volátiles de papa frita

Nombre	# de cas	Papas normales	Papas al sol	Papas exp abiertamente
Ethyl ether	000060-29-7	19422169	0	24655790
Propanal, 2-methyl-	000078-84-2	106651958	0	0
Trichloromethane	000067-66-3	89967161	107191110	131711101
Butanal, 3-methyl-	000590-86-3	188253932	44964754	154168412
Butanal, 2-methyl-	000096-17-3	334452974	0	136775576
Pentanal	000110-62-3	177202105	353327817	95270710
Disulfide, dimethyl	000624-92-0	55528280	18649362	18359118
Toluene	000108-88-3	17965747	33525695	20141740
1-Pentanol	000071-41-0	46540153	156367285	0
Hexanal	000066-25-1	913257074	2.59E+09	236328348
Pyrazine, methyl-	000109-08-0	103735909	0	14953446
2-Furanmethanol	000098-00-0	6207024.3	0	0
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	13995874	34614392	0
Styrene	000100-42-5	12375578	0	17878223
Heptanal	000111-71-7	26535456	192644220	18791184
Propanal, 3-(methylthio)-	003268-49-3	146400906	68357081	125231457
Pyrazine, 2,5-dimethyl-	000123-32-0	326559823	0	0
.alpha.-Pinene	000080-56-8	42237376	32225544	23042226
2-Heptenal, (Z)-	057266-86-1	61951506	0	10187086
Benzaldehyde	000100-52-7	109058857	237729596	81451774
Bicyclo[3.1.1]heptane, 6,6-dimethyl-2-methylene-, (1S)-	018172-67-3	86130168	74913412	44032757
5-Decene, (E)-	007433-56-9	7863804	0	0
Pyrazine, 2-ethyl-6-methyl-	013925-03-6	187283789	0	18945873
Pyrazine, 2-ethyl-5-methyl-	013360-64-0	151813658	0	0
Pyrazine, trimethyl-	014667-55-1	234233121	0	0
Pyrazine, 2-ethenyl-6-methyl-	013925-09-2	25941296	0	0
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	32732441	71905292	52615780
D-Limonene	005989-27-5	417023220	937771245	588119421
Benzeneacetaldehyde	000122-78-1	419032211	96215298	246801175
1,4-Cyclohexadiene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-85-4	110613697	0	103293813
Ethanone, 1-(1H-pyrrol-2-yl)-	001072-83-9	25275971	0	15674538
Pyrazine, 3-ethyl-2,5-dimethyl-	013360-65-1	239843260	0	46379259
Pyrazine, 2-ethyl-3,5-dimethyl-	013925-07-0	43869638	0	43713704
2,3-Dimethyl-5-ethylpyrazine	015707-34-3	68116144	0	0

Undecane	001120-21-4	76167710	126498079	80462011
Phenylethyl Alcohol	000060-12-8	65375803	40461303	23594180
Pyrazine, 2,3-diethyl-5-methyl-	018138-04-0	18617628	0	0
Pyrazine, 3,5-diethyl-2-methyl-	018138-05-1	36363399	0	0
2,3,5-Trimethyl-6-ethylpyrazine	017398-16-2	18365329	0	0
Octanoic Acid	000124-07-2	93918867	49490150	65758139
1-Dodecene	000112-41-4	96274009	9881220	0
Dodecane	000112-40-3	87347920	100919750	85217234
5,6,7,8-Tetrahydroquinoxaline	034413-35-9	6163849.3	0	0
Decanal	000112-31-2	21304125	48192286	28311770
Nonanoic acid	000112-05-0	49836351	44118812	42957528
Tridecane	000629-50-5	48373613	52197934	40066648
2-Methoxy-4-vinylphenol	007786-61-0	16333465	0	0
n-Decanoic acid	000334-48-5	15080642	10982731	20210383
Cyclotetradecane	000295-17-0	18250807	5605124	0
Decanoic acid, ethyl ester	000110-38-3	10747429	12824448	9377361.5
Tetradecane	000629-59-4	10342214	23168865	13326010
11-Tetradecyn-1-ol acetate	033925-72-3	8181769	0	0
Butylated Hydroxytoluene	000128-37-0	0	8384595.3	41063587
Benzophenone	000119-61-9	15984423	7394332	0
Nonadecane	000629-92-5	12072458	5119857	0
Octanal, 2-(phenylmethylene)-	000101-86-0	12856362	8232730	5374383
Pentadecanoic acid, ethyl ester	041114-00-5	15073520	0	0
Z-10-Pentadecen-1-ol	1000245-48-5	16159890	0	0
1,2-Benzenedicarboxylic acid, mono(2-ethylhexyl) ester	004376-20-9	117892073	0	0
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	000084-69-5	16203854	0	0
Oxirane, tetradecyl-	007320-37-8	9423178	0	0
7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	082304-66-3	27012418	11049511	7772592
Dibutyl phthalate	000084-74-2	14227281	0	0
Hexadecanoic acid, ethyl ester	000628-97-7	10784039	7808883.3	0
Pyridine-3-carboxamide, oxime, N-(2-trifluoromethylphenyl)-	288246-53-7	17061217	0	0
Heptadecane	000629-78-7	11364483	0	0
Benzo[b]dihydropyran, 6-hydroxy-4,4,5,7,8-pentamethyl-	050442-70-1	18691962	0	0
1-Nonadecene	018435-45-5	5669970	0	0
trans-2,3-Epoxydecane	054125-39-2	5466289	0	0
Tetracosane, 1-bromo-	006946-24-3	10114388	0	0
Piperidine, 1-(5-trifluoromethyl-2-pyridyl)-4-(1H-pyrrol-1-yl)-	1000268-74-7	16635398	0	0

Eicosane	000112-95-8	26328163	6871011.5	0
Pyrrole	000109-97-7	64897091	0	0
p-Xylene	000106-42-3	14959901	38490815	24980761
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1	12136370	32491464	17709324
.beta.-Pinene	000127-91-3	98634591	68434846	0
3,5-Octadien-2-one	038284-27-4	35613305	0	0
4-Undecene, 5-methyl-	020634-43-9	14389744	0	0
Ethanol, 2-phenoxy-	000122-99-6	10608595	17534140	7484936.5
2-Methyl-5,6,7,8-tetrahydroquinoxaline	038917-65-6	14271875	0	5003642
7-Hexadecene, (Z)-	035507-09-6	8709244.5	0	0
Nonanoic acid, 5-methyl-, ethyl ester	116530-40-6	9130610	0	0
Oxirane, hexadecyl-	007390-81-0	0	7938512	0
Tetradecanal	000124-25-4	11286511	0	0
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene,2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	000111-02-4	535724888	0	0
Cholesta-3,5-diene	000747-90-0	30260052	0	0
Hentriacontane	000630-04-6	17216102	0	0
2-Hexenal	000505-57-7	27539525	72579335	0
2-Heptanone	000110-43-0	38445723	0	0
Dimethyl trisulfide	003658-80-8	43181468	40728716	24335198
Hexanoic acid	000142-62-1	296510784	0	0
3-Octen-2-one	001669-44-9	18782818	76858898	0
5H-5-Methyl-6,7-dihydrocyclopentapyrazine	023747-48-0	10457776	0	0
Benzoic acid	000065-85-0	107988263	21286997	93300491
2,4-Nonadienal	006750-03-4	10217823	16404856	0
n-Tridecan-1-ol	000112-70-9	5517262	10331031	0
Propanoic acid, 2-methyl-, 1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propanediyl ester	074381-40-1	13218986	40204503	14733186
Heptadecanoic acid, ethyl ester	014010-23-2	6954367	0	0
1-Heptadecene	006765-39-5	6420886	0	0
9-Cedranone	1000156-23-2	8484436	0	0
Ethene, ethoxy-	000109-92-2	0	61849789	0
2-Butenal, (E)-	000123-73-9	0	49669992	0
Pentane, 1-chloro-	000543-59-9	0	31371560	0
Ethylbenzene	000100-41-4	0	28993284	19497671
2,4-Hexadienal, (E,E)-	000142-83-6	0	40451260	0
2-Heptenal, (E)-	018829-55-5	0	632166219	0
1-Heptanol	000111-70-6	0	96263396	0
1-Octen-3-ol	003391-86-4	0	405059923	0

Furan, 2-pentyl-	003777-69-3	0	260591763	0
Decane	000124-18-5	0	104721228	0
Benzene, 1,4-dichloro-	000106-46-7	0	578557916	1.062E+09
Benzene, 1,2-dichloro-	000095-50-1	0	86194953	0
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	0	12882482	7482807.5
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-87-6	0	79227568	0
3,5-Octadien-2-ol	069668-82-2	0	77220251	0
1-Octanol	000111-87-5	0	136012612	0
Nonanal	000124-19-6	0	564932084	89472789
Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	000488-23-3	0	15820360	0
Cyclohexane, pentyl-	004292-92-6	0	10084344	0
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	0	9989384	0
Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-	000527-53-7	0	16771260	0
2-Nonenal, (E)-	018829-56-6	0	37761698	0
3-Cyclohexene-1-methanol, .alpha.,.alpha.,4-trimethyl-, (S)-	010482-56-1	0	8044583	0
2,4-Nonadienal, (E,E)-	005910-87-2	0	63367590	0
2-Decenal, (E)-	003913-81-3	0	95498982	0
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-, formate, endo-	007492-41-3	0	10925637	0
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	0	7845028.7	0
Formamide, N,N-dibutyl-	000761-65-9	0	7087777.7	0
2-Undecenal	002463-77-6	0	24255458	0
4-tert-Butylcyclohexyl acetate	032210-23-4	0	11161719	0
11H-Dibenzo[b,e][1,4]diazepin-11-one, 5-(3-aminopropyl)-5,10-dihydro	013450-73-2	0	0	11129869
Naphthalene, 1,2,3,5,6,7,8,8a-octahydro-1,8a-dimethyl-7-(1-methylethenyl)-, [1R-(1.alpha.,7.beta.,8a.alpha.)]-	004630-07-3	0	8623440	0
3-Buten-2-one, 4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-	006901-97-9	0	5188136.5	0
Cobalt, bis-allyl-(pentamethylcyclopentadienyl)-	1000153-78-9	0	5671080	0
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	0	8440692	11113376
Pentadecane	000629-62-9	0	8028670	0
Lilial	000080-54-6	0	6123778.7	0
Hexadecane	000544-76-3	0	5125139	0
1,2-Benzenedicarboxylic acid, butyl 2-methylpropyl ester	017851-53-5	0	5157211.7	0
Methacrolein	000078-85-3	0	52450771	0
2-Butenal, 3-methyl-	000107-86-8	0	9813183	0
Furan, 2,4-dimethyl-	003710-43-8	0	10683540	0
Oxime-, methoxy-phenyl-	1000222-86-6	0	392050420	408653263
Cyclopentane, butyl-	002040-95-1	0	12684553	0

2-Dodecene, (Z)-	007206-26-0	0	9959530	0
2-Cyclohexen-1-one, 2-methyl-5-(1-methylethenyl)-, (S)-	002244-16-8	0	19161946	0
Cyclohexanol, 2-(1,1-dimethylethyl)-	013491-79-7	0	52944530	0
Oxirane, decyl-	002855-19-8	0	12955611	0
Nonane, 2,2,4,4,6,8,8-heptamethyl-	004390-04-9	0	12170199	0
1,4-Methanoazulene, decahydro-4,8,8-trimethyl-9-methylene-, [1S-(1.alpha.,3a.beta.,4.alpha.,8a.beta.)]	000475-20-7	0	9835960	0
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	0	9667994	0
Decyl trifluoroacetate	000333-88-0	0	12254269	0
.alpha. Isomethyl ionone	000127-51-5	0	6622849	0
2(4H)-Benzofuranone, 5,6,7,7a-tetrahydro-4,4,7a-trimethyl-	015356-74-8	0	6090648	0
Bufo-20,22-dienolide, 3,14-dihydroxy-, (3.beta.,5.beta.)-	000465-21-4	0	10938929	0
Tetradecanoic acid, ethyl ester	000124-06-1	0	5995084	0
2-Pentenal, (E)-	001576-87-0	0	54616274	0
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9	0	39441016	16829074
n-Amylcyclohexane	029949-27-7	0	10082435	0
Cyclopropane, nonyl-	074663-85-7	0	9743305	0
Isobornyl acetate	000125-12-2	0	11296208	6547929
3-Buten-2-one, 4-(2,2-dimethyl-6-methylenecyclohexyl)-	000079-76-5	0	5416661	0
1-Tetradecanol	000112-72-1	0	10378687	0
Eicosane, 10-methyl-	054833-23-7	0	5955548	0
Nonane	000111-84-2	0	0	6477454
Methanethiol	000074-93-1	0	0	23097934
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (1S)-	000464-48-2	0	0	5883224
Cyclohexanol, 5-methyl-2-(1-methylethyl)-, (1.alpha.,2.beta.,5.alpha.)-(./-.)-	015356-70-4	0	0	9824389
Phenol	000108-95-2	0	0	12967574
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	0	0	8032792
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	0	0	11722675
Naphthalene, 1,4-dimethyl-	000571-58-4	0	0	10587105

