UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA

Obtención de una herramienta quimiométrica para la clasificación sensorial de una fragancia

Cristhian Camilo Fernández Ramírez

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias
Departamento de Química
Bogotá, Colombia
2022

Obtención de una herramienta quimiométrica para la clasificación sensorial de una fragancia

Cristhian Camilo Fernández Ramírez

Trabajo final de maestría para optar el título de:
Magister en Ciencias Químicas

Directora.
Qca. Dr. Sci. Diana Cristina Sinuco León
Departamento de Química

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias
Departamento de Química
Bogotá, Colombia
2022

Creer que se puede es el primer paso,
el resto es perseverancia.

AGRADECIMIENTOS

A mi madre, mi hermana, mi hermano y mi novia por su motivación y apoyo incondicional.

A la profesora Diana Cristina Sinuco León, directora del trabajo final de maestría, por el constante acompañamiento durante todos estos dos años.

A mi amigo Mateo Martínez por su acompañamiento para lograr este trabajo.

A Óscar Pedraza, gerente de calidad y asuntos regulatorios en SYMRISE por su confianza y apoyo para realizar esta investigación.

A Augusto Téllez, ingeniero de calidad en SYMRISE por su ayuda y amplio conocimiento en todos los temas de cromatografía de gases.

A Andrea, Angie, Augusto, Bayron, David, Dennys, Duvan, Julian, Laura, María Isabel, Mariana, Natalia, Yini y Paola que me apoyaron para la realización del panel sensorial.

A Sthefanny Fernández por sus aportes en los temas sensoriales de las fragancias.

A SYMRISE, compañía del sector de sabores y fragancias por permitirme realizar esta investigación.

RESUMEN

OBTENCIÓN DE UNA HERRAMIENTA QUIMIOMÉTRICA PARA LA CLASIFICACIÓN SENSORIAL DE UNA FRAGANCIA

La industria cosmética y de fragancias emplean análisis sensoriales e instrumentales para declarar la conformidad de un producto o para describirlo sensorialmente. En esta industria, el análisis sensorial es una herramienta indispensable para la toma de decisiones. Este análisis constituye una ciencia multidisciplinaria en la cual intervienen diferentes áreas del conocimiento como lo es la química, la física, la matemática, la estadística, entre otras. La finalidad del análisis sensorial es poder traducir las percepciones evocadas por los productos a través del uso de los sentidos.

Por otra parte, el análisis sensorial requiere de panelistas, de instalaciones adecuadas, de procesos de evaluación establecidos, de recurso humano capacitado, entre otras. El alto número de variables hace que definir el perfil sensorial de una fragancia sea costoso en términos de tiempo, dinero y recursos humanos. Entonces, se hace necesario reducir, reemplazar o refinar el análisis sensorial de fragancias, mediante el uso de técnicas instrumentales que faciliten la predicción del perfil sensorial de una fragancia. Para lograr este objetivo, se eligieron diez fragancias de la familia FLORAL del portafolio activo de SYMRISE Ltda. y se evaluaron sensorialmente por un panel entrenado. Después se aplicó análisis estadístico a los datos obtenidos por el panel sensorial con el fin de corroborar normalidad y eliminación de datos atípicos. Adicionalmente, se compararon las diferencias entre las medias de los datos sensoriales usando el análisis de varianzas (ANOVA); el cual comprobó la diferencia estadística entre las notas sensoriales y las evaluaciones de los panelistas. El análisis instrumental se realizó por Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC-MS) para identificar los compuestos orgánicos volátiles presentes en la formulación de cada fragancia. Con los datos sensoriales e instrumentales, se construyó una matriz de correlación con el fin de realizar análisis multivariado y predecir el perfil sensorial de una fragancia. El análisis multivariado estableció relaciones entre las fragancias y las notas sensoriales, pero no mostró una correlación directa entre las variables sensoriales e instrumentales. Así, con el fin de mejorar la interpretación de los datos se complementó el

análisis instrumental mediante Cromatografía de Gases acoplada a Olfatometria (GC-O) para la detección e identificación de compuestos olfativamente activos en cada fragancia. El análisis de GC-O identificó compuestos volátiles particulares para cada fragancia, corroborando el hecho que cada fragancia es única sensorialmente. Debido a que los compuestos olfativamente activos identificados por GC-O no fueron comunes entre las fragancias de estudio, no fue posible correlacionar los datos. Sin embargo, estos resultados no pueden emplearse para generar una nueva matriz de correlación sensorial e instrumental en un análisis multivariado.

Otro aspecto importante es el hecho que las notas sensoriales de los compuestos olfativamente activos identificados por GC-O no tiene correlación directa con los perfiles sensoriales de cada fragancia. Esto se debe a que los compuestos químicos por sí solos no definen el perfil sensorial de la fragancia. Por el contrario, las mezclas definidas de algunos de estos compuestos podrían ser quienes definen los perfiles sensoriales específicos de cada fragancia. A pesar de que el análisis por GC-O no predice el comportamiento sensorial, podría utilizarse para declarar la conformidad en el área de control de calidad mediante el uso de estos compuestos olfativamente activos como marcadores sensoriales.

Palabras clave: fragancias, análisis sensorial, análisis cromatográfico, análisis multivariado, notas sensoriales.

ABSTRACT

Obtention of a chemometric tool for the sensory classification of a fragrance

The cosmetic and fragrances industry employs sensory and instrumental analysis to declare the product conformity or obtain its sensory description. In this industry, sensory analysis is a mandatory tool for decision-making. This analysis embraces multidisciplinary sciences such as chemistry, mathematics, statistics, and specialized software. The sensory analysis aims to associate the perceptions given by-products through the senses.

Also, the sensory analysis requires panelists, appropriate equipment, established assays processes, and trained human resource, among others. Therefore, obtaining one fragrance's sensory profile is expensive in terms of time, money, and human resources.

Then, it is necessary to reduce, replace, and refine fragrances sensory analysis, using instrumental techniques that facilitate the prediction of fragrances sensory profiles. Thus, ten fragrances of the FLORAL family from SYMRISE Ltda. were chosen and evaluated by trained panelists. After that, the data obtained were processed by statistical analysis to validate normal distribution behavior and outliers. In addition, Analysis of Variance (ANOVA) was applied to calculate the mean statistical significance between sensory descriptors and the panelist results.

Gas Chromatography analysis coupled with Mass Spectrometry (GC-MS) identifies common chemical compounds in fragrance formulations. Multivariate analysis was applied to predict sensory profiles by combining sensory and instrumental results. The multivariate analysis correlated the primary sensory descriptors and the fragrances. However, it does not achieve a direct relationship between instrumental data and the analysis. Gas Chromatography - Olfactometry analysis (GC-O) allowed us to identify active compounds in each fragrance. GC-O analysis identified unique compounds in most fragrance formulations. That indicated that each fragrance is unique in sensory terms. No correlation between sensory and GC-O data was found due to afore. Then multivariate analysis could not be done to correlate GC-O and sensory analysis. That is attributed to the high variability and differentiation of studied fragrances based on all employed fragrances belonging to the FLORAL family. Another fact is that sensory descriptors of

the identified chemical compounds by GC-O do not directly correlate with the sensory profile. The reason is that lonely chemical compounds do not describe the fragrance's sensory profile. Contrary, defined blends of some of those chemical compounds could define the sensory profile of fragrances. Although GC-O analysis does not predict sensorial behavior, this could be used to declare the conformity in the control area, using active compounds as sensorial markers.

Keywords: fragrances, sensory analysis, chromatographic analysis, multivariate analysis, sensory descriptors.

TABLA DE CONTENIDO

LISTA DE FIGURAS 11

LISTA DE TABLAS 14

LISTA DE SIMBOLOS Y ABREVIATURAS 16

INTRODUCCIÓN 17

OBJETIVOS 18

OBJETIVO GENERAL 18

OBJETIVOS ESPECÍFICOS 18

1. MARCO TEÓRICO 18

2. MATERIALES Y MÉTODOS 25

2.1 Selección de panelistas para el análisis sensorial 25

2.1.1 Prueba para la detección de un estímulo 26

2.1.2 Prueba de discriminación entre niveles de intensidad: 26

2.1.3 Capacidad descriptiva de olores 27

2.2 Selección de fragancias y reactivos 27

2.3 Evaluación de las fragancias 28

2.4 Análisis estadístico y multivariado 31

2.5 Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) 32

2.6 Cromatografía de gases acoplada a Olfatometría (GC-O) 32

3 RESULTADOS Y ANÁLISIS 33

3.1 ANALISIS SENSORIAL 33

3.1.1 Pruebas de selección panelistas 33

3.1.2 Evaluación de las fragancias: 35

3.2 Análisis estadístico: 38

3.3 Análisis multivariado: 47

3.4 Análisis GC-MS y GC-O 50

4. CONCLUSIONES 60

5. PERSPECTIVAS 61

6. BIBLIOGRAFÍA 62

7. ANEXO A Formato de evaluación sensorial online 69

8. ANEXO B Resultado y perfil sensorial sin depurar 71

9. ANEXO C Diagramas de normalidad 72

10. ANEXO D Resultados y perfiles sensoriales depurados 81

11. ANEXO E Diagramas box-plot para cada fragancia 92

12. ANEXO F Matriz de correlación 96

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Tipo de escala unipolar y continua para la evaluación sensorial de las fragancias utilizada por los panelistas 29

Figura 2 Diagrama resumen de la evaluación sensorial (hecho por el autor). 31

Figura 3 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial FLORAL..... 36

Figura 4 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial CÍTRICO..... 36

Figura 5 Resultados de la prueba de Shapiro-Wilks aplicada a los datos de evaluación sensorial de las notas MADERA y CÍTRICO olfativas de 10 fragancias florales..... 37

Figura 6 Diagrama box-plot de la fragancia B para todas las notas sensoriales sin outliers. 43

Figura 7 Perfil sensorial de la fragancia B sin datos atípicos..... 45

Figura 8 Perfiles sensoriales de todas las fragancias de estudio..... 45

Figura 9 Diagrama de Componentes Principales (PCA) evaluado entre las fragancias y las notas sensoriales..... 48

Figura 10 Diagrama de Análisis de Componentes Principales (PCA) evaluado entre las fragancias y los compuestos químicos identificados por GC-MS 53

Figura 11 Diagrama de Análisis de Componentes Principales (PCA) evaluado entre las notas sensoriales y los compuestos químicos identificados por GC-MS..... 54

Figura C 1 Distribución normal para la fragancia A de la nota sensorial CÍTRICO 72

Figura C 2 Distribución normal para la fragancia A de la nota sensorial MADERA..... 72

Figura C 3 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial FRUTAL 72

Figura C 4 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial ALDEHÍDICO 73

Figura C 5 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial VERDE..... 73

Figura C 6 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial FOUGERE 74

Figura C 7 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial MUSKY 74

Figura C 8 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial EDIBLE 74

Figura C 9 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial MADERA..... 75

Figura C 10 Distribución normal para la fragancia C de la nota sensorial CÍTRICO 75

Figura C 11 Distribución normal para la fragancia C de la nota sensorial MADERA..... 75

Figura C 12 Distribución normal para la fragancia D de la nota sensorial CÍTRICO 76

Figura C 13 Distribución normal para la fragancia D de la nota sensorial MADERA..... 76

Figura C 14 Distribución normal para la fragancia E de la nota sensorial CÍTRICO 76

Figura C 15 Distribución normal para la fragancia E de la nota sensorial MADERA..... 77

Figura C 16 Distribución normal para la fragancia F de la nota sensorial CÍTRICO..... 77

Figura C 17 Distribución normal para la fragancia F de la nota sensorial MADERA 77

Figura C 18 Distribución normal para la fragancia G de la nota sensorial CÍTRICO 78

Figura C 19 Distribución normal para la fragancia G de la nota sensorial MADERA 78

Figura C 20 Distribución normal para la fragancia H de la nota sensorial CÍTRICO 78

Figura C 21 Distribución normal para la fragancia H de la nota sensorial MADERA..... 79

Figura C 22 Distribución normal para la fragancia I de la nota sensorial CÍTRICO..... 79

Figura C 23 Distribución normal para la fragancia I de la nota sensorial MADERA 79

Figura C 24 Distribución normal para la fragancia J de la nota sensorial CÍTRICO 80

Figura C 25 Distribución normal para la fragancia J de la nota sensorial MADERA 80

Figura D 1 Perfil sensorial de la fragancia A realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 82

Figura D 2 Perfil sensorial de la fragancia C realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 83

Figura D 3 Perfil sensorial de la fragancia D realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 84

Figura D 4 Perfil sensorial de la fragancia E realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 85

Figura D 5 Perfil sensorial de la fragancia F realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 86

Figura D 6 Perfil sensorial de la fragancia G realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 88

Figura D 7 Perfil sensorial de la fragancia H realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 89

Figura D 8 Perfil sensorial de la fragancia I realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 90

Figura D 9 Perfil sensorial de la fragancia J realizada por los panelistas en la evaluación sensorial 91

Figura E 1 Diagrama box-plot depurado de la fragancia A para todas las notas sensoriales.... 92

Figura E 2 Diagrama box-plot depurado de la fragancia C para todas las notas sensoriales ... 92

Figura E 3 Diagrama box-plot depurado de la fragancia D para todas las notas sensoriales ... 93

Figura E 4 Diagrama box-plot depurado de la fragancia E para todas las notas sensoriales.... 93

Figura E 5 Diagrama box-plot depurado de la fragancia F para todas las notas sensoriales.... 94

Figura E 6 Diagrama box-plot depurado de la fragancia G para todas las notas sensoriales ... 94

Figura E 7 Diagrama box-plot depurado de la fragancia H para todas las notas sensoriales ... 94

Figura E 8 Diagrama box-plot depurado de la fragancia I para todas las notas sensoriales..... 95

Figura E 9 Diagrama box-plot depurado de la fragancia J para todas las notas sensoriales 95

LISTA DE TABLAS

Tabla 1 Materias primas evaluadas por detección de estímulo..... 26

Tabla 2 Muestras codificadas para prueba detección estímulo..... 26

Tabla 3 Muestra control prueba de discriminación entre niveles de intensidad..... 27

Tabla 4 Muestras codificadas prueba capacidad descriptiva de olores..... 27

Tabla 5 Materias primas para el análisis sensorial..... 28

Tabla 6 Fragancias seleccionadas para estudio. 28

Tabla 7 Notas sensoriales seleccionadas en el estudio..... 30

Tabla 8 Resultados de la prueba detección estímulo..... 33

Tabla 9 Resultados prueba ordenamiento 34

Tabla 10 Resultados prueba capacidad descriptiva..... 34

Tabla 11 Resultados de la prueba ANOVA..... 38

Tabla 12 Resultados de la prueba F..... 41

Tabla 13 Resultados sensoriales de la fragancia B sin datos atípicos 41

Tabla 14 Notas principales de las fragancias comparadas por perfil olfativo y resultados PCA 50

Tabla 15 Clasificación de los compuestos químicos presentes en al menos el 60% de las fragancias. 51

Tabla 16 Eliminación datos atípicos composición fragancias..... 52

Tabla 17 Compuestos olfativamente activos en fragancias de la familia FLORAL detectados por GC-O 55

Tabla 19 Relación entre las notas olfativas determinadas en el perfil sensorial, el resultado PCA y los compuestos olfativamente activos detectados por GC-O..... 58

Tabla D 1 Resultados sensoriales de la fragancia A..... 81

Tabla D 2 Resultados sensoriales de la fragancia C..... 82

Tabla D 3 Resultados sensoriales de la fragancia D..... 83

Tabla D 4 Resultados sensoriales de la fragancia E..... 84

Tabla D 5 Resultados sensoriales de la fragancia F..... 85

Tabla D 6 Resultados sensoriales de la fragancia G 87

Tabla D 7 Resultados sensoriales de la fragancia H..... 88

Tabla D 8 Resultados sensoriales de la fragancia I 89

Tabla D 9 Resultados sensoriales de la fragancia J 90

Tabla G 1 Matriz de correlación construida a partir de los resultados sensoriales y los instrumentales 96

LISTA DE SIMBOLOS Y ABREVIATURAS

Abreviatura	Término
ANOVA	Análisis de varianzas
GC-MS	Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas
GC-O	Cromatografía de Gases - Olfatometria
PCA	Análisis de Componentes Principales
PSL	Análisis Parcial de Mínimos Cuadrados
HPLC-MS	Cromatografía líquida de alta eficiencia acoplada a espectrometría de masas
GTC	Guía Técnica Colombiana
NTC	Norma Técnica Colombiana
Q1	Cuartil 1
Q3	Cuartil 3
RIC	Rango Intercuartílico
IR	Índice de Retención
EM	Espectro de Masas
VOCs	Compuestos Orgánico Volátiles

INTRODUCCIÓN

En la industria cosmética y de alimentos, el análisis sensorial es crucial para la toma de decisiones. Sin embargo, dada su complejidad presenta un alto costo económico y un alto consumo de tiempo para las empresas. Por lo que este análisis es el paso lento en las etapas de formulación de fragancias, y de control de calidad. El análisis sensorial consiste en la descripción de los atributos de un producto de acuerdo con la percepción evocada por un panel sensorial. Este panel está constituido por un grupo de personas que puede estar entrenado o no de acuerdo con el tipo de estudio a realizar. Esto se lleva a cabo por medio del uso de los sentidos, en una escala y condiciones determinadas. Por ejemplo, describir el sabor de un alimento, o describir el olor de un perfume o de un cosmético.

Por otro lado, el análisis instrumental realizado por Cromatografía de Gases acoplado a Espectrometría de Masas (GC-MS) permite identificar y cuantificar de manera eficiente los componentes volátiles presentes en una fragancia (Siran Liu, 2019). La Cromatografía de Gases es un método de separación de componentes, que acoplado a un detector selectivo de masas (MSD), permite la identificación mediante la comparación de criterios cromatógraficos (índice de retención) y espectrales (espectro de masas) característicos para cada molécula, así como la cuantificación relativa y absoluta (Maria Guć, 2021).

Con el desarrollo de técnicas instrumentales, que permiten la obtención cada vez más refinada y con un número infinito de datos, ha crecido la necesidad de adaptar el uso de herramientas estadísticas, que permitan organizar y correlacionar esta infinidad de datos provenientes de múltiples variables para lograr optimizar el uso de tal magnitud de información.

Así surgen el uso de Análisis de Componentes Principales (PCA) y de análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales (PLS-DA). Estos análisis permiten obtener información valiosa a partir de *big data* (GC-MS) y facilitan el reconocimiento de patrones utilizando estadística multivariada. El Análisis de Componentes Principales (PCA), es una metodología no supervisada de reconocimiento de patrones que explora el conjunto de datos y revela grupos. El análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales (PLS-DA) se emplea como una herramienta de clasificación para confirmar los resultados del PCA. Esta es una técnica supervisada de reconocimiento de patrones que proporciona una mejor separación y ayuda a seleccionar las variables más diferenciadoras (Efenberger-Szmechtyk M, 2018).

En general, el uso de correlaciones estadísticas entre variables sensoriales e instrumentales en la industria de alimentos es muy común, pero ha sido poco empleado en el sector cosmético y de

fragancias. En este proyecto se pretende abordar el uso de posibles correlaciones estadísticas entre datos obtenidos del análisis sensorial y datos provenientes de análisis instrumental de fragancias comerciales. Se espera que estas correlaciones permitan obtener una herramienta quimiométrica para obviar o reducir el uso del panel sensorial, en algún momento del control de calidad y/o desarrollo de fragancias.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Obtener una herramienta estadística que permitiese la correlación de datos provenientes del análisis sensorial con información obtenida del análisis instrumental para la clasificación de fragancias de la familia FLORAL.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Construir los perfiles sensoriales de diez (10) fragancias comerciales de la familia floral, mediante el diseño y entrenamiento de un panel de análisis sensorial olfativo.
- Identificar los compuestos orgánicos volátiles presentes en cada una de las diez (10) fragancias comerciales de la familia floral por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS).
- Usar herramientas estadísticas para correlacionar los datos instrumentales con los resultados del análisis sensorial para la obtención de un modelo quimiométrico que permitiese clasificar sensorialmente las fragancias según su composición en compuestos volátiles.

1. MARCO TEÓRICO

En el desarrollo y control de calidad de fragancias se emplean técnicas de análisis que suelen tener dos tipos de componentes: i) El componente sensorial, en donde se revisan características observadas por medio de los sentidos como color y/o apariencia, textura y olor y aroma y ii) el componente analítico que corresponde a la medición de parámetros físico químicos como la densidad, el índice de refracción y su composición en compuestos orgánicos volátiles (VOCs).

Análisis sensorial:

El análisis sensorial es una ciencia relacionada con el estudio y evaluación de los atributos de un producto realizado por personas a través de los órganos de los sentidos (gusto, olor, tacto, audición y vista). Al grupo de evaluadores seleccionados para participar en este tipo de pruebas se les llama panel sensorial (ICONTEC, Análisis Sensorial. Vocabulario, 2012). En estos análisis, muchas veces el

problema requiere de discusión antes de seleccionar el ensayo más adecuado, por lo cual es muy importante la selección de la prueba a realizar.

Para esto, es necesario conocer muy bien el objetivo del estudio, factores asociados al producto, selección, cantidad y entrenamiento de evaluadores, ambiente de la prueba, precisión analítica, tipo de prueba, tipo de escala a evaluar, tipo de medición, presentación de la prueba, cantidad de sesiones, selección de descriptores, formatos de prueba entre otros. La metodología para establecer todos estos factores, se basa en la normatividad vigente establecida en Colombia bajo las Normas Técnicas Colombianas GTC 165 Análisis sensorial, metodología, guía general (ICONTEC, Análisis Sensorial. Metodología. Guía General , 2014), GTC 232 guía general para el establecimiento de un perfil sensorial (ICONTEC, Análisis sensorial, metodología, guía general para el establecimiento de un perfil sensorial, 2020), GTC 280 directrices para la selección, entrenamiento y seguimiento de evaluadores sensoriales seleccionados y expertos (ICONTEC, Análisis Sensorial. Directrices Para La Selección, Entrenamiento Y Seguimiento De Evaluadores Sensoriales Seleccionados Y Expertos, 2017), GTC 258 directrices para monitorear el desempeño de un panel sensorial cuantitativo (ICONTEC, Análisis sensorial. Metodología. Directrices para monitorear el desempeño de un panel sensorial cuantitativo, 2015) y la NTC 5328 directrices para el uso de escalas de respuesta cuantitativa (ICONTEC, Análisis Sensorial. Directrices Para El Uso De Escalas De Respuesta Cuantitativas, 2004). Para lo cual, se establecen diferentes etapas como: selección del tipo de pruebas (discriminativas, con escalas o categorías o descriptivas); selección y entrenamiento de evaluadores tanto en descriptores (vocabulario común) como en la intensidad del estímulo y el uso de escalas (númericas, dinámicas o gráficas).

Análisis instrumental:

En los análisis instrumentales, estas medidas se pueden evaluar un corto periodo de tiempo con una cantidad mínima de sustancia (1 g ó 1 mL como máximo) y por una misma persona. Para el caso del análisis de fragancias se determina experimentalmente el color y el índice de refracción que dan información acerca de la pureza y densidad, los cuales denotan la identificación básica de una fragancia. Estos análisis se utilizan comúnmente en el área de control de calidad con el fin de verificar la conformidad de las fragancias en la producción lote a lote. Además, al ser las fragancias mezclas de diferentes compuestos químicos, el color, índice de refracción y densidad son métodos sencillos que ayudan a corroborar su identidad.

Para el estudio del aroma, se requiere el análisis de compuestos orgánicos volátiles (VOCs) mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS). La cromatografía de gases es uno de los métodos analíticos más eficientes para la separación y cuantificación que se han desarrollado en la industria cosmética para apoyar el cumplimiento de requerimientos legales en la industria (Karunasekara, 2012). Este análisis permite obtener información cualitativa (que compuestos conforman la mezcla) y cuantitativa (cuanto de cada componente hace parte de la mezcla) con un alto grado de exactitud y precisión.

Con los resultados de estos análisis, el control de calidad establece la conformidad lote a lote, las especificaciones y calidad de los productos y de las materias primas. Además, también establece periodos de vigencia y anaquel.

Análisis de estadístico:

Con el desarrollo de técnicas instrumentales cada vez más sensibles, se ha requerido el uso de herramientas estadísticas para la organización, administración y aprovechamiento de infinidad de datos. En este apartado, se presentan algunas consideraciones estadísticas para el manejo de la información instrumental y sensorial.

Eliminación de datos atípicos (Diagrama de caja): el diagrama de caja o box-plot creado por John Tukey en 1977 es una herramienta para identificar datos atípicos o outliers de una serie de datos. En estos se identifican seis elementos: mediana, límite inferior, límite superior, primer cuartil, tercer cuartil y el rango intercuartílico (RIC). Este gráfico está representado por una caja la cual está delimitada por los cuartiles primero y tercero y en el centro por la mediana ubicada en el plano cartesiano de una serie de datos ordenados. También se introduce otra variable a este gráfico la cual es llamado “bigotes” los cuales son los extremos que corresponden a los límites superior e inferior.

Una vez se construye el diagrama, todos los valores que estén por fuera de los “bigotes” corresponden a datos atípicos, los cuales son descartados para los demás tratamientos estadísticos (Minnaard, 2021).

ANOVA: es un modelo estadístico con el cual se quiere verificar si existe una diferencia significativa entre las medias de diferentes grupos o poblaciones, para esto, se parten de dos hipótesis. La hipótesis nula (H_0) en la cual se indica que no hay diferencia entre las medias y la hipótesis alternativa (H_1) en la

cual al menos un par de medias son significativamente distintas entre ellas. Para encontrar esta diferencia de medias, ANOVA descompone la varianza total entre una varianza debida a los tratamientos y una varianza residual (Spiegel, 2007).

La varianza total se calcula como el cociente entre la suma de los cuadrados de las desviaciones de cada dato con respecto al promedio general y los grados de libertad. La varianza debida a los tratamientos se calcula como el cociente entre la suma de los cuadrados de las desviaciones de la media de cada grupo de datos con respecto al promedio general y el número de grupo de datos menos uno. La varianza residual se calcula como el cociente entre la suma de los cuadrados de las desviaciones de cada dato con respecto al promedio general de su grupo de datos y los grados de libertad menos el número de grupo de datos menos uno. Una vez con estos valores, se calcula el valor de F de probabilidad al cociente entre la varianza debida a los tratamientos y la varianza residual.

Para un determinado error o probabilidad (alfa), según los grados de libertad (n-2), se encuentra en las tablas de Fisher el valor correspondiente y se compara con el valor calculado para el estudio. Si el valor de F de tabla es mayor al F calculado, se acepta la hipótesis nula, la cual indica que no existe una diferencia significativa entre las medias de los grupos de datos. Mientras que si el valor de F de tabla es menor que el F calculado, se acepta la hipótesis alternativa en la cual hay diferencia significativa entre las medias de los grupos (Spiegel, 2007).

Regresión lineal (mínimos cuadrados): es un método numérico en el cual, dado un conjunto de datos, se requiere encontrar una función lineal continua que minimice la distancia entre cada dato. Este tipo de análisis se realiza con el fin de mejorar la predicción el comportamiento de un conjunto de datos (Lewis-Beck, 2003). La expresión matemática se basa en la ecuación de la recta ($y=mx+b$) en donde “m” es la pendiente y “b” es el punto de corte con el eje “y”.

Análisis de componentes principales: El método de componentes principales se utiliza como solución a problemas en donde se tienen “n” número de variables y “k” datos, en los cuales se requiere minimizar la dimensionalidad sin eliminar datos relevantes o con pérdida de mínima información. Este método analiza los “k” datos de las “n” variables con el fin de representar adecuadamente la información en dos variables (para la mayoría de los casos). Donde poder identificar las variables más importantes para todos los datos, adicionalmente, este método permite correlacionar y transformar variables

originales en otras modificadas para mejorar la interpretación de los datos.

En un ejemplo, donde se tengan las “n” variables y los “k” datos, se tendrá una matriz de k x n, donde las columnas contienen las variables y las filas contienen los datos. Luego de esto restando a cada dato el valor de su media, se indica que el valor de la media de estos nuevos datos es cero y su matriz de covarianzas será de 1/k X´X. Para encontrar este espacio de dimensión reducido se considera el conjunto de datos en primera instancia una recta que pase por todos los puntos en el plano cartesiano, con la condición que esta recta minimice la proyección de los puntos sobre ésta. En consecuencia, cada punto tendrá una proyección o vector desde su ubicación hasta la recta dibujada. Con lo que minimizar esta proyección es equivalente a maximizar la suma de los cuadrados de los valores de las proyecciones, lo que equivale a maximizar su varianza. Así pues, bajo este criterio se construye la primera componente (Lindsay, 2002).

Cálculo de los componentes: para calcular el primer componente, este se define como una combinación lineal de los datos originales con máxima varianza, los cuales se representan por un vector “z” dado por:

$$Z_1 = X_{a1} \qquad \text{(Ecuación 1)}$$

como los datos tienen media cero, el vector Z también tendrá media nula, por lo cual su varianza será:

$$\frac{1}{n} Z'_1 Z_1 = \frac{1}{n} a1' X' X_{a1} = a1' S_{a1} \qquad \text{(Ecuación 2)}$$

Donde S es la matriz de varianzas y covarianzas, y se puede maximizar esta varianza aumentando el vector a1 con la restricción que a1’a1=1, introduciendo esto como un multiplicador de Lagrange:

$$M = a1' S_{a1} - \lambda(a1' a1 - 1) \qquad \text{(Ecuación 3)}$$

derivando con respecto a a1e igualando a cero:

$$S_{a1} = \lambda a1 \qquad \text{(Ecuación 4)}$$

Lo que implica que a1 es un vector propio de la matriz S y λsu correspondiente valor propio, concluyendo que λ es la varianza de Z1 (Diazaraque, 2021).

Correlación de variables sensoriales y variables instrumentales:

En alimentos, correlacionar la información de variables sensoriales con resultados del análisis instrumental ha contribuido a la identificación de los compuestos responsables de las sensaciones de aroma y sabor (*flavor*) (Mina K. Kim Y.-Y. L.-g., 2018) (Amanda Maldo Paula, 2014) (N. Lassoued, 2008) (Margaret A. Cliff, 2018) y textura y firmeza en distintos alimentos (Pamela Andreani, 2019).

El aroma es una de las percepciones sensoriales más difíciles de evaluar, por cuanto existe mucha variabilidad (sesgo, interpretación, vocabulario, intensidad) entre los miembros de un panel. Estas dificultades requieren arduas y prolongadas jornadas de capacitación y entrenamiento, que no son del todo exitosas.

A continuación, se presentan algunos resultados de la correlación de datos del análisis instrumental de compuestos orgánicos volátiles y resultados del análisis sensorial olfativo por panelistas expertos para diferentes alimentos.

Análisis de Componentes Principales (PCA)

El Análisis de Componentes Principales (PCA), es una metodología no supervisada de reconocimiento de patrones que explora el conjunto de datos y revela grupos. En la mayoría de estos trabajos, el PCA se realiza con el fin de determinar el espacio cartesiano en donde se ubican tanto los compuestos volátiles identificados como las descripciones sensoriales de aroma. Es una de las metodologías de correlación de datos multivariados más empelada en análisis sensorial olfativo.

Mina K. et. al. (Mina K. Kim H. W.-G., 2017) logran correlacionar los resultados del análisis instrumental (GC-MS) y sensorial (perfiles sensoriales) de jugos comerciales de naranja a través de Análisis de Componentes Principales (PCA) para identificar los compuestos volátiles responsables del *flavor.* En este estudio, los investigadores lograron determinar los compuestos volátiles responsables de las características sensoriales estudiadas. Es decir, se logró asociar compuestos químicos identificados por GC-MS con notas sensoriales evaluadas por un panel entrenado.

Otra aplicación de este tipo de trabajos se enfoca en la identificación de similitudes en términos sensoriales para un mismo alimento preparado por diferentes técnicas, como lo planteó Mina K. et. al. (Mina K. Kim Y.-Y. L.-g., 2018). En este estudio un panel sensorial entrenado prestableció los perfiles sensoriales de la omija y sus resultados se correlacionaron con compuestos identificados por GC-MS. Este análisis permitió representar gráficamente similitudes y diferencias entre tres tipos de muestras

de este fruto y su correlación con los compuestos volátiles identificados. Uno de los hallazgos más relevantes fue la identificación de 28 compuestos como responsables de la actividad sensorial. También encontraron, que dos de las tres muestras de omija tienen características sensoriales similares.

Si bien, en estos dos trabajos se empleó PCA para correlacionar las variables sensoriales con las variables instrumentales, en el estudio de la fruta de la omija las muestras evaluadas fueron tomadas como variables, mientras que en el estudio de los jugos comerciales de naranja, las notas sensoriales y los componentes volátiles fueron los empleados como variables. Por lo tanto, los resultados del PCA dependen del tipo de variables utilizadas y de cómo se distribuyen entre las columnas y las filas de la matriz de correlación.

Margareth Santander et. al. aplicaron la correlación entre análisis sensorial y análisis instrumental para evaluar los cambios en los precursores de aroma de cacao durante su fermentación usando diferentes tratamientos (Margareth Santander, 2021). En este trabajo se observa el uso de un panel sensorial entrenado para describir las notas del chocolate obtenido de cacao proveniente de cuatro diferentes tratamientos de fermentación para dos variedades de cacao cultivados en Colombia. Los precursores de aroma fueron identificados por cromatografía líquida de alta eficiencia acoplada a espectrometría de masas (HPLC-MS). La correlación entre las variables sensoriales mediante PCA, permitió observar una clasificación del chocolate obtenido de acuerdo con atributos sensoriales según la variedad y el tratamiento de fermentación.

Mediante el análisis descriptivo realizado por panelistas entrenados, es posible caracterizar sensorialmente las variedades de una misma fruta (Diana Martín Rojas, 2018). Diana Martín Rojas et. al. identificaron compuestos volátiles de cada variedad de curuba por medio de GC-MS. Ellos concluyeron que la aplicación del PCA permitió clasificar por diferencias en la composición del aroma y su relación con las notas sensoriales responsables del aroma característico de cada variedad.

Castro Vázquez et. al. y de igual manera Oktay Yildiz et. al. utilizaron análisis descriptivo y GC-MS para la caracterización y correlación de diferentes tipos de miel monofloral y multifloral. En ambos estudios utilizaron PCA como herramienta de correlación, pero adicionalmente en el estudio de Castro-Vázquez et. al. (L. Castro-Vázquez, 2009) se utilizó análisis de grupos con el fin de poder identificar compuestos volátiles para diferencias mieles monofloral de las multiflorales. En el caso de Yildiz et. al. (Yildiz, 2022), este solo utilizó PCA como herramienta de correlación, con la cual pudo agrupar las

diferentes muestras de miel de acuerdo con el origen de estas. Se resalta en ambos estudios la cantidad de datos utilizados para la correlación, por ejemplo, L. Castro-Vázquez et. al. usó 49 muestras de miel (L. Castro-Vázquez, 2009) y Yildiz et. al usó 24 (Yildiz, 2022).

Análisis Parcial de Mínimos Cuadrados (PLS):

Otras herramientas de correlación de variables sensoriales con variables instrumentales son los mapas de calor y el análisis parcial de mínimos cuadrados. Estas herramientas estadísticas, muestran gráficamente los componentes volátiles en función de diferentes tipos de productos. Jinda Zhuang (Jinda Zhuang, 2020) utilizó mapas de calor y análisis parcial de mínimos cuadrados para identificar los compuestos volátiles predominantes en diferentes variedades de hongos. Como resultado, identificó las notas sensoriales que se correlacionan con los compuestos detectados y cuantificados por análisis instrumental. Cabe resaltar qué, para aplicar el análisis descriptivo cuantitativo y construir los perfiles sensoriales de todas las muestras, necesitaron de un panel entrenado.

Por ejemplo, Vilanova et. al. caracterizaron las propiedades sensoriales de la vid cultivada al noroeste de España acoplando análisis sensorial descriptivo con análisis instrumental usando GC-MS. Este análisis permitió a los autores determinar la composición volátil de cinco tipos de vinos que correlacionaron con variables instrumentales y sensoriales, mediante el uso de la regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) como herramienta de correlación utilizando XLstat-Pro como software (M. Vilanova, 2012).

En general, el uso de correlaciones estadísticas entre el análisis sensorial olfativo y el instrumental es una herramienta para clasificar un producto según su composición química y hacer una aproximación a su percepción sensorial. Esta aproximación se puede utilizar para el desarrollo de nuevos productos (Amanda Maldo Paula, 2014), (Mina K. Kim Y.-Y. L.-g., 2018), identificar cambios en cualidades olfativas (Purba Chakraborty, 2021) (Margareth Santander, 2021), e identificar diferentes variedades de una misma fruta (Diana Martín Rojas, 2018) (Jinda Zhuang, 2020) (Kim, 2017), reduciendo el uso de paneles sensoriales entrenados.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1 Selección de panelistas para el análisis sensorial

La selección del panel sensorial consistió en tres pruebas: i) La prueba de detección de estímulo, ii) la prueba de discriminación entre niveles de intensidad, y iii) la prueba capacidad descriptiva de olores. Después de la selección de los panelistas, se llevó a cabo una descripción sensorial de la fragancia,

cuyos procedimientos se describen a continuación.

Descripción sensorial de la Fragancia: Este análisis sensorial de tipo descriptivo fue realizado siguiendo los lineamientos de la GTC 232 (ICONTEC, 2020), 165 (ICONTEC, 2014), 280 (ICONTEC, 2017), 258 (ICONTEC, 2015) , NTC 3930 (ICONTEC, 2015), NTC 3501 (ICONTEC, 2012), NTC 2681 (ICONTEC, 2006) y la NTC 5328 (ICONTEC, 2004) del ICONTEC, en donde las fragancias evaluadas fueron analizadas por un panel entrenado interno de 13 personas de la empresa SYMRISE LTDA.

A continuación, se describen las pruebas realizadas a los panelistas:

2.1.1 Prueba para la detección de un estímulo: a los candidatos se les presentó dos muestras del material de prueba y una muestra neutra (propilenglicol). Después los candidatos debían identificar las sustancias del material de prueba usando cintillas de olor. En la tabla 1 se indican las sustancias y sus concentraciones.

Tabla 1 Materias primas evaluadas por detección de estímulo

Material	Concentración
Acetato de isoamilo	80 mg/L
Cis-3-Hexenol	50 mg/L
Guaiacol	30 mg/L
Aceite esencial de Lima	60 mg/L
Aceite esencial de albahaca	500 mg/L
1,3-Octenol	15 mg/L

En esta primera prueba, los candidatos debían responder de forma acertada al menos cinco de las seis preguntas para aprobar la evaluación. El aspirante obtenía una calificación de dos unidades (2) si detectaba la sustancia con el estímulo y cero unidades (0) si no lo lograba. El puntaje mínimo para aprobar esta prueba fue de diez (10) unidades. En la tabla 2 se indican las muestras con sus respectivos códigos.

Tabla 2 Muestras codificadas para prueba detección estímulo

Set	Muestra 1		Muestra 2	
	Código	Vehículo	Código	Vehículo
1	123	Propilenglicol	476	Acetato de isoamilo
2	654	Aceite esencial de lima	240	Propilenglicol
3	716	Propilenglicol	927	Guaiacol
4	906	Propilenglicol	825	Aceite esencial de albahaca
5	298	1-Octen-3-ol	543	Propilenglicol
6	682	*cis*-3-Hexenol	983	Propilenglicol

2.1.2 Prueba de discriminación entre niveles de intensidad: Esta es una prueba de ordenamiento, donde a los candidatos se les presentaron cuatro muestras con diferentes concentraciones en orden aleatorio. Los panelistas tenían que ordenarlas de manera ascendente, según la intensidad. Se otorgó

una calificación de una unidad (1) a cada disolución correctamente ordenada. La tabla 3 muestra la sustancia usada y su concentración:

Tabla 3 Muestra control prueba de discriminación entre niveles de intensidad

Olor	Sustancia química	ORDENAMIENTO				
FLORAL	Geraniol	Dosis (mg/L)	5	10	20	40
		Códigos	669	971	543	380

Nota: Los candidatos que invirtieran el orden de más de un par adyacente de muestras, se consideraron no aptos para el estudio.

2.1.3 Capacidad descriptiva de olores: se presentaron a los candidatos 9 estímulos olfativos, las cuales fueron aplicadas en cintillas de olor y el candidato seleccionó la nota más relevante según su percepción, y de acuerdo con su descripción se otorgó la siguiente calificación:

- 3 puntos para una identificación o descripción correcta
- 2 puntos para una buena identificación en términos generales
- 1 punto para descripción relacionada
- 0 puntos para ausencia de respuesta

En la tabla 4 se muestran los materiales olfativos para la prueba con su respectivo código.

Tabla 4 Muestras codificadas prueba capacidad descriptiva de olores

Código	Compuesto	Descripción olfativa
617	Melonal	Verde melón
311	*cis*-3-hexenol	Verde pasto / hoja
545	1-Octen-3-ol	Champiñon
491	3- Metiltiopropanal	Papa cocida
361	Furaneol	Caramelo
921	Laurato de etilo	Jabonoso
186	Ácido butírico	Queso
372	Guaiacol	Fenólico
592	Isomentona	Menta

Nota: Los candidatos que alcanzaron al menos el 50% del puntaje máximo (27puntos), fueron seleccionados como panelistas en el estudio.

2.2 Selección de fragancias y reactivos

Para este trabajo se escogieron 10 fragancias de la familia FLORAL del portafolio vendido por SYMRISE LTDA a la industria cosmética. Las fragancias fueron escogidas por ser productos con más de dos años de vigencia en el mercado sin problemas de estabilidad. Las fragancias se conservaron a temperatura ambiente, en ausencia de luz y en un lugar ventilado. Los reactivos empleados como patrones de referencia para la evaluación sensorial fueron preparados un mes antes del análisis.

Los reactivos utilizados son de grado analítico de acuerdo con las especificaciones de los proveedores.

Tabla 5 Materias primas para el análisis sensorial.

Reactivo	Pureza (%)	Proveedor
Acetato de isoamilo	99,7	SYMRISE AG
Cis-3-Hexenol	98,9	SHANDONG NHU PHARMACEUTICAL CO
Guaiacol	99,8	SYMRISE AG
Aceite esencial de Lima	98,5	UNGERER & COMPANY
Aceite esencial de albahaca	99,66	SYMRISE AG
1,3-Octenol	99,8	SYMRISE AG
Melonal	86,7	SYMRISE AG
3- Metil tiopropanal	99,6	TREATT
Furaneol	99,8	BESTALLY
Laurato de etilo	99,1	SYMRISE AG
Ácido butírico	-	SYMRISE AG
Isomentona	99,05	SYMRISE AG

Las muestras de fragancia utilizadas en cromatografía de gases fueron diluidas con acetona con un factor de dilución 1:100 y con agitación manual hasta observar homogeneidad.

Con la ayuda del experto sensorial, se seleccionaron 10 fragancias para estudio, las cuales pertenecen a la familia FLORAL. Otro criterio para su selección fue el que estuviese actualmente vigentes en el mercado y no presentasen problemas de estabilidad. En la tabla 6 se muestran las fragancias seleccionadas con sus respectivos códigos aleatorios. Estas fragancias fueron evaluadas con códigos aleatorios por triplicado y en sesiones diferentes:

Tabla 6 Fragancias seleccionadas para estudio.

Fragancia Nombre	Códigos aleatorios		
Fragancia A	399	438	140
Fragancia B	819	951	111
Fragancia C	416	177	657
Fragancia D	387	669	958
Fragancia E	642	970	984
Fragancia F	409	232	398
Fragancia G	412	849	704
Fragancia H	516	600	312
Fragancia I	159	949	773
Fragancia J	203	814	926

2.3 Evaluación de las fragancias

Una vez seleccionados los panelistas, estos fueron entrenados por 10 horas sobre los atributos y rangos de intensidad usando soluciones patrón. Se estableció el vocabulario para cada nota olfativa que presenta la fragancia con el fin de fijar atributos sensoriales importantes en la caracterización y lograr diferenciarlos.

A los panelistas se les presentó muestras puras de las fragancias de forma monádica (en sucesión una por una) aplicadas en cintillas de evaluación. Se evaluaron los atributos de cada muestra, hasta un máximo de seis muestras por sesión. Cada fragancia estuvo codificada con números aleatorios de tres dígitos y las repeticiones de las muestras se realizaron en diferentes sesiones. Las cintillas fueron aplicadas al momento de la evaluación sensorial a temperatura ambiente (20°C), hasta una misma altura marcada sobre la cintilla

El perfil sensorial de la fragancia se creó por cada panelista por triplicado en una escala continua y unipolar como se indica en la siguiente imagen:

Figura 1 Tipo de escala unipolar y continua para la evaluación sensorial de las fragancias utilizada por los panelistas

Nota: Adaptado de análisis sensorial. Directrices para el uso de escalas de respuesta cuantitativas, Norma técnica Colombiana NTC 5328, 2004.

Selección de notas sensoriales: el principio basado en la GTC 232, fue “uso de terminología existente y patrones de referencia”, cuyo método consistió en consultar con un experto (evaluador sensorial de SYMRISE LTDA) para seleccionar las notas sensoriales y los patrones de referencia de las fragancias, con un total de 9 notas. Así mismo, se analizaron las notas seleccionadas con el fin de determinar el orden en el cual estos fueron evaluados por los panelistas (las notas al final de la tabla fueron las últimas de la evaluación).

Adicionalmente, el panel fue reentrenado durante 4 semanas en el lenguaje y vocabulario para describir los atributos de olor y las escalas de intensidad mediante la olfacción de disoluciones de sustancias de referencia. Estos patrones fueron seleccionados por el evaluador experto en análisis sensorial de fragancias, con el fin de establecer el vocabulario para cada nota olfativa que presenta la fragancia. Así se logró establecer los atributos sensoriales más importantes en la caracterización de las fragancias y su diferenciación.

En la tabla 7 se presentan las notas sensoriales, su descripción y los compuestos asociados con estas percepciones.

Tabla 7 Notas sensoriales seleccionadas en el estudio

Notas sensoriales	**Patrones**	
	Descripción olfativa	**Compuesto**
FLORAL	Olor característico a rosas con matices metálicos	*cis*-oxido de rosa
FRUTAL	Nota dulce y frutal de manzana verde acuosa	2-metilpentanoato de etilo (manzanato)
ALDEHÍDICA	Nota grasosa limpia y jabonosa	Undecanal
VERDE	Pasto o vegetales recién cortados	2,4-dimetil-3-ciclohexenocarboxaldehido
CÍTRICA	Limón, lima jugosa	Aceite esencial de Bergamota
FOUGERE*	Nota predominante lavanda con musgo y maderas cálidas	Aceite esencial de lavanda, dihidromircenol, aceite esencial de patchouli, galaxolida y cumarina
MUSKY	Olor animal, almizclado, como a cabra.	1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8,-hexametil-ciclopenta-benzopirano (galaxolide)
EDIBLE**	Notas dulces comestibles, transmiten cremosidad	(E)-2-etil-4-(2,2,3-trimetil-1-ciclopent-3-enil)but-2-en-1-ol y 4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído
MADERA	Madera suave y fresca	1-(2,3,8,8-tetrametil-1,3,4,5,6,7-hexahidronaftalen-2-il)etanona

Nota 1 *Acorde olfativo que evoca el olor de la naturaleza a través de la frescura de la bergamota y la lavanda junto con notas de musgo y la cremosidad de la cumarina. ** La nota EDIBLE se relaciona con notas comestibles, inspiradas principalmente en postres caracterizados por notas dulces cremosas como vainilla, caramelo, coco y chocolate.

Formatos de evaluación: se utilizaron formatos digitales para cada evaluación los cuales contenían instrucciones con respecto a la escala a utilizar. También contaba con una casilla donde los evaluadores podían indicar sus comentarios o sugerencias respecto a la prueba.

Tratamiento analítico de los cromatogramas: Se eliminaron los componentes de las fragancias que no aportaron un olor característico (antioxidantes, solventes, quelantes, etc.) y que no fueron comunes entre al menos seis de las referencias. Los picos identificados en los cromatogramas fueron cuantificados por medio del porcentaje de área.

En la figura 2 se muestra el diagrama resumen aplicado para la evaluación sensorial.

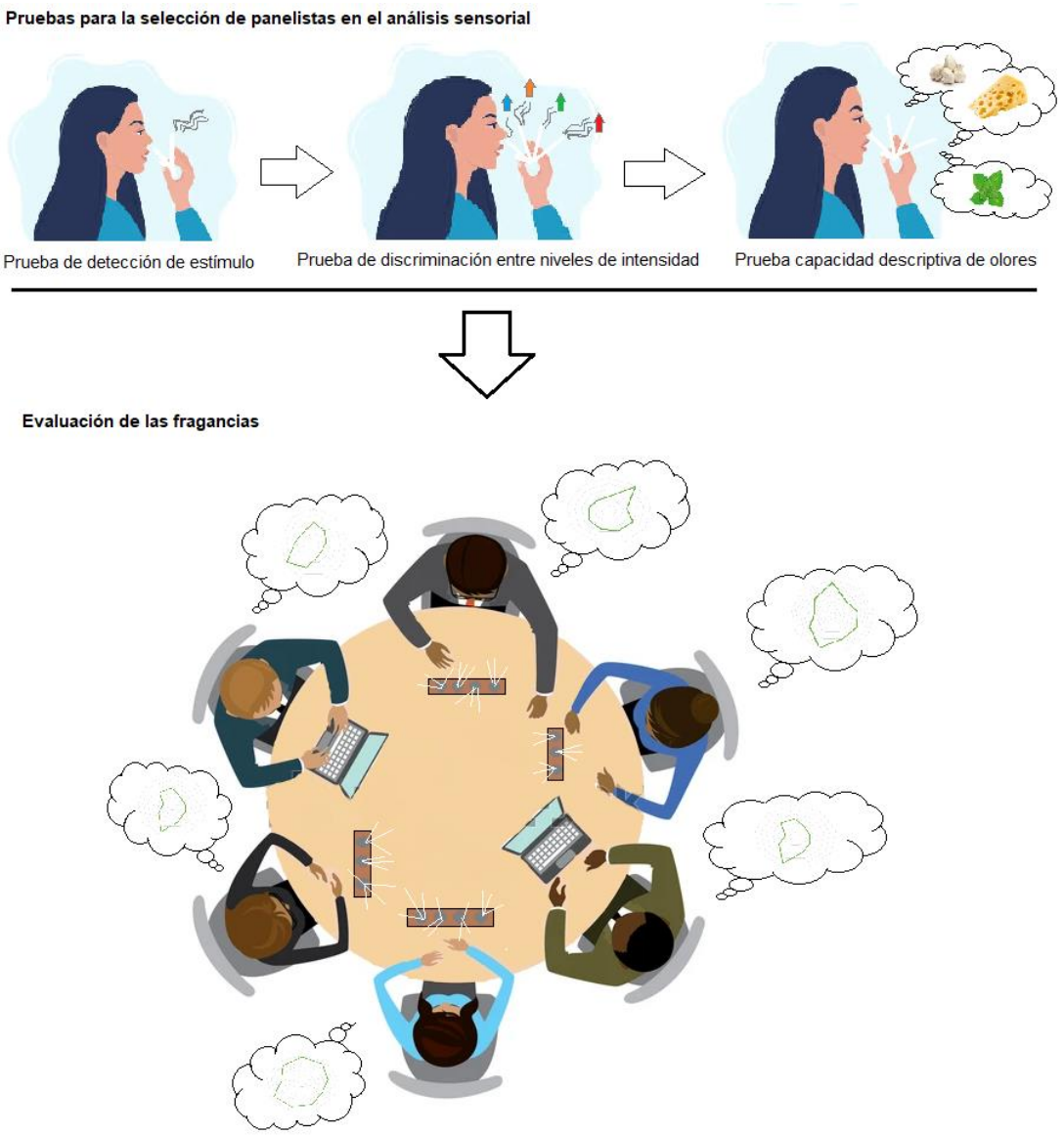

Figura 2 Diagrama resumen de la evaluación sensorial (hecho por el autor).

2.4 Análisis estadístico y multivariado

Los resultados de la evaluación de fragancias son presentados como promedios (todas las evaluaciones fueron hechas por triplicado de un solo lote). Es decir, no se realizó consenso después de la evaluación sensorial, sino que el perfil obtenido es una serie de promedios de los puntajes asignados a cada nota sensorial por cada evaluador. Además, se realizó un análisis para eliminar datos atípicos por box-plot, y se corroboró el comportamiento de los datos con una prueba de normalidad para algunas de las notas sensoriales al azar. También se calcularon los rangos de confianza con un análisis de varianza (ANOVA) con un alfa de 0,05 entre los experimentos para cada nota sensorial.

Para la predicción del perfil sensorial se utilizó como modelo estadístico el Análisis de Componentes Principales (PCA), el cual determina la relación entre las notas sensoriales y los análisis

instrumentales (GC-MS), realizado en Minitab® versión 17 del año 2013.

2.5 Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS)

El análisis de los compuestos volátiles de cada fragancia se realizó mediante GC-MS. Un microlitro de la fragancia diluida se inyectó en el puerto de inyección de dos cromatógrafos de gases Agilent Technologies 7890B acoplado a un detector selectivo de masas Agilent Technologies 5977A en modo split (1:30). Los cromatógrafos de gases se diferencian únicamente en la columna usada. Estos están equipados con una columna Phenomenex ZB-1ms (20m x 0,18 mm, df= 0,18 mm) y HP-5ms AGILENT (30m x 0,25mm, df=0,25mm) usando helio como gas de arrastre a 0,8 mL/min. El programa de temperatura para el cromatógrafo con columna Phenomenex fue: temperatura inicial de 60°C y calentamiento a una velocidad de 8°C/min hasta 240°C. El programa de temperatura para el cromatógrafo con columna HP-5ms fue: temperatura inicial de 50°C y calentamiento a una velocidad de 6°C/min hasta 190°C y de 12°C/min hasta 280°C.El espectro de masas se obtuvo en modo *full scan* en un rango de masas entre 40-250 uma. Los compuestos volátiles fueron identificados por comparación del índice de retención y su espectro de masas contra sustancias de referencia, disponibles en la librería del equipo o en la librería interna desarrollada por SYMRISE LTDA.

2.6 Cromatografía de gases acoplada a Olfatometría (GC-O)

El análisis de los compuestos volátiles de cada fragancia se realizó mediante GC-MS. Un microlitro de la fragancia diluida se inyectó en un cromatógrafo de gases AGILENT 6820 GC en modo split (1:30). Las muestras de las fragancias fueron diluidas con acetona a un factor de dilución 1:100 y con agitación manual hasta observar homogeneidad. El cromatógrafo de gases está equipado con una columna HP-5ms AGILENT (30m x 0,25mm, df=0,25mm) con helio como gas de arrastre a 0,8 mL/min. El programa de temperatura para el cromatógrafo fue: temperatura inicial de 50°C y calentamiento a una velocidad de 6°C/min hasta 190°C y de 12°C/min hasta 280°C. Los compuestos volátiles fueron identificados por comparación del índice de retención del cromatógrafo Agilent Technologies 7890B acoplado a un detector selectivo de masas Agilent Technologies 5977A y comparados con los reportados en literatura.

Los índices de retención para los compuestos químicos detectados se calcularon con base en una mezcla de alcanos C6-C30 Sigma Aldrich referencia 49451-U Lote # LRAC0353.

Por otro lado, un juez sensorial experto clasificó los compuestos químicos identificados en las notas sensoriales en el estudio.

3 RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1 ANALISIS SENSORIAL

3.1.1 Pruebas de selección panelistas

Para el desarrollo de este trabajo, se convocaron a 13 aspirantes entrenados de la empresa SYMRISE LTDA, los cuales participaron en las pruebas sensoriales de detección de estímulo, de discriminación entre niveles de intensidad y de capacidad descriptiva.

Estas pruebas sensoriales tienen como objetivo verificar el conocimiento e idoneidad sensorial de los candidatos para la evaluación olfativa de las fragancias. Estas pruebas preliminares ayudan a verificar la capacidad de los candidatos de diferenciar y describir olores para la evaluación sensorial.

Prueba para la detección de un estímulo: En esta prueba los candidatos recibieron seis sets pareados de muestras del material de prueba y muestras neutras (propilenglicol), codificadas con números aleatorios de tres dígitos. En la tabla 8 se muestran los resultados de la calificación obtenida por los aspirantes. En esta primera prueba, todos los panelistas aprobaron.

Tabla 8 Resultados de la prueba detección estímulo

Panelista	Set 1	Set 2	Set 3	Set 4	Set 5	Set 6	Puntaje total
	476	654	927	825	298	682	
1	2	2	2	2	2	2	12
2	2	2	2	2	2	0	10
3	2	2	2	2	2	2	12
4	2	2	2	2	2	0	10
5	2	2	2	0	2	2	10
6	2	2	2	2	2	2	12
7	2	2	2	2	2	2	12
8	2	2	2	2	2	2	12
9	2	2	2	2	2	2	12
10	2	2	2	2	2	2	12
11	2	2	2	2	2	2	12
12	2	2	2	0	2	2	10
13	2	2	2	2	2	2	12

Prueba de discriminación entre niveles de intensidad: Para esta prueba, los candidatos ordenaron cuatro diluciones de la sustancia patrón de diferentes concentraciones, por intensidad de olor de forma ascendente. En esta prueba las diluciones fueron presentadas y codificadas de forma aleatoria. En la tabla 9 se muestran los resultados de la prueba.

Tabla 9 Resultados prueba ordenamiento

Panelista	1	2	3	4	Puntaje
1	971	669	543	380	2
2	971	669	543	380	2
3	669	971	543	380	4
4	971	669	543	380	2
5	669	971	543	380	4
6	971	669	543	380	2
7	971	669	543	380	2
8	669	971	543	380	4
9	669	971	380	543	2
10	971	669	543	380	2
11	971	669	543	380	2
12	669	543	971	380	2
13	669	971	543	380	4

Como criterio de aceptación los aspirantes debían obtener al menos dos puntos (2). En esta prueba, todos los aspirantes la superaron pues en ninguno de los casos los panelistas intercambiaron más de una vez los niveles de intensidad predefinidos.

Prueba de capacidad descriptiva de olores: En esta prueba se presentaron nueve cintillas de olor correspondientes a 9 estímulos olfativos diferentes (relacionados con las notas sensoriales de estudio) a los candidatos.

El puntaje mínimo para aprobar esta prueba es de 15 unidades. La tabla 10 presenta las respuestas de todos los aspirantes para cada caso:

Tabla 10 Resultados prueba capacidad descriptiva

Panelista	617	311	545	491	361	921	186	372	592	Puntaje Total
1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	17
2	2	2	2	2	1	2	2	2	2	17
3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	18
4	1	1	2	2	2	2	2	1	2	15
5	2	2	2	2	2	2	2	1	2	17
6	1	2	2	2	1	2	2	2	2	16
7	2	2	2	2	1	2	2	2	2	17
8	2	2	2	2	2	2	2	1	2	17
9	2	2	2	2	2	1	2	1	2	16
10	2	2	2	2	2	2	2	2	2	18
11	2	2	2	2	1	1	2	2	2	16
12	0	2	2	2	1	2	2	2	2	15
13	2	2	2	2	1	2	1	2	2	16

Los resultados de la tabla 10 indican que todos los candidatos aprobaron la prueba, pero en ninguno de los casos se presentó una descripción correcta (calificación de 3) para ninguna de las sustancias. Esto pudo deberse al diverso vocabulario que utilizan los panelistas para describir la misma nota sensorial, pero que, en términos generales, corresponde a la misma descripción. Se requiere reentrenamiento del panel para asegurar que el vocabulario sea igual en términos sensoriales para todos.

Una vez todos los aspirantes aprobaron las pruebas sensoriales preliminares, estos candidatos fueron seleccionados como los panelistas para realizar el análisis descriptivo de las fragancias.

3.1.2 Evaluación de las fragancias:

Para la evaluación sensorial de cada una de las fragancias, se utilizaron formatos de evaluación digital a través de la aplicación Survey monkey® (ver ANEXO A). En estos formatos se indicaron instrucciones a los panelistas sobre la metodología para evaluar y la escala a utilizar.

Se obtuvieron para las 9 notas olfativas reentrenadas y evaluadas por los 13 panelistas resultados crudos del análisis sensorial. En la tabla B1 y figura B1 del anexo B se muestra la fragancia B como ejemplo de los resultados para el análisis sensorial.

En primer lugar, se corroboró la normalidad de los datos ajustándolos a una función de distribución normal para cada una de las fragancias seleccionadas utilizando las notas sensoriales FLORAL y CÍTRICO. Estas dos notas se seleccionaron al azar, mientras que para la fragancia B, se aplicó la función de distribución normal para todas las notas sensoriales. A continuación, se muestra la gráfica correspondiente a la fragancia B de las notas sensoriales FLORAL y CÍTRICO; mientras que las demás gráficas se encuentran en el ANEXO C.

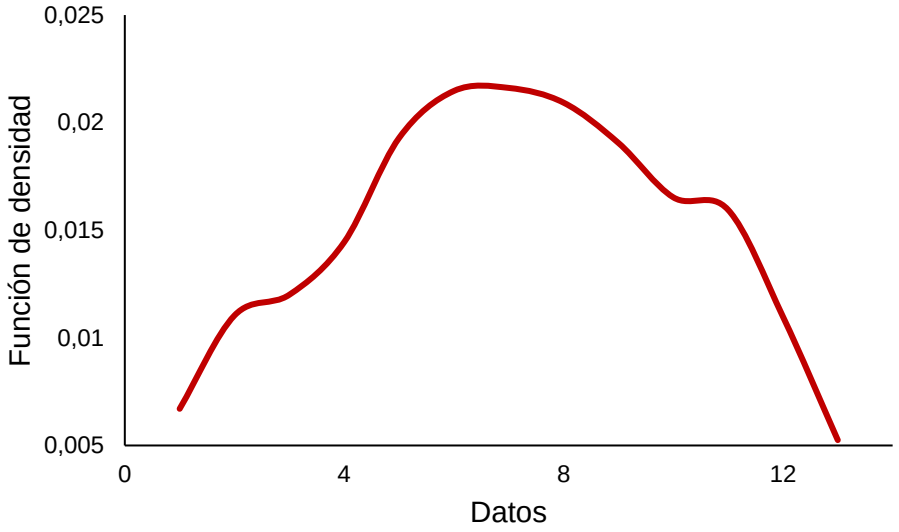

Figura 3 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial FLORAL.

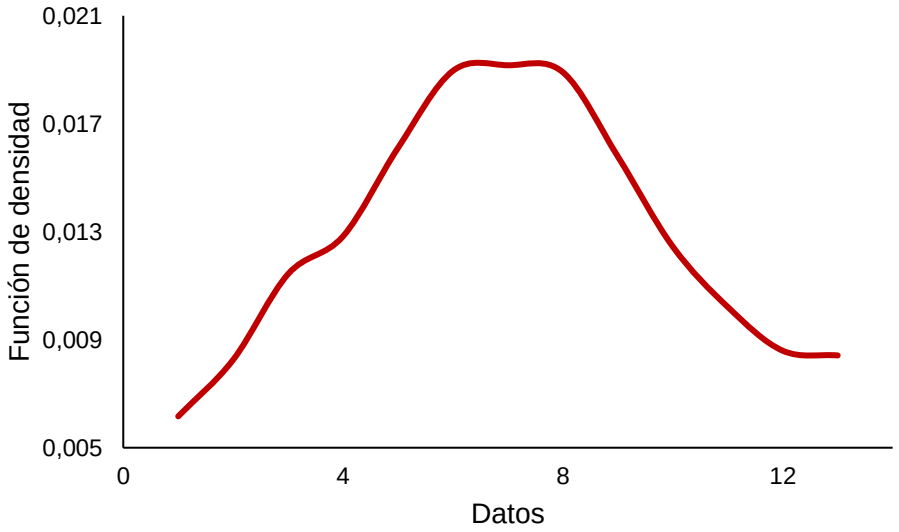

Figura 4 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial CÍTRICO.

Las gráficas de distribución normal presentan una función de densidad entre 0,005 y 0,020, obtenida para cada nota basado en los datos promedio de la evaluación sensorial. La función de densidad es una variable aleatoria que describe la probabilidad relativa de que un dato tome un valor determinado de probabilidad. Por lo cual, la probabilidad de que un dato tome cualquier valor en la escala sensorial está entre un 0,5% y un 2,5%. Esto nos indica que la distribución de los datos en la evaluación sensorial fue amplia y en general los datos no se encuentran agrupados. Esto debido a que la probabilidad es baja (entre 0,5% y 2,5%). De igual manera, estas graficas nos ayudan a corroborar si los datos de la evaluación sensorial se comportan como una distribución normal, es decir como una campana de Gauss. Estas graficas se obtuvieron usando la función de DISTR.NORM.N del programa

Excel en su versión 2018.

Las gráficas de distribución normal para las notas FLORAL y CÍTRICO de todas las fragancias evaluadas, se ajustaron al comportamiento de una campana de Gauss como se puede evidenciar en el anexo C. Este comportamiento de distribución normal de las notas sensoriales permitió la aplicación de pruebas paramétricas.

Para corroborar que los datos obtenidos de las evaluaciones sensoriales presentan una distribución normal, con una probabilidad estadística del 5% (p=0,05), se utilizó la prueba de Shapiro-Wilks. En esta prueba la hipótesis nula (los datos no provienen de una distribución normal) fue rechazada para todas las notas sensoriales analizadas en todas las fragancias de estudio. Es decir, los datos obtenidos de la evaluación sensorial se comportan como una distribución normal.

La figura 5 muestra los resultados de la prueba Shapiro-Wilks aplicada a todas las fragancias evaluadas. La fragancia B se tomó como referencia para la validación de la prueba Shapiro-Wilks de todas las notas sensoriales. Para las demás fragancias la prueba Shapiro-Wilks se corroboró usando únicamente las notas sensoriales MADERA y CÍTRICO. La nota MADERA sirvió para validar el comportamiento normal de las otras notas sensoriales, y así ampliar el espectro sensorial. Esto se realiza como complemento a las gráficas de distribución normal evaluadas para la nota sensorial FLORAL y CÍTRICO. La nota CÍTRICO se duplica para corroborar el comportamiento normal de los datos con otra herramienta estadística.

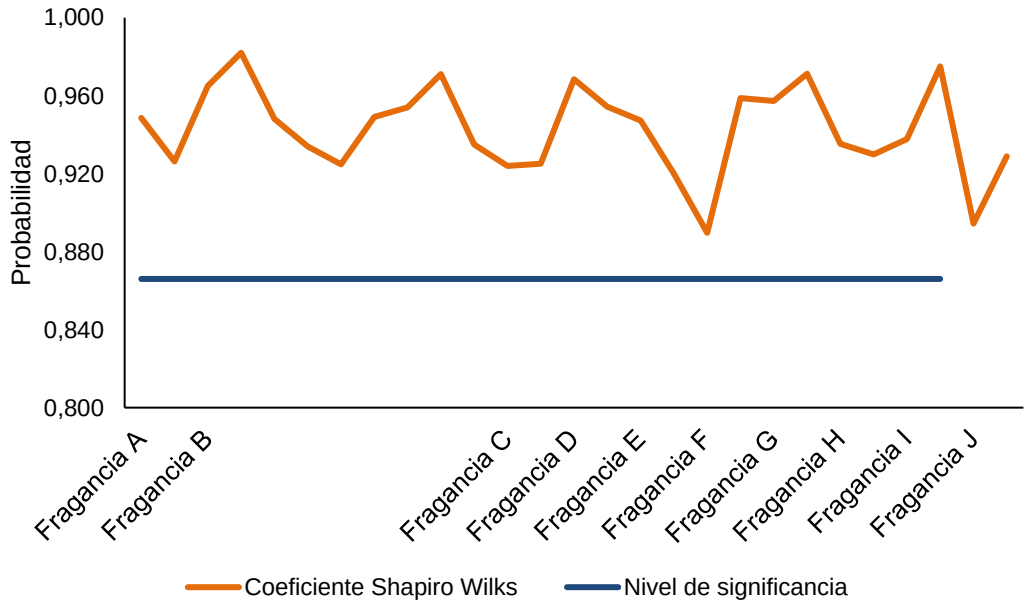

Figura 5 Resultados de la prueba de Shapiro-Wilks aplicada a los datos de evaluación olfativa de las notas MADERA y CÍTRICO de 10 fragancias florales.

Estos resultados muestran que los coeficientes calculados son muy superiores al límite de significancia mínimo seleccionado para el caso 0,866 ya que la mayoría se encuentran por encima de 0,925. Solo dos datos de los 27 tuvieron valores por debajo de 0,924 (0,890 y 0,894). El valor límite de significancia es seleccionado de acuerdo con el número de datos a evaluar (13) y obtenido de las tablas de la prueba de Shapiro-Wilks. Otros autores han utilizado la prueba de Shapiro-Wilks para corroborar la normalidad de datos en diferentes campos de estudio. Por ejemplo, U. Bernabucci verificó el comportamiento normal de los datos por Shapiro-Wilks de las concentraciones de proteína de leche en diferentes temporadas (U. Bernabucci, 2015). Haroldo Lobo et. al. estudió la normalidad de la concentración de arsénico y zinc en oligochaetes acuáticos (Haroldo Lobo, 2021). También, Utshab Kumar Ghosh et. al. utilizó esta prueba para la identificación de biomarcadores en la identificación de cáncer de pulmón (Utshab Kumar Ghosh, 2022). En este trabajo, se evaluó el comportamiento normal de las muestras de plasma y serum de diferentes pacientes. En estos estudios, no se reportan los límites de significancia ni la probabilidad calculada. Solo se indica si los datos siguen o no un comportamiento normal. En conclusión, esta prueba corrobora el análisis realizado de distribución normal aplicado a otra nota sensorial adicional, con lo que se confirma el comportamiento normal de los datos en la evaluación sensorial.

3.2 Análisis estadístico:

La prueba de ANOVA se utilizó con el fin de corroborar la existencia de una diferencia estadística en los datos obtenidos en la evaluación sensorial, con una probabilidad de ocurrencia del 95% de error (α= 0,05). Si el valor de α es mayor al límite definido, significa que no hay diferencia entre las notas sensoriales identificadas y entre la evaluación realizada por los panelistas. Esta prueba se realizó entre las notas sensoriales y entre los panelistas para todas las fragancias de estudio como se muestra en la tabla 11.

Tabla 11 Resultados de la prueba ANOVA

Fragancia	***ANOVA***					
Fragancia A	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	15001,171	1250,098	5,450	$9{,}052 \times 10^{-7}$	1,869
	Notas olfativas	5303,709	757,673	3,303	$3{,}748 \times 10^{-3}$	2,121
	Error	19268,179	229,383			

	Total	*39573,060*				
Fragancia B	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	16360,879	1363,407	5,251	$1,612x10^{-6}$	1,869
	Notas olfativas	15025,427	2146,490	8,267	$1,215x10^{-7}$	2,121
	Error	21810,343	259,647			
	Total	53196,650				
Fragancia C	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	17307,011	1442,251	6,408	$6,097x10^{-8}$	1,869
	Notas olfativas	10340,502	1477,215	6,563	$3,475x10^{-6}$	2,121
	Error	18907,335	225,087			
	Total	*46554,848*				
Fragancia D	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	22167,561	1847,297	9,532	$2,253x10^{-11}$	1,869
	Notas olfativas	8641,596	1234,514	6,370	$5,151x10^{-6}$	2,121
	Error	16279,644	193,805			
	Total	*47088,801*				
Fragancia E	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	22267,275	1855,606	6,723	$2,581x10^{-8}$	1,869
	Notas olfativas	5126,047	732,292	2,653	$1,576x10^{-2}$	2,121
	Error	23184,293	276,003			
	Total	*50577,615*				
Fragancia F	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	18316,077	1526,340	9,473	$2,585x10^{-11}$	1,869
	Notas olfativas	17246,412	2463,773	15,291	$9,654x10^{-13}$	2,121
	Error	13534,897	161,130			
	Total	*49097,386*				
Fragancia G	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	17084,138	1423,678	6,914	$1,546x10^{-8}$	1,869
	Notas olfativas	2020,614	288,659	1,402	**$2,154x10^{-1}$**	2,121
	Error	17296,802	205,914			
	Total	*36401,554*				
Fragancia H	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	16976,450	1414,704	8,530	$2,465x10^{-10}$	1,869
	Notas olfativas	26325,465	3760,781	22,677	$5,984x10^{-17}$	2,121
	Error	13930,806	165,843			
	Total	*57232,721*				

Fragancia I	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	19481,124	1623,427	9,246	$4,400x10^{-11}$	1,869
	Notas olfativas	3140,333	448,619	2,555	$1,954x10^{-2}$	2,121
	Error	14748,372	175,576			
	Total	*37369,829*				
Fragancia J	***Origen de las variaciones***	***Suma de cuadrados***	***Promedio de los cuadrados***	***F***	***Probabilidad***	***Valor crítico para F***
	Panelistas	15852,719	1321,060	6,103	$1,416x10^{-7}$	1,869
	Notas olfativas	14087,002	2012,429	9,297	$1,777x10^{-8}$	2,121
	Error	18182,328	216,456			
	Total	*48122,049*				

Grados de libertad: Panelistas 12; notas olfativas 7; error 84; Total 103

La tabla 11 muestra que la probabilidad en casi todos los datos es mucho menor a nuestro límite de 0,05. Esto se puede corroborar al comparar el valor crítico para F con el valor F, el cual fue menor para casi todos los casos, indicando que su probabilidad asociada es menor al límite preestablecido (0,05). Esto corrobora que existe una diferencia significativa entre las notas sensoriales y entre los panelistas. En otras palabras, los panelistas diferenciaron en términos evaluativos las nueve notas sensoriales, calificándolas de manera distinta. También nos muestra que las notas sensoriales tuvieron valores diferentes para cada fragancia, es decir, tienen distintas intensidades.

La fragancia G fue la única que presentó una probabilidad más alta que el valor de alfa (α) de 0,05, para las columnas. Esto indica que la fragancia G tiene al menos un par de notas sensoriales que son iguales en términos de percepción por parte de los panelistas, y que son estadísticamente iguales. Esto se debe a que al menos un par de estas notas se percibieron igual en la fragancia, o que los panelistas no lograron diferenciar estas dos notas.

Es poco probable que los panelistas no lograran diferenciar estas dos notas, ya que para las demás nueve fragancias, la probabilidad entre las notas sensoriales siempre estuvo por debajo del valor límite (ver tabla 11). Por consiguiente, se concluye que los panelistas diferenciaron las notas sensoriales (atribuyéndoles valores diferentes), pero que al menos un par de estas fueron percibidas igual.

Para poder identificar el par, o los pares de notas que son iguales estadísticamente se revisaron las varianzas de todas las notas sensoriales de la fragancia G y se realizó la prueba F a las varianzas. En la Tabla 12 se muestra que las varianzas de las notas MUSKY y MADERA son similares y que

la probabilidad F es mucho menor que el valor crítico. Esto corrobora que los datos de estas dos notas sensoriales no son diferentes estadísticamente. En conclusión, las notas sensoriales MUSKY y MADERA de la fragancia G tuvieron la misma intensidad de acuerdo con la evaluación de los panelistas.

Tabla 12 Resultados de la prueba F

Prueba F	*MUSKY*	*MADERA*
Media	36,449	32,821
Varianza	361,747	351,007
Observaciones	13,000	13,000
Grados de libertad	12,000	12,000
F	**1,031**	
P(F<=f) una cola	0,480	
Valor crítico para F (una cola)	**2,687**	

Una vez corroborado el comportamiento normal de los datos sensoriales, se aplicó análisis box-plot para todas las notas olfativas y fragancias de este estudio.

Volviendo al ejemplo de la fragancia B, en la tabla 13, se muestran los resultados del análisis sensorial depurado luego del análisis estadístico. En color rojo se presentan los datos atípicos según el gráfico box-plot obtenido (Figura 6).

Tabla 13 Resultados sensoriales de la fragancia B sin datos atípicos

Fragancia	**Fragancia B**								
Códigos aleatorios	**819, 951, 111**								
Panelista	**Floral**	**Frutal**	**Aldehídica**	**Verde**	**Cítrico**	**Fougere**	**Musky**	**Edible**	**Madera**
1	42,5	72,0	14,5	31,5			26,0	40,0	18,5
2	18,7	46,5	29,0	24,7	38,0	48,7			21,0
3			12,3	8,7	33,3	22,7	51,3	41,3	
4	41,7	63,3			49,7		31,7	56,7	28,3
5		55,3		37,7		53,3		65,0	
6					60,0	59,5	30,5	58,7	
7	33,7	62,0	27,0	45,3		62,3			
8	37,7	32,0	13,7	23,3	24,3	43,0			21,3
9									16,0
10	11,3	30,7			18,0	38,0	24,7	50,7	
11	31,3	70,0	15,0	18,5	40,3	18,0	34,7	47,7	
12		39,7	8,7				35,0	63,3	14,7
13	24,0		25,0	48,0	56,0	19,0	44,0	62,0	24,0
Promedio	30	52	18	30	40	41	35	54	21
Mediana	33	55	15	28	39	43	33	57	21
Primer Cuartíl (Q1)	23	40	13	22	31	23	29	48	17

Tercer Cuartíl (Q3)	39	63	26	40	51	53	37	62	23
Rango Intercuartílico (RIC)	16	23	13	18	20	30	8	14	5
Límite inferior (Q1*10%)	20	36	12	20	28	20	26	43	16
Límite superior (Q3*10%)	43	70	28	44	56	59	41	68	25

Para el caso puntual de la fragancia B, se rechazaron 43 datos atípicos de 117, que corresponden al 36,8% de los datos. Con los datos depurados, se aplicaron los conceptos de promedio, mediana, primer y tercer cuartil, y rango intercuartílico. El límite inferior y superior se calculó como el ±10% del primer y tercer cuartil respectivamente.

Para reducir la influencia de *outliers* (datos atípicos), se recomienda el uso de la mediana en lugar del promedio de los datos. Así, las notas olfativas más influyentes en la fragancia B son FRUTAL (55) y EDIBLE (57), seguida por FOUGERE (43).

Los cuartiles Q1 y Q3 nos permiten expresar la dispersión de los datos: el valor de Q1 indica la ubicación del 25% de los datos y el valor Q3 el 75% de los datos. En el caso de la nota FLORAL de la fragancia B, el Q1 es 23 mientras que el Q3 es 39, lo que indica que aproximadamente el 50% de los datos tienen una dispersión de 16 unidades. De igual manera para el caso de la nota FOUGERE de la misma fragancia, el Q1 es 23 mientras que el Q3 es 53, indicando que aproximadamente el 50% de los datos se encuentra con una dispersión de 30 unidades. Estos valores corresponden al denominado rango intercuartílico (RIC), que para el caso de la fragancia B, indica que la mayor variabilidad la tienen las notas FOUGERE(30), FRUTAL(23) y CÍTRICO (20).

En los diagramas box-plot del anexo E se encuentran los resultados para las demás fragancias. Con los datos depurados se obtiene el diagrama box-plot de la figura 6.

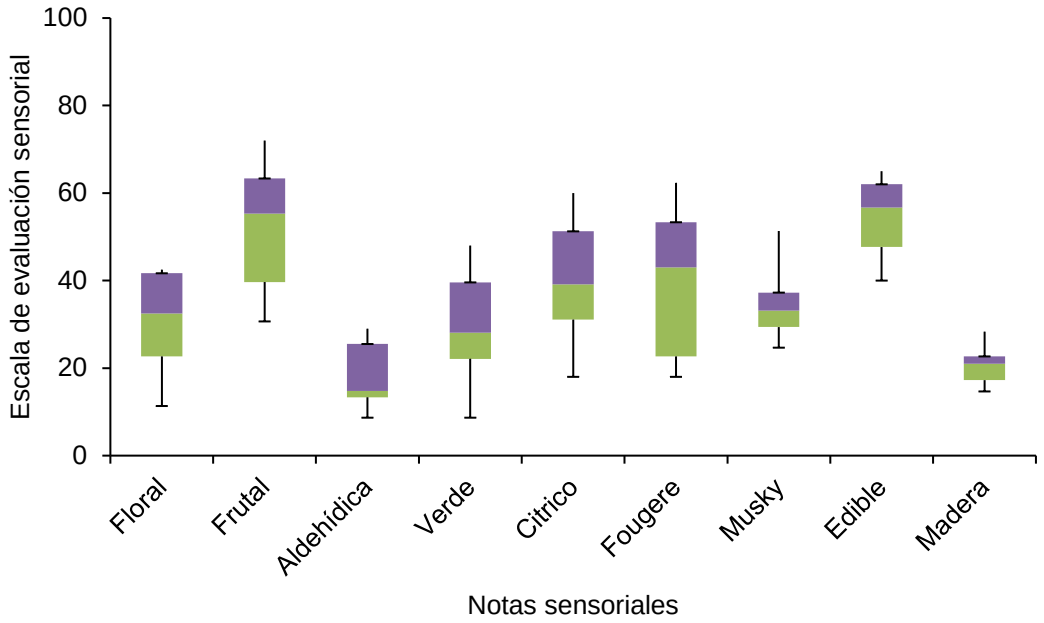

Figura 6 Diagrama box-plot de la fragancia B para todas las notas sensoriales sin *outliers*.

El diagrama box-plot obtenido para la fragancia B muestra la dispersión y los límites de tolerancia para el rechazo de datos. En la figura 6, los bloques morados son el Q3 (75%), la sección que divide la caja representa el Q2 (50%) o la mediana, y el extremo inferior de color verde el Q1 (25%). Es decir, la caja de color verde y la de color morado nos muestran la dispersión del 50% de los datos. Esto nos ayuda a ver la separación de los datos, es decir, a mayor amplitud de cada caja, mayor dispersión, mientras que una menor amplitud, una mayor proximidad. En el caso de la fragancia B las notas olfativas MADERA y MUSKY presentan la menor dispersión entre los resultados. Sin embargo, la nota MUSKY tiene un amplio rango de tolerancia. En el mismo sentido, las notas FRUTAL y FOUGERE presentan la mayor dispersión entre los datos. El comportamiento ideal y esperado para la evaluación sensorial, era que las cajas (verde y morada) tuvieran una pequeña amplitud (bajo RIC). Esto mostraría que los datos son cercanos entre sí y el valor promedio se acerca al valor de la mediana.

Por otro lado, las líneas que se extienden por fuera de la caja son los límites para el rechazo de datos (tolerancia), estos fueron calculados como el -10% del Q1 y el +10% del Q3 para el límite inferior y superior respectivamente. Nuevamente, la amplitud de estas líneas refleja la dispersión de los datos de la misma forma que en la caja.

Para los datos obtenidos del análisis instrumental no se realizaron duplicados de las muestras. Sin embargo, se espera que los datos obtenidos de este análisis tengan una baja dispersión dado a la confiabilidad de la medición. Como se evidencia en los estudios reportados por Diana Martín et. al.,

Mina K. et. al. (Diana Martín Rojas, 2018) (Mina K. Kim Y. Y.-g., 2019) y Yildiz et. al. (Yildiz, 2022). Entonces, se asumió que las fragancias presentaron baja tolerancia, expresadas como los límites superior e inferior para la eliminación de atípicos. Caso contrario es el análisis sensorial, que, a pesar del entrenamiento del panel, las calificaciones obtenidas para cada nota olfativa presentan rangos de variabilidad entre 15 y 40 unidades. Esto permite establecer una gran variabilidad por parte de los panelistas en la percepción de la intensidad de cada nota, en las fragancias.

En las gráficas de box-plot, se observa que las calificaciones para las diferentes notas se encuentran por debajo de las 70 unidades de la escala de evaluación sensorial. En general, no se evidenciaron cajas iguales o similares para las diferentes notas sensoriales. Estos resultados muestran una amplia dispersión en las evaluaciones sensoriales.

Los diagramas box-plot permitieron llevar a cabo la eliminación de 418 datos atípicos de los 1117 totales de la matriz, los cuales representan el 35,7%. A pesar de utilizar códigos aleatorios y pruebas por triplicado, en general los panelistas no evaluaron con la misma escala de intensidad los códigos aleatorios correspondientes a la misma fragancia.

De los resultados de todas las fragancias en box-plot se infirió que la nota ALDEHÍDICA es las más fácil de evaluar, dada su baja dispersión (RIC=7). Es decir, fue la nota con las cajas verde y morada más pequeña. Por otro lado, la nota FRUTAL es la más difícil de evaluar (RIC=31), ya que tuvo las cajas más amplias en las gráficas box-plot. Basado en lo anterior, se debe realizar una mayor profundización en el entrenamiento para esta nota, con el fin de disminuir la amplitud de las cajas en los diagramas box-plot y disminuir la dispersión.

En la figura 7 se presenta el perfil sensorial de la fragancia B después de depurar los datos atípicos.

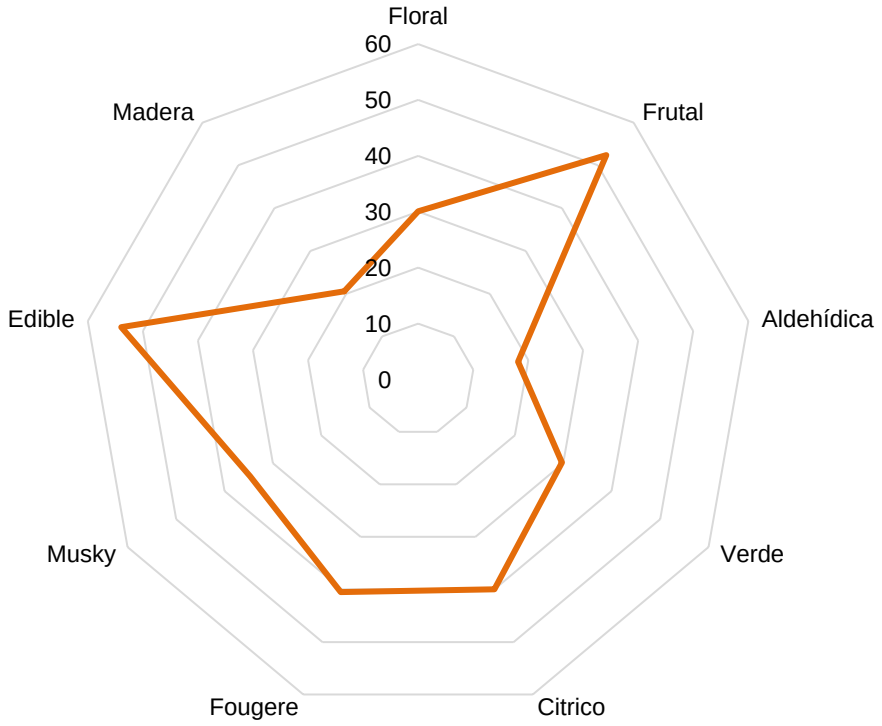

Figura 7 Perfil sensorial de la fragancia B sin datos atípicos

En la figura 8 y en tabla 14 se indican el perfil sensorial de las diez fragancias y el resumen con las principales notas sensoriales de cada fragancia luego de la depuración de datos atípicos.

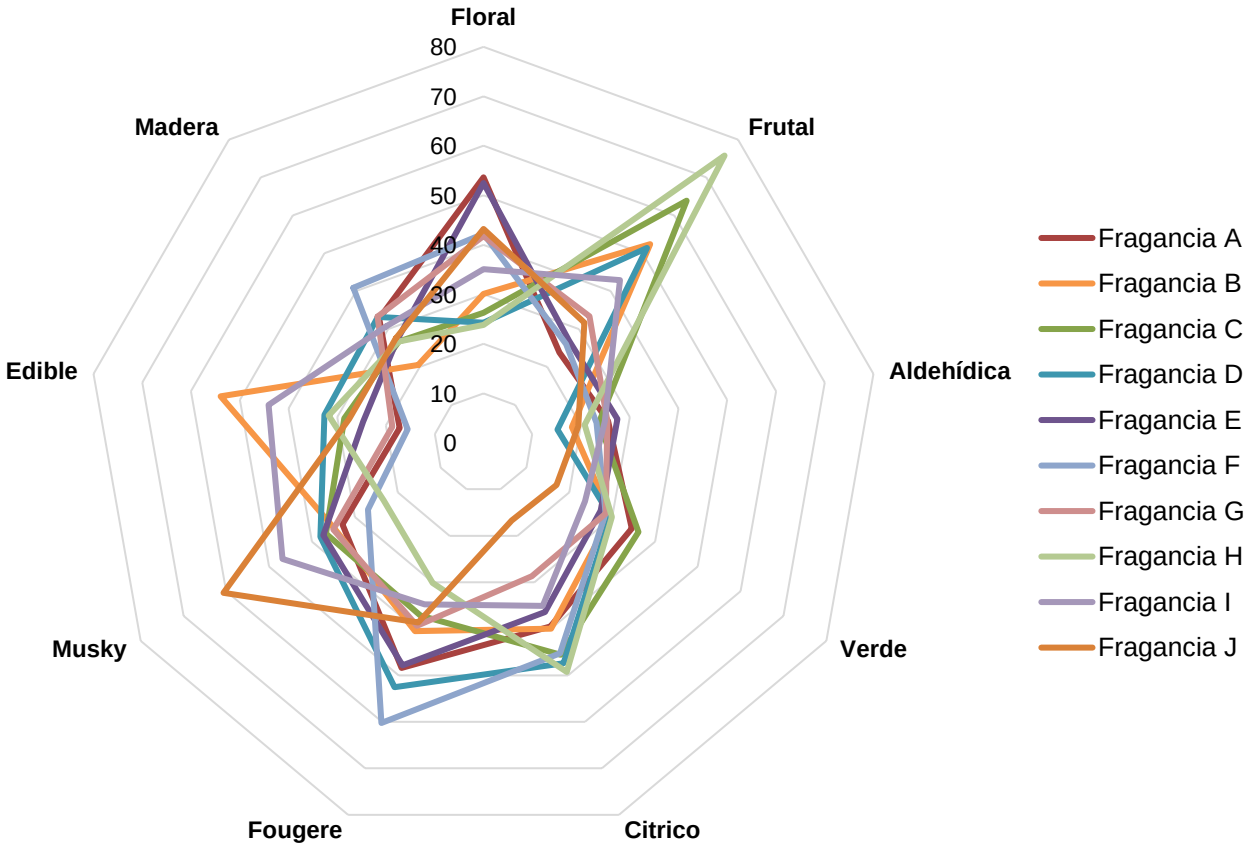

Figura 8 Perfiles sensoriales de todas las fragancias de estudio.

En general, los perfiles olfativos obtenidos, presentan calificaciones entre 15 y 75 puntos. Todas las notas olfativas fueron detectadas por los panelistas en cada una de las 10 fragancias.

Estos resultados indican una baja intensidad en la calificación realizada por los panelistas de las notas sensoriales para las fragancias evaluadas. Esto se debió a que el entrenamiento sensorial recibido por los panelistas fue realizado con patrones de referencia que corresponden a sustancias puras. La evaluación sensorial se realizó con fragancias que poseen en promedio 50 componentes y cuya concentración es más baja que la usada en la sustancia pura patrón. Esto dificultó la identificación de los componentes que dan la nota sensorial en la fragancia.

A pesar de ser fragancias de la familia FLORAL, se observa un aporte importante de otras notas sensoriales en las fragancias. Se destaca que en la mayoría de las fragancias solo hay uno o dos picos sensoriales relevantes, indicando un bajo aporte en la calificación sensorial. Contrario a esto, el análisis estadístico indicó que los panelistas diferenciaron las notas sensoriales. Esto puede deberse a la saturación de los panelistas al realizar la evaluación de las fragancias, ya que por cada sesión se evaluaron 9 notas sensoriales por 6 fragancias. Entonces se justifica que los panelistas se saturaron de otras fragancias y reportaron bajo aporte de las notas sensoriales.

La calificación de la nota ALDEHIDICA y la nota CITRICA fue semejante para todas las fragancias con calificación entre 15 a 25 unidades y entre 30 a 50 unidades respectivamente. Esto se debe a que estas notas sensoriales no son notas características de ninguna fragancia. Por lo que su variación no fue muy alta en la escala de evaluación sensorial.

Las fragancias donde las notas FOUGERE y MUSKY fueron predominantes, presentaron bajas calificaciones de las demás notas. Esto indica que los compuestos presentes en las notas FOUGERE y MUSKY saturan el olfato y bloquean la percepción de otros olores (Joel Kowalewski, 2020) (Lucky Ahmeda, 2018).

En general se puede observar que hay al menos una nota sensorial principal o característica para cada fragancia, lo cual es comparable con la clasificación dada comercialmente. Por ejemplo, la fragancia B de acuerdo con la evaluación sensorial está clasificada como FRUTAL y EDIBLE, mientras que comercialmente es FLORAL y FRUTAL. La fragancia A es FLORAL y FOUGERE, mientras que comercialmente es FLORAL y FRUTAL. La fragancia C es FRUTAL y comercialmente es FLORAL y VERDE. La fragancia E es FLORAL y FOUGERE y comercialmente es FLORAL y CÍTRICA. La fragancia D es FRUTAL, CÍTRICO y FOUGERE y comercialmente es FLORAL y FRUTAL. La

fragancia J es MUSKY y comercialmente es FLORAL y MADERA. La fragancia F es FOUGERE y comercialmente es FOUGERE y AROMÁTICO. La fragancia G es FLORAL, MADERA, MUSKY y FOUGERE y comercialmente es FLORAL y ALDEHÍDICO. La fragancia H es FRUTAL y comercialmente es CÍTRICO y FRUTAL. La fragancia I es EDIBLE, MUSKY y FRUTAL y comercialmente es FLORAL y CÍTRICO. Esto indica que no hay una clara relación entre la clasificación comercial de las fragancias y el perfil sensorial evaluado por el panel sensorial. Esto posiblemente se deba a que la clasificación comercial puede no ser basada en un análisis sensorial sino en una percepción dada por el equipo de marketing.

Esta diferencia entre el perfil sensorial y la clasificación comercial puede deberse a que la clasificación de las fragancias en la industria no se realiza para una sola nota sensorial, sino al menos para dos. De igual manera, muchas veces estas clasificaciones comerciales no son corroboradas por un panel sensorial, sino que son clasificadas de acuerdo con la necesidad del consumidor (marketing). Con esto, no solamente se verifica la clasificación sensorial de las fragancias, sino que se tiene una mayor comprensión de la descripción sensorial de estas.

En el anexo D se muestran los perfiles sensoriales depurados de las demás fragancias y su correspondiente tabla de datos sensoriales.

3.3 Análisis multivariado:

El análisis multivariado consistió en reducir la dimensionalidad de las variables del análisis sensorial para las fragancias y las notas sensoriales. Entonces se realizó un Análisis de Componentes Principales (PCA) con el fin de conocer la afinidad de las notas sensoriales con las fragancias. Para la construcción de la matriz se tomaron como columnas las notas sensoriales cuyos valores son los datos promedios de la evaluación realizada por los jueces entrenados, mientras las filas correspondieron al listado de las diez fragancias. La figura 9 muestra los resultados del PCA sensorial.

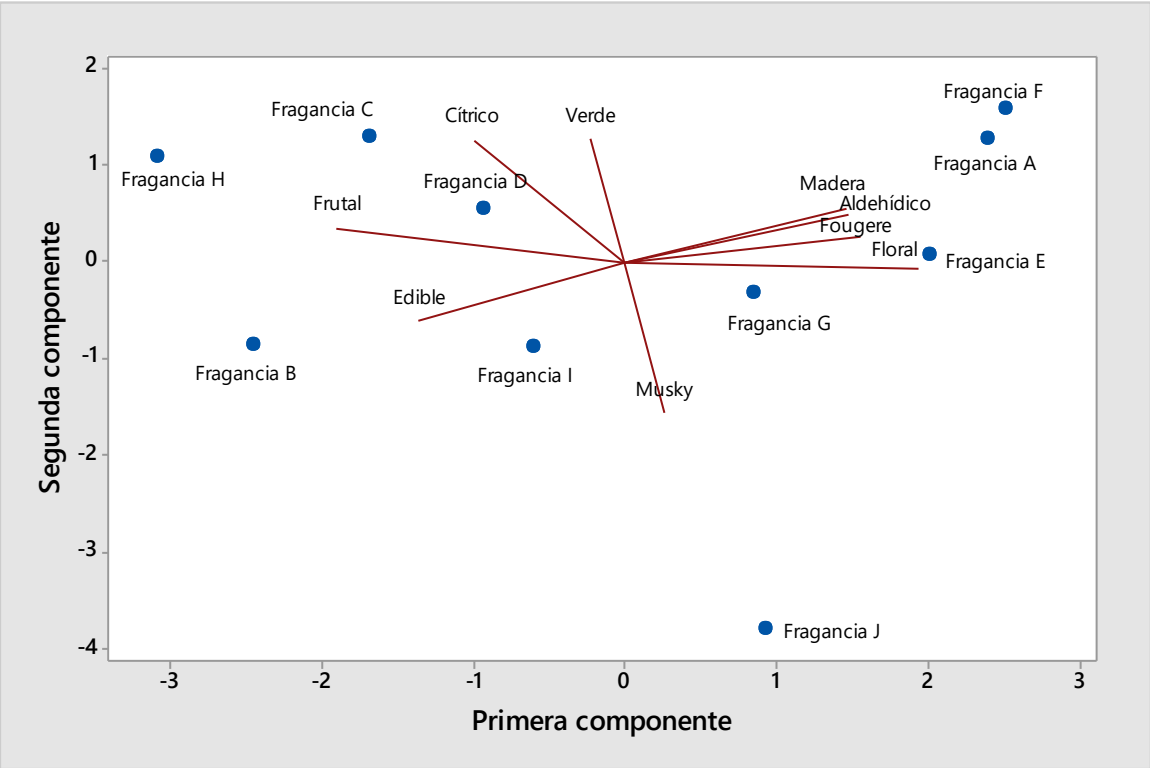

Figura 9 Diagrama de Componentes Principales (PCA) evaluado entre las fragancias y las notas sensoriales

El PCA construye dos vectores llamados primera y segunda componente. La primera componente corresponde al vector que pasa más cercano a todos los puntos evaluados durante el análisis sensorial. Mientras la segunda componente es el vector perpendicular a la primera componente. Estos dos componentes asocian el 76,2% de los datos permitiendo identificar la asociación de las fragancias sujetas de estudio con las notas sensoriales estudiadas.

Uno de los aspectos más importantes de este análisis, es que las notas MADERA, FOUGERE, ALDEHÍDICO, y FLORAL se encuentran en el mismo cuadrante, mientras que las demás notas sensoriales se encuentran distribuidas en los tres cuadrantes restantes. Esto sugiere que las notas MADERA, FOUGERE, ALDEHÍDICO, y FLORAL son semejantes en términos sensoriales. A pesar de que el análisis estadístico de varianzas ANOVA demostró que existen diferencias significativas entre las notas sensoriales evaluadas.

Los resultados del PCA sugieren que las notas MADERA, FOUGERE y ALDEHÍDICO están correlacionadas con la fragancia A y la fragancia F.

La fragancia E y fragancia G son las fragancias más FLORALES; mientras que la fragancia D, la fragancia C y la fragancia H tienen componentes CÍTRICOS y FRUTALES. La fragancia B es caracterizada por la nota EDIBLE, mientras que la fragancia I es una combinación de las notas MUSKY y EDIBLE.

La fragancia F se encuentra correlacionada con las notas MADERA, FOUGERE, y ALDEHÍDICO lo cual se puede observar en su respectivo perfil sensorial en donde el pico principal en términos sensoriales corresponde a la nota FOUGERE. Caso similar lo presenta la fragancia A, la cual también se encuentra correlacionada con estas tres notas sensoriales, y también con la nota FLORAL, de acuerdo con su respectivo perfil sensorial.

El PCA para la fragancia G nos indica una relación entre las notas FLORAL y MUSKY, mientras su perfil sensorial muestra que esta fragancia presenta picos no tan pronunciados en las notas MUSKY, FRUTAL, FLORAL y FOUGERE. En términos generales esta fragancia presenta el perfil sensorial más redondo, es decir, la calificación sensorial fue similar en casi todas las notas de la fragancia. Nuevamente asociado a un bloqueo de los receptores olfativos por la nota MUSKY y sus componentes (Joel Kowalewski, 2020) (Lucky Ahmeda, 2018).

La fragancia E está correlacionada con la nota FLORAL y las tres notas MADERA, FOUGERE y ALDEHÍDICO según el PCA. Esto coincide con su perfil sensorial en donde sus notas características son también las notas FLORAL y FOUGERE. Adicionalmente, la fragancia E presenta las mismas notas sensoriales características de la fragancia A, lo cual coincide con los resultados del PCA mostrados en la figura 9.

La fragancia J no se correlaciona con ninguna nota olfativa. Es cercana a la nota MUSKY según el PCA, lo cual también coincide con su perfil sensorial.

La fragancia I se encuentra correlacionada entre las notas MUSKY y EDIBLE según el PCA y su perfil sensorial. Así mismo, la fragancia B está fuertemente vinculada a la nota EDIBLE y como segunda nota más cercana a la nota FRUTAL, lo cual se corrobora con su respectivo perfil sensorial.

La fragancia H está fuertemente correlacionada a la nota FRUTAL, y de igual manera al pico característico del perfil sensorial correspondiente a esta nota. La fragancia D se encuentra ubicada entre las notas FRUTAL y CÍTRICO según el PCA. Notas sensoriales que también corresponden a los picos principales de su correspondiente perfil sensorial. La fragancia C se encuentra correlacionada con la nota CÍTRICO y FRUTAL, lo que coincide parcialmente con su respectivo perfil sensorial, ya que, según este, los picos principales que presenta esta fragancia son FRUTAL y VERDE. Finalmente, en la figura 9 se observa que la fragancia J es la más alejada respecto a las notas sensoriales y a las fragancias. Esto se debe a que su pico característico (MUSKY) tuvo la puntuación más alta en la evaluación sensorial, afectando el resultado en el PCA.

En la tabla 14 se muestra el resumen de las principales notas sensoriales de las fragancias de estudio de acuerdo con el PCA, la cual coincide con los resultados de la evaluación sensorial.

Tabla 14 Notas principales de las fragancias comparadas por perfil olfativo y resultados PCA

Fragancia	**Principales notas sensoriales PERFIL OLFATIVO**	**Principales notas sensoriales PCA**
Fragancia A	FLORAL, FOUGERE	FLORAL, FOUGERE
Fragancia B	EDIBLE, FRUTAL	EDIBLE, FRUTAL
Fragancia C	FRUTAL	FRUTAL
Fragancia D	FRUTAL, CÍTRICO y FOUGERE	FRUTAL, CÍTRICO
Fragancia E	FLORAL, FOUGERE	FLORAL, FOUGERE
Fragancia F	FOUGERE	FOUGERE
Fragancia G	FLORAL, MADERA, MUSKY y FOUGERE	FLORAL, MUSKY
Fragancia H	FRUTAL	FRUTAL
Fragancia I	EDIBLE, MUSKY y FRUTAL	EDIBLE, MUSKY
Fragancia J	MUSKY	MUSKY

En general, los resultados obtenidos del PCA para cada fragancia corresponden con los puntajes máximos obtenidos en las notas de los perfiles sensoriales.

3.4 Análisis GC-MS y GC-O

Las fragancias fueron listadas de manera individual según sus componentes y su porcentaje en peso de la formulación libre de solventes. Así pues, se revisaron los compuestos comunes que estuvieron presentes en al menos el 60% de la composición de las diez fragancias para ser seleccionados en la matriz de correlación. En total se identificaron 23 sustancias las cuales fueron clasificadas según su olor por el experto sensorial como se muestran en la tabla 15.

Las sustancias mostradas en la tabla 15 fueron aplicadas en cintillas de olor para después ser clasificadas por el juez experto sensorial.

Tabla 15 Clasificación de los compuestos químicos presentes en al menos el 60% de las fragancias.

#	Nombre comercial	Sustancia química	# CAS	Nota sensorial
1	Acetato de Hexilo	Acetato de Hexilo	142-92-7	FRUTAL
2	Dihydro myrcenol	2,6-dimetiloct-7-en-2-ol	18479-58-8	CÍTRICO
3	Linalool	Linalool	78-70-6	FLORAL
4	Cumarina	Cumarina	91-64-5	EDIBLE
5	Herbaflorat	Acetato de dihidro-diciclopentadienilo	5413-60-5	VERDE
6	Limoneno	Limoneno	138-86-3	CÍTRICO
7	Oxido de rosa	Tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropenil)-2H-pirano	16409-43-1	FLORAL
8	Acetato de bencilo	Acetato de bencilo	140-11-4	FLORAL
9	Acetato de stiralilo	Acetato de stiralilo	93-92-5	VERDE
10	Acetato de Dimetilbencilcarbinol	Acetato de Dimetilbencilcarbinol	151-05-3	FRUTAL
11	Etilvainillina	Etilvainillina	121-32-4	EDIBLE
12	Phenirat	Isobutirato de fenoxietilo	103-60-6	FLORAL
13	Lilial	Lilial	80-54-6	FLORAL
14	Gama decalactona	Gama decalactona	706-14-9	EDIBLE
15	Sandranol®	(E)-2-etil-4-(2,2,3-trimetil-1-ciclopent-3-enil)but-2-en-1-ol	28219-61-6	MUSKY
16	Iso e super	Tetrametil acetiloctahidronaftalenos	54464-57-2	MADERA
17	Hexil Cinamaldehido	Hexil Cinamaldehido	101-86-0	ALDEHÍDICO
18	Ambrocenide	(4aR,5R,7aS)-2,2,5,8,8,9a-hexametiloctahidro-4H-4a,9-metanoazuleno[5,6-d][1,3]dioxol	211299-54-6	MADERA
19	Galaxolida	Hexahidro hexametil-ciclopentabenzopirano	1222-05-5	MUSKY
20	Cis-agrumex	Acetato de 2-tert-butilciclohexilo	88-41-5	FRUTAL
21	Damascone delta	1-2,6,6-trimetil-3-ciclohexen-1-il-2-buten-1-ona	57378-68-4 / 71048-82-3	FLORAL
22	Geraniol	(2E)-3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-ol	106-24-1	FLORAL
23	Aldehyde C14	5-heptiloxolan-2-ona	104-67-6	ALDEHÍDICO

Estas 23 sustancias químicas representaron en promedio el 60% de la composición total de las diez fragancias en base libre de solventes. Al realizar una revisión de estos porcentajes, se encuentra que la fragancia F solo representó el 24,0% del total de la formulación, mientras que las demás fragancias se encuentran por encima del 48,4% y en el caso más alto un 84,5%. Basado en la anterior información se realizó un análisis de datos atípicos por box-plot cuyos resultados se muestran en la tabla 16.

Tabla 16 Eliminación datos atípicos composición fragancias

Datos box-plot	***Resultado (%)***
Promedio	60,2
Mediana	62,1
Primer Cuartil (Q1)	53,9
Tercer Cuartil (Q3)	67,1
Rango Intercuartílico (RIC)	13,2
Límite inferior	34,1
Límite superior	86,9

Los resultados en la tabla 16 indican que la fragancia F no es similar a las demás y debe ser eliminada de la construcción de la matriz de correlación, ya que su composición se encuentra por debajo del límite inferior (34,1%). Esto se debe a que la fragancia en específico contiene cerca de un 80% de solventes y las sustancias que lo componen en su mayoría no son comunes con las demás formulaciones. Entonces se concluye que la fragancia F es atípica respecto a las demás.

Estos resultados sugieren que las fragancias seleccionadas comparten el 64% de los compuestos de la formulación. También indican que el 36% de los compuestos químicos restantes presentes en las fragancias corresponden a la identidad singular de cada una.

Estas 23 sustancias se lograron clasificar en 8 de las 9 notas sensoriales seleccionados de acuerdo con lo evaluado por el juez experto. La nota FOUGERE no fue clasificada en ninguno de estos compuestos, debido a que esta nota sensorial solo es la característica en la fragancia F, la cual se descartó por el análisis box-plot. Además, los compuestos químicos asociados a la nota FOUGERE no fueron encontrados en otras formulaciones.

Por otra parte, la nota FLORAL fue la que presentó mayor número de compuestos químicos relacionados, (7 de 23), lo cual es acorde con la selección inicial de las fragancias de estudio.

Una vez obtenidos los resultados del análisis instrumental, se procedió a realizar el PCA buscando la afinidad entre las fragancias y sus compuestos. Para la construcción de la matriz se tomaron como columnas los porcentajes en peso usados en las formulaciones de cada uno de los compuestos listados en la tabla 21 y las filas correspondieron al listado de las diez fragancias. Los resultados del PCA entre las fragancias y los compuestos químicos se presentan en la figura 10.

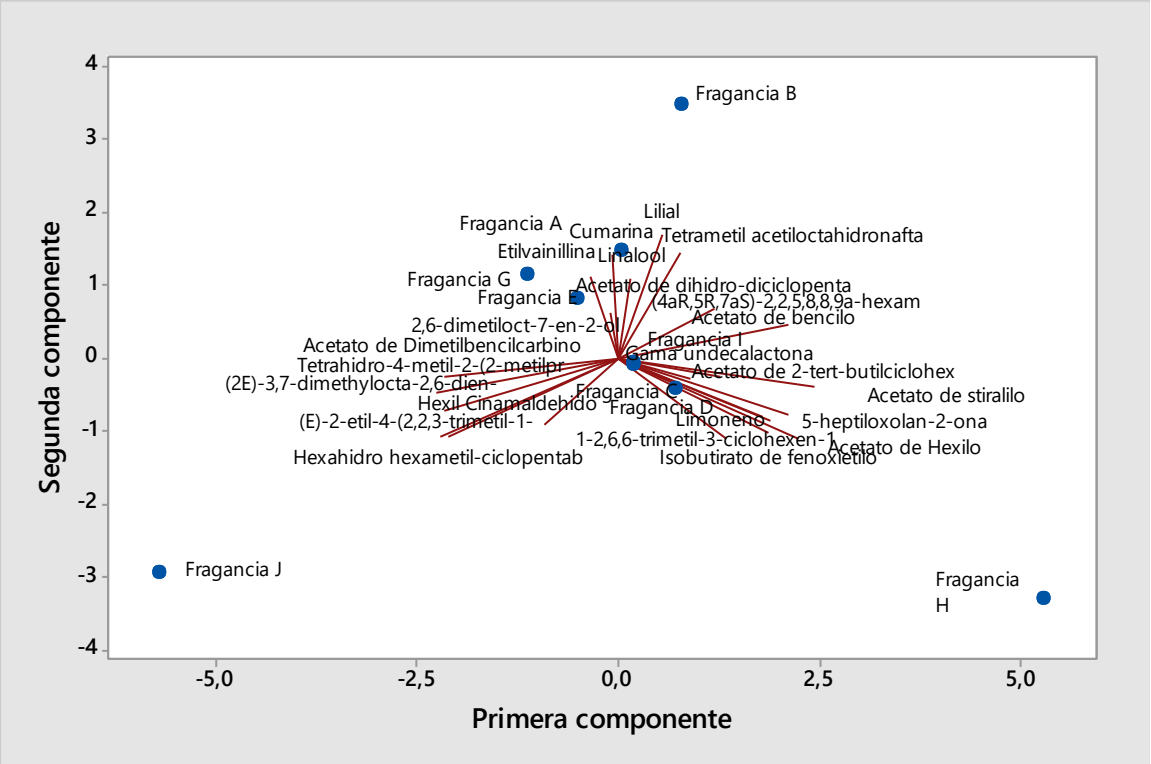

Figura 10 Diagrama de Análisis de Componentes Principales (PCA) evaluado entre las fragancias y los compuestos químicos identificados por GC-MS

Los vectores de los dos primeros componentes obtenidos del PCA solo cubrieron el 54% del total de los datos. Este resultado indica que no existe una correlación directa entre las fragancias de estudio y sus componentes químicos.

Para conocer la relación entre las notas sensoriales y los compuestos químicos de las fragancias, se realizó el PCA tomando la calificación de las notas sensoriales dadas por los panelistas y los porcentajes en peso en la formulación libre de solventes obtenida del análisis instrumental (los 23 compuestos químicos).

Las columnas fueron las calificaciones de las notas sensoriales y el porcentaje en peso de los compuestos químicos, mientras las filas correspondieron a las fragancias de estudio. La matriz de correlación se encuentra en el Anexo F. Los resultados del PCA se muestran en la figura 11.

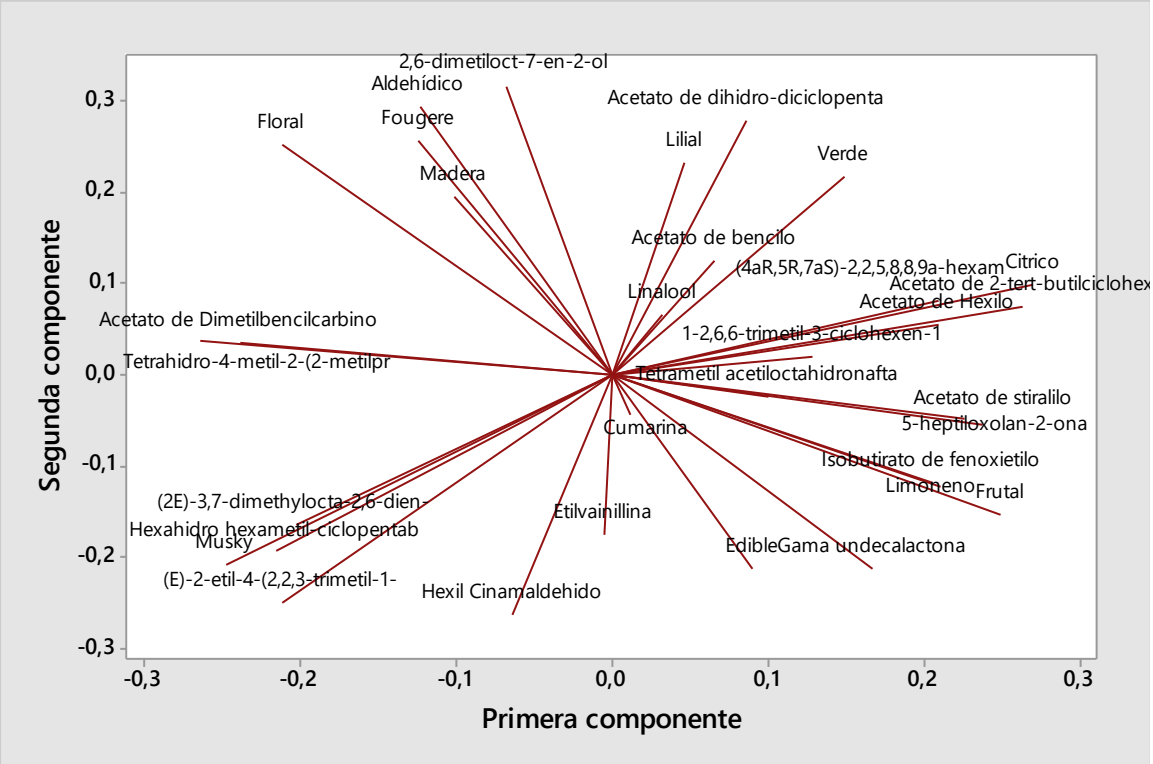

Figura 11 Diagrama de Análisis de Componentes Principales (PCA) evaluado entre las notas sensoriales y los compuestos químicos identificados por GC-MS

Los vectores de los dos primeros componentes cubrieron el 55% de los datos evaluados, indicando que no hay una correlación directa entre las fragancias, su composición en peso y su nota sensorial. Ampliando el número de componentes principales, se encuentra que, con tres valores, se logra cubrir el 71,3% y con cuatro componentes el 80,2%, lo cual representa más o menos 4/5 partes de los datos. Este resultado muestra que se requieren de otras herramientas que permitan una mejor correlación entre las variables sensoriales e instrumentales de las fragancias.

Basado en la baja correlación de los datos con el PCA para los dos primeros componentes (55%), y la baja correlación entre los datos instrumentales y las fragancias de estudio (54%), se refinó el procedimiento con el fin de aumentar la interpretación de los datos en el PCA. Para ello, se complementó el análisis GC-MS con GC-O para la identificación de los compuestos olfativamente activos en cada fragancia (aquellos que se pueden detectar olfativamente durante la cromatografía de gases).

Los resultados obtenidos del análisis GC-O se presentan en la tabla 17.

Tabla 17 Compuestos olfativamente activos en fragancias de la familia FLORAL detectados por GC-O

Fragancia	Nota sensorial detectada en puerto de olfacción	IR HP5-ms (GC-O)	IR HP5-MS (GC-MS)	IR literatura	Identificación
Fragancia A	FRUTAL	1010	1009	1015[1]	Acetato de hexilo
	VERDE-FRESCO	1037	1035	1035[2]	Eucaliptol
	FLORAL	1098	1099	1097[3]	3,7-dimetil-1-octanol
	FLORAL, VERDE	1127	1114	1114[4]	2-feniletanol
	FLORAL	1264	1255	1256[3]	Acetato de 2-feniletilo
Fragancia B	FRUTAL	938	943	941[5]	2-metilpentanoato de etilo
	CÍTRICO	1032	1030	1032[6]	Limoneno
	FLORAL	1102	1099	1101[7]	Linalool
	EDIBLE	1397	1403	1453[8]	Etil vainillina
Fragancia C	FRUTAL	852	852	851[9]	3-Hexen-1-ol
	VERDE, MADERA	931	934	931[10]	α-pineno
	VERDE, MADERA	959	955	957[11]	β-pineno
	FLORAL	1116	1111	1111[12]	cis-oxido de rosa
Fragancia D	VERDE, MADERA	962	963	964[11]	β-pineno
	CÍTRICO	1037	1032	1032[6]	Limoneno
	VERDE	1060	1052	1060[13]	γ-Terpineno
	FLORAL, CÍTRICO	1076	1071	1058[14]	2,6-dimetil-7-octen-2-ol
	FLORAL	1138	1136	1134[12]	cis-oxido de rosa
	FLORAL	1161	1163	1163[1]	Acetato de bencilo
	FLORAL	1191	1189	1194[3]	Acetato de 1-feniletilo
Fragancia E	FRUTAL	923	920	929[15]	Acetato de fenilo
	FRUTAL	938	942	941[5]	2-metilpentanoato de etilo
	FLORAL, CÍTRICO	1081	1072	1058[14]	2,6-dimetil-7-octen-2-ol
	FLORAL	1160	1164	1163[1]	Acetato de bencilo
	FOUGERE	1285	1292	1285[16]	Acetato de bornilo
Fragancia F	VERDE	992	988	992[3]	2-Octanona
	FRUTAL	1004	1009	1015[1]	Acetato de hexilo
	VERDE-FRESCO	1045	1044	1046[2]	Eucaliptol
	FLORAL	1101	1099	1101[7]	Linalool
	VERDE-FRESCO	1149	1152	1150[17]	Alcanfor
Fragancia G	FRUTAL	937	943	941[5]	2-metilpentanoato de etilo
	FRUTAL	1014	1013	1015[1]	Acetato de hexilo
	FLORAL	1112	1111	1111[12]	cis-oxido de rosa
	FLORAL	1154	1163	1163[1]	Acetato de bencilo
	EDIBLE-COCO-DULCE	1580	1573	1574[18]	γ-undecalactona
Fragancia H	FRUTAL	1017	1014	1015[1]	Acetato de hexilo
	FRUTAL	1171	1170	1180[19]	Heptanoato de alilo
	FRUTAL	1190	1191	1194[3]	Acetato de 1-feniletilo
Fragancia I	VERDE, MADERA	991	985	992[12]	Mirceno
	CÍTRICO	1034	1030	1032[6]	Limoneno
	FLORAL, VERDE	1126	1118	1114[4]	2-feniletanol
	FLORAL	1274	1270	1271[20]	Geraniol
Fragancia J	FRUTAL	940	942	941[5]	2-metilpentanoato de etilo
	FLORAL	1116	1112	1111[12]	cis-oxido de rosa
	FLORAL	1203	1211	1221[21]	Citronelol

[1] (Isidorov, Krajewska, Dubis, & Jdanova, 2001)
[2] (Zeng, y otros, 2007)
[3] (Pino, Mesa, Muñoz, Martí, & Marbot, 2005)
[4] (Asuming, y otros, 2005)
[5] (Escudero, Campo, Fariña, Cacho, & Ferreira, 2007)
[6] (Nuket Kartal, 2007)
[7] (Saroglou, Arfan, Shabir, Hadjipavlou-Litina, & Skaltsa, 2007)
[8] (Radulovic, Dordevic, Markovic, & Palic, 2010)
[9] (Andriamaharavo N. , 2014)

[10] (Kundakovic, Fokialakis, Kovacevic, & Chinou, 2007)
[11] (Setzer, Noletto, & Lawton, 2006)
[12] (Hazzit, Baaliouamer, Faleiro, & Miguel, 2006)
[13] (Shang, Hu, Deng, & Hu, 2002)
[14] (Tesevic, y otros, 2005)
[15] (Jalali-Heravi, Zekavat, & Sereshti, 2006)
[16] (Grujic-Jovanovic, Skaltsa, Marin, & Sokovic, 2004)
[17] (Vagionas, y otros, 2007)
[18] (Jiayuan Zhao, 2006)
[19] (David, Scanlan, & Sandra, 2000)
[20] (Ferhat, Meklati, & Chemat, 2007)
[21] (Kukic, 2006)

Los compuestos identificados como olfativamente activos corresponden con los enlistados en la tabla 17, empleados en las formulaciones. Otros compuestos presentes, son producto de la degradación o artefactos que acompañan el listado de componentes de las formulaciones. Cabe destacar que los compuestos de mayor peso molecular, reflejados en IR superiores a 1200, no fueron detectados como compuestos olfativamente activos. Estos compuestos se conocen por poseer altos valores umbral, es decir que se requieren de grandes cantidades para ser detectados en la formulación (Chao Wang, 2022) (Zili Liu, 2013).

En total se lograron detectar e identificar 27 compuestos olfativamente activos en las 10 fragancias. Sin embargo, en cada fragancia no se detectaron más de 5 compuestos olfativamente activos, y estos son diferentes en cada fragancia. Lo anterior se puede usar como una nueva herramienta de correlación entre el análisis sensorial y el instrumental.

Solo 3 compuestos químicos son similares en 4 fragancias, mientras que 17 son únicos para cada fragancia. En términos sensoriales, 11 compuestos químicos identificados se asociaron a la nota FLORAL, 7 a la nota VERDE, 6 a la nota FRUTAL, 3 a la nota MADERA, 2 a la nota CÍTRICO y EDIBLE y solo uno a la nota FOUGERE, del total de los 27 compuestos químicos.

Las notas ALDEHÍDICO y MUSKY no fueron detectados en el análisis por gases olfatometría, ya que, para el caso de la nota ALDEHÍDICA, ninguno de los compuestos químicos es un aldehído. La nota MUSKY no fue detectada en ninguno de los compuestos, debido a que estas los compuestos químicos que componen dan estas percepciones se detectan con IR los 1400 (Andriamaharavo N. , 2014). Por ejemplo, la galaxolida que fue seleccionada como el patrón de referencia para esta nota sensorial en la evaluación sensorial, presenta IR de 1850 (Andriamaharavo N. , 2014), y la última sustancia detectada por gases olfatometría estuvo cercana 1200. Los compuestos con mayor presencia fueron los asociados a la nota FLORAL, lo cual concuerda con la selección de las fragancias en este estudio.

Contrario a la nota sensorial FLORAL, la nota FOUGERE fue la que menos tuvo sustancias químicas asociadas. Esto se debe a que el patrón de referencia en el análisis sensorial de esta nota es una mezcla de varias materias primas (aceite esencial de lavanda, dihidromircenol, cumarina y galaxolida). Mientras los patrones de referencia de las demás notas correspondieron a sustancias químicas puras. Por esta razón asociar un compuesto químico a la mezcla patrón de la nota FOUGERE fue tan complejo. La única sustancia que en particular fue asociada a esta nota fue el acetato de bornilo, basado en que el juez experto lo relacionó con notas VERDE y MADERA, como si fuera una parte mayoritaria de la mezcla patrón.

De las 27 sustancias químicas características de las fragancias de estudio, seis fueron comunes con la matriz de correlación inicial (acetato de hexilo, oxido de rosa, dihidromircenol, limoneno, etil vainillina y gama undecalactona), lo que nos indica que estas materias primas son comunes para las fragancias de la familia FLORAL, activas y diferenciadoras en el ámbito sensorial. El óxido de rosa seleccionado como patrón de referencia para las notas florales estuvo presente en la matriz de correlación y fue detectado por gases olfatometría, mostrando la importancia de esta materia prima en la formulación de fragancias florales.

El óxido de rosa fue detectado por gases olfatometría en las fragancias D, fragancia G, fragancia C y fragancia J, y fue clasificada como FLORAL por el juez experto.

Entonces, se esperaría que los perfiles sensoriales de estas fragancias tuvieran picos relevantes para la nota FLORAL. Contrario a lo esperado, solo la fragancia G presenta una calificación alta para esta nota, debido a que no necesariamente su detección por gases olfatometría es directamente proporcional con la descripción de la fragancia. En otras palabras, un compuesto químico no define el perfil sensorial de una fragancia, y no puede haber un compuesto clave del aroma, es decir, un solo compuesto no es responsable del olor característico de la fragancia.

El acetato de hexilo fue detectado por gases olfatometría en la fragancia H, fragancia G, fragancia A, y fragancia F, además fue clasificado como FRUTAL por el juez experto. Entonces, se esperaba que los perfiles sensoriales de estas fragancias tuvieran picos relevantes para esta misma nota sensorial. Sin embargo, solo las fragancias H y G tuvieron calificaciones altas para la nota FRUTAL, es decir, solo el 50%. Por lo que no hay una clara correlación entre la detección por gases olfatometría con esta sustancia química y los perfiles sensoriales.

El dihidromircenol fue detectado por gases olfatometría en la fragancia D y fragancia E, y el juez

experto lo clasificó como FLORAL y CÍTRICA. En la fragancia E las notas FLORAL y FOUGERE son las que presentan los picos sensoriales característicos, lo que concuerda directamente con el hecho que esta sustancia química fue clasificada parcialmente como FLORAL. Teniendo en cuenta que el dihidromircenol es componente de la nota FOUGERE, los panelistas asociaron esta sustancia con esta nota. Por lo que existe una relación directa entre el dihidromircenol con la nota FLORAL y FOUGERE para la fragancia E.

Por otro lado, la nota CÍTRICA solo tuvo relación directa con la fragancia D ya que su segundo pico sensorial característico fue para esta nota. El limoneno fue detectado por gases olfatometría en las fragancias D, fragancia B y fragancia I, y fue clasificado como CÍTRICA por el juez experto. Sin embargo, solo la fragancia D presenta la nota CITRICA como pico característico.

De acuerdo con estos resultados se concluye que las sustancias consideradas principales y relevantes detectadas por gases olfatometría, no necesariamente son las sustancias que van a definir el perfil sensorial de las fragancias. Esto nuevamente demuestra que el panel sensorial es un elemento importante para realizar la descripción sensorial de una fragancia.

En la tabla 18 se muestra la relación entre los picos característicos en los perfiles sensoriales de las fragancias, las notas dadas por PCA y los compuestos químicos detectados por GC-O.

Tabla 18 Relación entre las notas olfativas determinadas en el perfil sensorial, el resultado PCA y los compuestos olfativamente activos detectados por GC-O

Fragancia	**Notas perfil olfativo**	**Notas PCA**	**Notas GC-O**
Fragancia A	FLORAL, FOUGERE	FLORAL, FOUGERE	FRUTAL, FLORAL y VERDE
Fragancia B	EDIBLE, FRUTAL	EDIBLE, FRUTAL	FRUTAL, CÍTRICO, FLORAL y EDIBLE
Fragancia C	FRUTAL	FRUTAL	FRUTAL, VERDE, MADERA y FLORAL
Fragancia D	FRUTAL, CÍTRICO y FOUGERE	FLORAL, FOUGERE	VERDE, MADERA, CÍTRICO y FLORAL
Fragancia E	FLORAL, FOUGERE	FRUTAL, CÍTRICO	FRUTAL, FLORAL, CÍTRICO y FOUGERE
Fragancia F	FOUGERE	FOUGERE	VERDE, FRUTAL y FLORAL

Fragancia G	FLORAL, MUSKY, MADERA y FOUGERE	FLORAL, MUSKY	FRUTAL, FLORAL y EDIBLE
Fragancia H	FRUTAL	FRUTAL	FRUTAL
Fragancia I	EDIBLE, MUSKY y FRUTAL	EDIBLE, MUSKY	MADERA, CÍTRICO, FLORAL, VERDE y FLORAL
Fragancia J	MUSKY	MUSKY	FRUTAL y FLORAL

Al comparar las notas olfativas características de cada fragancia, según el análisis sensorial, el resultado del PCA y/o detectadas como compuestos olfativamente activos en GC-O, podemos observar similitudes en los resultados. En todas las fragancias, excepto en las fragancias F, G, I y J, hay concordancia entre los resultados. Esto indica que los compuestos olfativamente activos identificados por GC-O, poseen cierta correlación con las principales notas olfativas de las fragancias de estudio. En el caso puntual de las fragancias F,G, I y J, los resultados del análisis sensorial y PCA coinciden, mientras que la determinación de compuestos olfativamente activos, los compuestos orgánicos volátiles responsables de la actividad MUSKY y FOUGERE son de alto peso molecular y alto valor umbral, razón por la cual no fueron detectados por GC-O.

En el caso de las demás fragancias, vemos que los resultados de GC-O poseen más notas relevantes que los resultados de PCA y perfil sensorial. Esta diferencia se debe a que la evaluación sensorial se realizó calificando notas sensoriales en las fragancias. Mientras que en GC-O la evaluación se realizó mediante la detección olfativa de compuestos químicos (que luego fueron identificados y asociados a una nota sensorial). Con lo cual, la detección olfativa por GC-O arrojó más información en términos de notas sensoriales que la evaluación realizada por los panelistas.

Además en la mayoría de los casos hay una o dos notas sensoriales que son comunes entre CG-O y PCA. Por ejemplo la fragancia A y G tienen en común la nota FLORAL, la fragancia B las notas EDIBLE y FRUTAL y la fragancia C y H la nota FRUTAL. Esto refleja una relación parcial entre estos dos métodos de evaluación pero que en términos generales no es completa.

Si bien en fragancias, no existe un compuesto clave, es decir que sí solo defina el aroma de una fragancia, las mezclas definidas de algunos de estos compuestos construyen acordes o perfiles específicos que como conjunto ofrecen un aroma único (Jennifer Barstch, 2016).

Por otro lado, los resultados de GC-O permiten caracterizar cada fragancia en el estudio por medio de las materias primas detectadas e identificadas. Esto puede ser de gran ayuda en el área de control de calidad, ya que puede permitir corroborar la conformidad de cada fragancia, evitando el análisis sensorial. Entonces, una vez caracterizada la fragancia por GC-O e identificados los compuestos olfativamente activos (marcadores), estos pueden ser analizados nuevamente para verificar su estado sensorial luego de almacenamiento, transporte y/o utilización. Con esto, el análisis sensorial realizado por panelistas en el área de control de calidad puede ser eliminado y reemplazado por GC-O. De igual manera, el análisis de GC-O puede ser también utilizado para verificar cambios sensoriales debido a la producción de diferentes lotes por medio de estos marcadores. Adicionalmente, el análisis y resultados de GC-O también puede ser relevante para el área de desarrollo de fragancias, en esta área los marcadores pueden ser usados también para resaltar la fragancia como tal. Esto podría ser usado para realizar proclamas en los productos cosméticos y/o de aseo sobre la clasificación sensorial del compuesto.

4. CONCLUSIONES

Como conclusiones de este trabajo, se diseñó y aplicó una metodología basada en las normas técnicas colombianas usadas en la industria de alimentos, para la evaluación sensorial de fragancias y construcción de perfiles sensoriales e diez (10) fragancias comerciales de la familia floral. La evaluación sensorial permitió clasificar las fragancias según sus notas sensoriales características. Los análisis estadísticos de distribución normal, Shapiro-Wilks y ANOVA corroboraron que los resultados de la evaluación sensorial de las fragancias siguen una distribución normal y que existe una diferencia estadística significativa entre las notas sensoriales y entre los panelistas. Esto indicó que es factible aplicar análisis estadístico y paramétrico a las fragancias para validar la evaluación sensorial. También demostró que los panelistas evaluaron de manera diferente cada una las nueve notas sensoriales, al tiempo en que cada nota sensorial tuvo una calificación diferente por cada uno de los panelistas. El análisis multivariado caracterizó y correlacionó por medio de Análisis de Componentes Principales (PCA) las notas sensoriales con las fragancias en el estudio, encontrando que las notas sensoriales predominantes (FLORAL, FRUTAL, CÍTRICO, VERDE, FOUGERE, MUSKY y EDIBLE) estaban asociadas a cada una de las fragancias estudiadas.

El análisis instrumental (CG-MS) permitió identificar 23 compuestos químicos comunes en las fragancias los cuales representaron el 60% p/p en promedio de la formulación de estas. Sin embargo,

no se encontró una relación directa entre estos compuestos y las notas sensoriales características de cada fragancia. Lo anterior se debió a que los resultados del PCA mostraron baja correlación entre él análisis sensorial y el instrumental.

El análisis de GC-O detectó 27 compuestos químicos activos para las diez fragancias de estudio. De estos 27 compuestos, solo tres fueron comunes en cuatro fragancias y 17 de estos son únicos y diferentes en las formulaciones. La clasificación sensorial de los compuestos químicos activos identificados por GC-O no mostraron correlación con las notas características de los perfiles sensoriales de las fragancias. Por lo cual, los compuestos olfativamente activos individuales, no caracterizan el perfil sensorial de las fragancias.

Este estudio identificó y correlacionó las notas sensoriales definidas, con las fragancias empleadas en este trabajo. Sin embargo, no hubo una correlación directa entre los datos instrumentales y los sensoriales. Esto se debe a la alta variabilidad sensorial y de composición química en la formulación de las fragancias.

Entonces el uso de un panel sensorial para la descripción de una fragancia es esencial para su caracterización y aún no puede ser sustituido por los resultados instrumentales. Pero puede ser complementado por el análisis de GC-O. Este estudio demostró que el GC-O puede ser utilizado para declarar la conformidad de fragancias en el área sensorial por medio del uso de los marcadores identificados por GC-O.

Finalmente, este trabajo resulta pionero en el campo de fragancias, mediante la obtención por primera vez de una aproximación a una herramienta estadística para la correlación parcial de datos provenientes del análisis sensorial con información obtenida del análisis instrumental para la clasificación de fragancias de la familia FLORAL.

5. PERSPECTIVAS

El análisis sensorial y el análisis instrumental combinado para fragancias es un enfoque novedoso que puede convertirse en una poderosa herramienta para el desarrollo y caracterización de nuevas fragancias. Este análisis combinado requiere obligatoriamente del uso de herramientas de análisis de datos (i.e. PCA, ANOVA, box-plot, entre otras) las cuales no siempre logran correlacionar la información obtenida entre el análisis sensorial y el instrumental. Esto se debe a que las características sensoriales de las fragancias no dependen de la presencia de sustancias características, sino de mezclas específicas que son difíciles de identificar y clasificar. Por lo tanto, es importante entender el rol de estos compuestos

químicos en la evaluación sensorial de las fragancias.

Entonces el desarrollo de nuevas correlaciones entre el análisis sensorial e instrumental que permitan caracterizar la identidad de una fragancia todavía requiere de desarrollo científico y seguirán siendo un desafío para la academia y la industria.

Por otro lado, refinar el procedimiento en la evaluación sensorial podría facilitar la correlación de este, con el análisis instrumental. Para ello, es necesario aumentar la cantidad de datos utilizando más fragancias de estudio y más datos instrumentales (L. Castro-Vázquez, 2009) (Yildiz, 2022). También, disminuir la cantidad de datos atípicos y cuantificar los datos de GC-O podría facilitar encontrarlas fragancias comunes. Esto permitirá conseguir una mejor definición de las notas sensoriales características de las fragancias. La barrera principal es la adquisición de buenos datos sensoriales, lo cual se puede superar utilizando un panel experto en lugar de un panel entrenado para la evaluación sensorial.

Este tipo de técnicas y análisis han sido muy aplicadas y estudiadas en la industria de alimentos, pero son pocos los reportes enfocados a la industria de las fragancias. Por esta razón, aún es necesario continuar con investigaciones dirigidas a la estandarización de procesos en la evaluación sensorial en la industria de las fragancias.

Esta investigación correlaciona las variables sensoriales e instrumentales en la industria de fragancias, mediante la aplicación de PCA, el cual puede complementarse con otras herramientas computacionales como mapas de calor y regresión de mínimos cuadrados parciales. La aplicación de estas herramientas computacionales puede conllevar a una mejor interpretación de las mezclas de sustancias que caracterizan las fragancias, por lo que también requiere de desarrollo científico.

6. BIBLIOGRAFÍA

Amanda Maldo Paula, A. C.-S. (2014). Texture profile and correlation between sensory and instrumental analyses on extruded snacks. *Journal of Food Engineering*, 9-14.

Andriamaharavo, N. (2014). *NIST Mass Spectrometry Data Center*. Obtenido de Retention Data. NIST Mass Spectrometry Data Center: https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C1222055&Units=SI&Mask=2000#ref-1

Andriamaharavo, N. (2014). Retention Data. NIST Mass Spectrometry Data Center. *NIST Mass Spectrometry Data Center*.

Asuming, W., Beauchamp, P., Descalzo, J., Dev, B., Dev, V., Frost, S., & Ma, C. (2005). Essential oil composition of four Lomatium Raf. species and their chemotaxonomy. *Biochem. Syst. Ecol.*, 17-26.

Chao Wang, J. L. (2022). Pu-erh tea unique aroma: Volatile components, evaluation methods and metabolic mechanism of key odor-active compounds. *Trends in Food Science & Technology*, 25-37.

David, F., Scanlan, F., & Sandra, P. (2000). *Retention time locking in flavor analysis*. Obtenido de Proceedings 23rd ISCC: http://www.richrom.com/assets/CD23PDF

Diana Martín Rojas, C. O. (2018). Flavoromics approach to differentiate three edible Tacsonia (Passifloraceae) fruit species. *European Food Research and Technology*, 695-703.

Diazaraque, J. M. (17 de Febrero de 2021). *Universidad Carlos III de Madrid.* Obtenido de Universidad Carlos III de Madrid: http://halweb.uc3m.es/esp/Personal/personas/jmmarin/esp/AMult/tema3am.pdf

Efenberger-Szmechtyk M, N. A. (2018). Implementation of chemometrics in quality evaluation of food and beverages. *Crit Rev Food Sci Nutr.* , 1747-1766.

Escudero, A., Campo, E., Fariña, L., Cacho, J., & Ferreira, V. (2007). Analytical Characterization of the Aroma of Five Premium Red Wines. Insights into the Role of Odor Families and the Concept of Fruitiness of Wines. *J. Agric. Food Chem.*, 4501-4510.

Ferhat, M., Meklati, B., & Chemat, F. (2007). Comparison of different isolation methods of essential oil from Citrus fruits: cold pressing, hydrodistillation and microwave dry distillation. *Flavour Fragr. J.*, 494-504.

Grujic-Jovanovic, S., Skaltsa, H., Marin, P., & Sokovic, M. (2004). Composition and antibacterial activity of the essential oil of six Stachys species from Serbia. *Flavour Fragr. J.*, 139-144.

Haroldo Lobo, L. M.-F.-M. (2021). Bioaccumulation and chronic toxicity of arsenic and zinc in the aquatic oligochaetes Branchiura sowerbyi and Tubifex tubifex (Annelida, Clitellata). *Aquatic Toxicology*, Volume 239.

Hazzit, M., Baaliouamer, A., Faleiro, M., & Miguel, M. (2006). Composition of the Essential Oils of Thymus and Origanum Species from Algeria and Their Antioxidant and Antimicrobial Activities. *J. Agric. Food Chem.*, 6314-6321.

ICONTEC. (16 de Diciembre de 2004). *Análisis Sensorial. Directrices Para El Uso De Escalas De*

Respuesta Cuantitativas. Obtenido de Norma técnica Colombiana NTC 5328: https://ecollection-icontec-org.ezproxy.unal.edu.co/normavw.aspx?ID=4545

ICONTEC. (28 de Junio de 2006). *Análisis Sensorial. Metodología. Prueba Triangular.* Obtenido de Norma técnica Colombiana NTC 2681: https://ecollection-icontec-org.ezproxy.unal.edu.co/normavw.aspx?ID=1898

ICONTEC. (18 de Abril de 2012). *Análisis Sensorial. Vocabulario.* Obtenido de Norma Técnica Colombiana NTC 3501: https://ecollection-icontec-org.ezproxy.unal.edu.co/normavw.aspx?ID=2561

ICONTEC. (20 de Agosto de 2014). *Análisis Sensorial. Metodología. Guía General .* Obtenido de Guía técnica Colombiana GTC 165: https://ecollection-icontec-org.ezproxy.unal.edu.co/normavw.aspx?ID=90

ICONTEC. (23 de Septiembre de 2015). *Análisis sensorial. Metodología. Directrices para monitorear el desempeño de un panel sensorial cuantitativo.* Obtenido de ICONTEC: https://tienda.icontec.org/gp-analisis-sensorial-metodologia-directrices-para-monitorear-el-desempeno-de-un-panel-sensorial-cuantitativo-gtc258-2015.html

ICONTEC. (22 de Julio de 2015). *Análisis Sensorial. Metodología. Ordenamiento De Acuerdo Con Un Criterio Específico (Ranking).* Obtenido de Norma técnica Colombiana NTC 3930: https://ecollection-icontec-org.ezproxy.unal.edu.co/normavw.aspx?ID=2973

ICONTEC. (16 de Agosto de 2017). *Análisis Sensorial. Directrices Para La Selección, Entrenamiento Y Seguimiento De Evaluadores Sensoriales Seleccionados Y Expertos.* Obtenido de Guía técnica Colombiana GTC 280: https://ecollection-icontec-org.ezproxy.unal.edu.co/normavw.aspx?ID=211

ICONTEC. (20 de Mayo de 2020). *Análisis sensorial, metodología, guía general para el establecimiento de un perfil sensorial.* Obtenido de Guía técnica Colombiana GTC 232: https://ecollection-icontec-org.ezproxy.unal.edu.co/normavw.aspx?ID=78709

Isidorov, V., Krajewska, U., Dubis, E., & Jdanova, M. (2001). Partition coefficients of alkyl aromatic hydrocarbons and esters in a hexane-acetonitrile system. *J. Chromatogr. A*, 127-136.

Isidorov, V., Krajewska, U., Dubis, E., & Jdanova, M. (2001). Partition coefficients of alkyl aromatic hydrocarbons and esters in a hexane-acetonitrile system. *J. Chromatogr. A*, 127-136.

Jalali-Heravi, M., Zekavat, B., & Sereshti, H. (2006). Characterization of essential oil components of

Iranian geranium oil using gas chromatography-mass spectrometry combined with chemometric resolution techniques. *J. Chromatogr. A*, 154-163.

Jennifer Barstch, E. U. (2016). Analysis od odour compounds from scented consumer products using gas chromatography-mass spectrometry and gas chromatography-olfactometry. *Analytica Chimica Acta*, 98-106.

Jiayuan Zhao, J. L. (2006). Chemical composition of the volatiles of three wild Bergenia species from western China. *Flavour Fragr. J.*, 431-434.

Jinda Zhuang, Q. X.-T. (2020). Comparative flavor profile analysis of four different varieties of Boletus mushrooms by instrumental and sensory techniques. *Food Research International*, 0963-9969.

Joel Kowalewski, A. R. (2020). Predicting Human Olfactory Perception from Activities of Odorant Receptors. *iScience*, Volume 23, Issue 8.

Karunasekara, T. y. (2012). Determination of descriptors for fragrance compounds by gas chromatography and liquid–liquid partition. *Journal of Chromatography*, 159– 165.

Kim, M. y. (2017). Defining gu-soo perception in Doenjang (fermented soybean paste) using consumer tests with limited sensory modality and instrumental analysis. *Food Chemistry*, 0210-0216.

Kukic, J. &. (2006). Composition of essential oil of Stachys alpina L. ssp dinarica Murb. *Flavour Fragr. J.*, 539-542.

Kundakovic, T., Fokialakis, N., Kovacevic, N., & Chinou, I. (2007). Essential oil composition of Achillea lingulata and A. umbellata. *Flavour Fragr. J.*, 184-187.

L. Castro-Vázquez, M. D.-M.-V.-C. (2009). Differentiation of monofloral citrus, rosemary, eucalyptus, lavender, thyme and heather honeys based on volatile composition and sensory descriptive analysis. *Food Chemistry*, 1022-1030.

Lewis-Beck, M. B. (2003). Encyclopedia for research methods for the social sciences. *Thousand Oaks (CA)*, 792-795.

Lindsay, I. (2002). *A tutorial on Principal Components Analysis.* Obtenido de A tutorial on Principal Components Analysis.: http://www.cs.otago.ac.nz/cosc453/student_tutorials/principal_components.pdf

Lucky Ahmeda, Y. Z. (2018). Molecular mechanism of activation of human musk receptors OR5AN1 and OR1A1 by (R)-muscone and diverse other musk-smelling compounds. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, E3950-E3958.

M. Vilanova, E. C. (2012). Volatile composition and sensory properties of Vitis vinifera red cultivars from North West. *Analytica Chimica Acta*, 104-111.

Margaret A. Cliff, M. B. (2018). Inter-correlation of apple firmness determinations and development of cross-validated regression models for prediction of sensory attributes from instrumental and compositional analyses. *Food Research International*, 752-762.

Margareth Santander, F. V. (2021). Enhancement of fine flavour cocoa attributes under a controlled postharvest process. *Food Research International*, Volume 143.

Maria Guć, M. C. (2021). Application of FAPA mass spectrometry for analysis of fragrance ingredients used in cosmetics. *Measurement*, Volume 168.

Maria Laura Corollaro, E. A. (2014). A combined sensory-instrumental tool for apple quality evaluation. *Postharvest Biology and Technology*, 135-144.

Mina K. Kim, H. W.-G. (2017). Sensory and instrumental volatile flavor analysis of commercial orange juices prepared by different processing methods. *Food Chemistry*, 217–222.

Mina K. Kim, Y. Y.-g. (2019). Instrumental volatile flavor analysis of omija (Schisandra chinesis Baillon) using headspace stir-bar sorptive extraction-gas chromatography-mass spectrometry and its relationship to human sensory perceptions. *Food Research International*, 650-655.

Mina K. Kim, Y.-Y. L.-g. (2018). Instrumental volatile flavor analysis of omija (Schisandra chinesis Baillon) using headspace stir-bar sorptive extraction-gas chromatography-mass spectrometry and its relationship to human sensory perceptions. *Food Research International*, 650–655.

Minnaard, C. C. (16 de Febrero de 2021). *Los Gráficos de Caja: Un Recurso Innovador*. Obtenido de Los Gráficos de Caja: Un Recurso Innovador: https://rieoei.org/historico/deloslectores/experiencias93.html

N. Lassoued, J. D. (2008). Baked product texture: Correlations between instrumental and sensory characterization using Flash Profile. *Journal of Cereal Science*, 133–143.

Nuket Kartal, M. S. (2007). Investigation of the antioxidant properties of Ferula orientalis L. using a suitable extraction procedure. *Food Chem.*, 584-589.

Pamela Andreani, J. O. (2019). Spectrum crispness sensory scale correlation with instrumental acoustic high-sampling rate and mechanical analyses. *Food Research International*, 0963-9969.

Pino, J., Mesa, J., Muñoz, Y., Martí, M., & Marbot, R. (2005). Volatile components from mango

(Mangifera indica L.) cultivars. *J. Agric. Food Chem.*, 2213-2223.

Purba Chakraborty, U. S. (2021). Effect of milk composition on sensory attributes and instrumental properties of Indian Cottage Cheese (Chhana). *NFS Journal*, 8-16.

Radulovic, N., Dordevic, N., Markovic, M., & Palic, R. (2010). Volatile constituents of Glechoma Hirsuta Waldst. Kit. and G. Hederacea L. (Lamiaceae). *Bull. Chem. Soc. Ethiop.*, 67-76.

Saroglou, V., Arfan, M., Shabir, A., Hadjipavlou-Litina, D., & Skaltsa, H. (2007). Composition and antioxidant activity of the essential oil of Teucrium royleanum Wall. ex Benth growing in Pakistan. *Flavour Fragr. J.*, 154-157.

Setzer, W., Noletto, J., & Lawton, R. (2006). Chemical composition of the floral essential oil of Randia matudae from Monteverde, Costa Rica. *Flavour Fragr. J.*, 244-246.

Shang, C., Hu, Y., Deng, C., & Hu, K. (2002). Rapid determination of volatile constituents of Michelia alba flowers by gas chromatography-mass spectrometry with solid-phase microextraction. *J. Chromatogr. A*, 283-288.

Siran Liu, Y. Z. (2019). Determination of 27 fragrances in cosmetics and perfume raw materials by gas chromatography-mass spectrometry. *Se Pu*, 1026-1033.

Spiegel, M. S. (2007). *Análisis de la varianza, Probabilidad y Estadística.* México D.F.: McGraw-Hill.

Tesevic, V., Nikicevic, N., Jovanovic, A., Djokovic, D., Vujisic, L., Vuckovic, I., & Bonic, M. (2005). Volatile components from old plum brandies. *Food Technol. Biotechnol.*, 367-372.

U. Bernabucci, L. B. (2015). Effect of summer season on milk protein fractions in Holstein cows. *Journal of Dairy Science*, 1815-1827.

Utshab Kumar Ghosh, F. A. (2022). Most dominant metabolomic biomarkers identification for lung cancer. *Informatics in Medicine Unlocked*, Volume 28.

Vagionas, K., Ngassapa, O., Runyoro, D., Graikou, K., Gortzi, O., & Chinou, I. (2007). Chemical analysis of edible aromatic plants growing in Tanzania. *Food Chem.*, 1711-1717.

Yildiz, O. G. (2022). Floral authentication of some monofloral honeys based on volatile composition and physicochemical parameters. *Eur Food Res Technol* , 2145–2155.

Zeng, Y.-X., Zhao, C.-X., Liang, Y.-Z., Yang, H., Fang, H.-Z., Yi, L.-Z., & Zeng, Z.-D. (2007). Comparative analysis of volatile components from Clematis species growing in China. *Anal. Chim. Acta*, 328-339.

Zili Liu, X. D. (2013). Relationship between the Differences of Odor Detection Threshold Values

Measured by Different Methods and some of the Physicochemical Properties. *Advanced Materials Research*, 451-455.

7. ANEXO A Formato de evaluación sensorial online

EVALUACIÓN SENSORIAL FRAGANCIAS

EVALUACIÓN DE FRAGANCIA: 399

Evalue sensorialmente la fragancia

1. Ingrese su nombre:

2. Floral

Ausente Muy fuerte

3. Frutal

Ausente Muy fuerte

4. Aldehídica

Ausente Muy fuerte

5. Verde

Ausente Muy fuerte

6. Cítrica

Ausente Muy fuerte

7. Fougere

Ausente Muy fuerte

8. Musky

Ausente Muy fuerte

9. Edible

Ausente Muy fuerte

10. Madera

Ausente Muy fuerte

11. Comentarios adicionales

8. ANEXO B Resultado y perfil sensorial sin depurar

Tabla B 1 Resultado sensorial de la fragancia B sin depurar

Fragancia	Fragancia B								
Códigos aleatorios	819, 951, 111								
Panelista	Floral	Frutal	Aldehídico	Verde	Cítrico	Fougere	Musky	Edible	Madera
1	42,5	72,0	14,5	31,5	15,5	69,0	26,0	40,0	18,5
2	18,7	46,5	29,0	24,7	38,0	48,7	22,0	15,5	21,0
3	8,0	23,3	12,3	8,7	33,3	22,7	51,3	41,3	3,3
4	41,7	63,3	45,0	65,3	49,7	73,5	31,7	56,7	28,3
5	49,3	55,3	34,7	37,7	63,3	53,3	57,0	65,0	44,0
6	58,7	100,0	0,0	67,3	60,0	59,5	30,5	58,7	47,3
7	33,7	62,0	27,0	45,3	63,0	62,3	59,3	35,0	**55,7**
8	37,7	32,0	13,7	23,3	24,3	43,0	68,7	80,7	21,3
9	0,0	12,7	0,0	0,0	5,3	0,0	13,0	77,3	16,0
10	11,3	30,7	4,7	3,7	18,0	38,0	24,7	50,7	0,0
11	31,3	70,0	15,0	18,5	40,3	18,0	34,7	47,7	9,0
12	6,7	39,7	8,7	4,0	9,7	14,3	35,0	63,3	14,7
13	24,0	81,0	25,0	48,0	56,0	19,0	44,0	62,0	24,0
Promedio	28	53	18	29	37	40	38	53	23

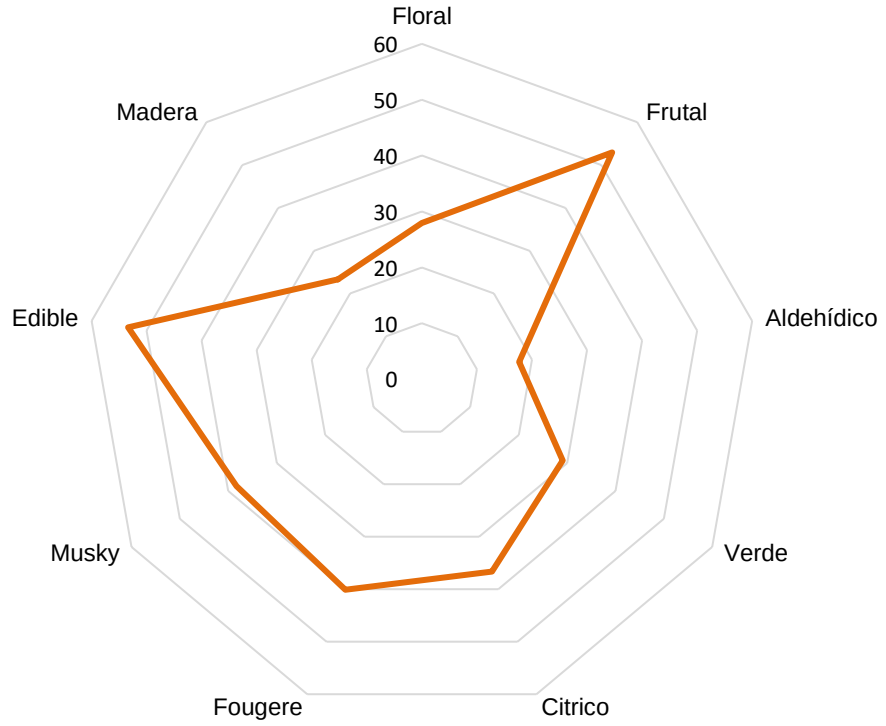

Figura B 1 Perfil sensorial de la fragancia B realizada por los panelistas en la evaluación sensorial sin depurar

9. ANEXO C Diagramas de normalidad

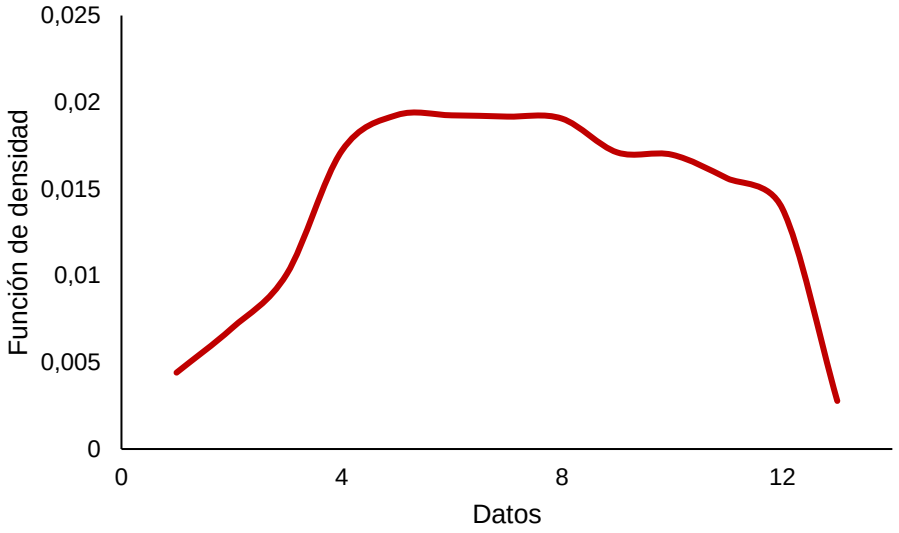

Figura C 1 Distribución normal para la fragancia A de la nota sensorial CÍTRICO

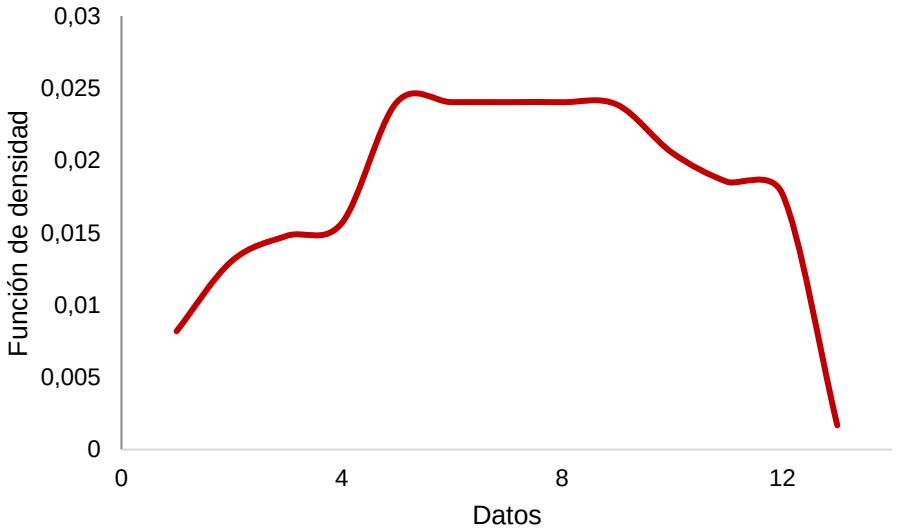

Figura C 2 Distribución normal para la fragancia A de la nota sensorial MADERA

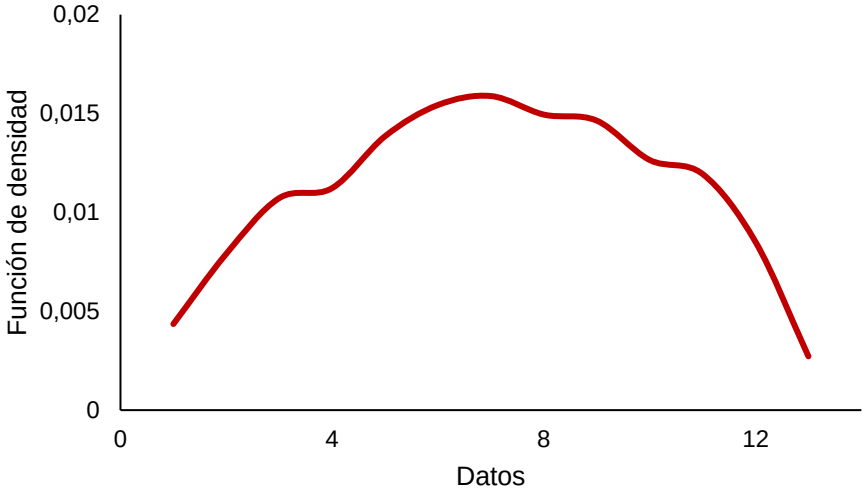

Figura C 3 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial FRUTAL

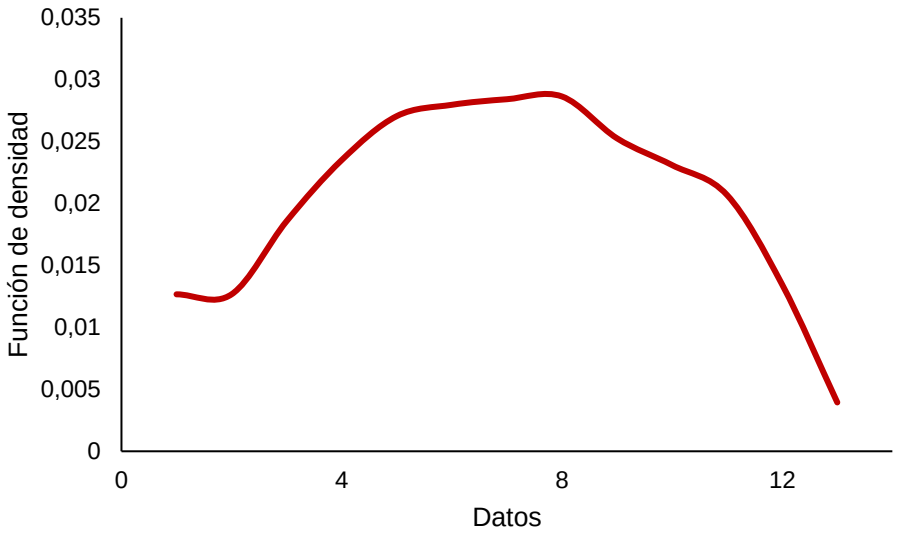

Figura C 4 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial ALDEHÍDICO

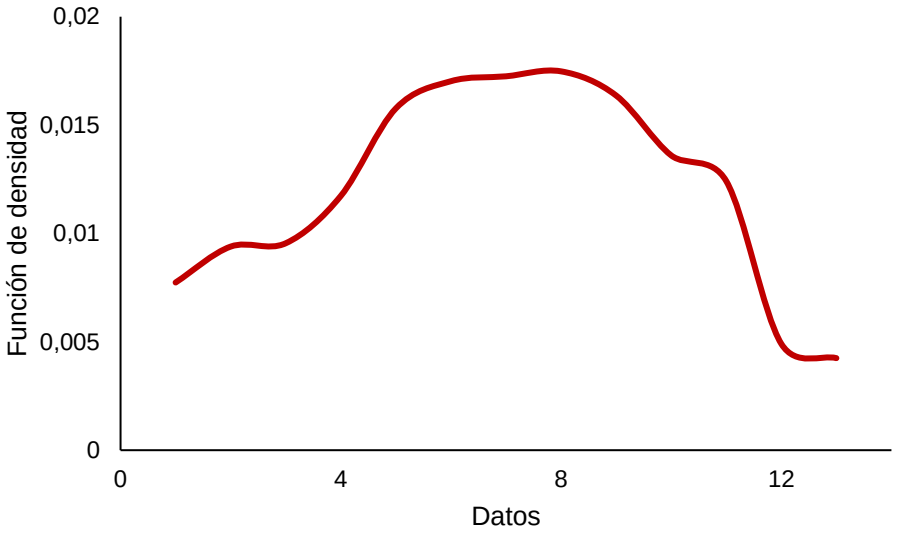

Figura C 5 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial VERDE

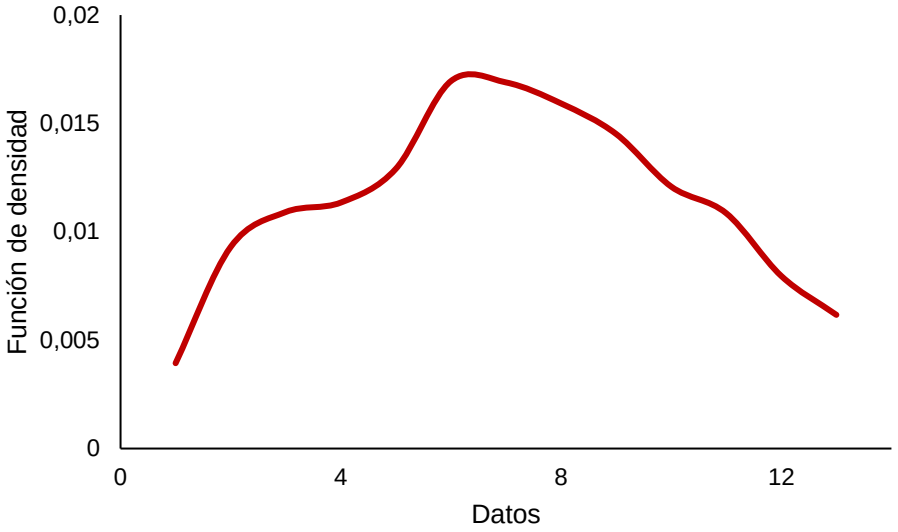

Figura C 6 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial FOUGERE

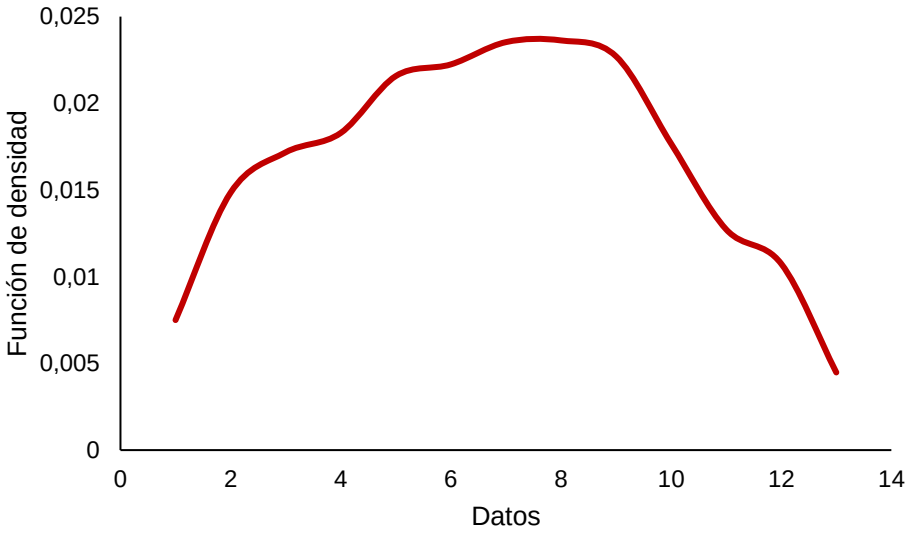

Figura C 7 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial MUSKY

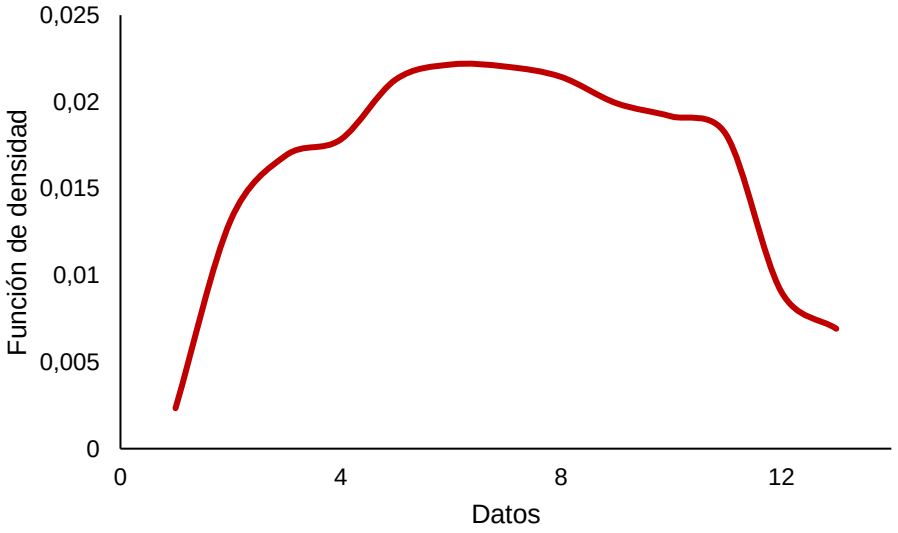

Figura C 8 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial EDIBLE

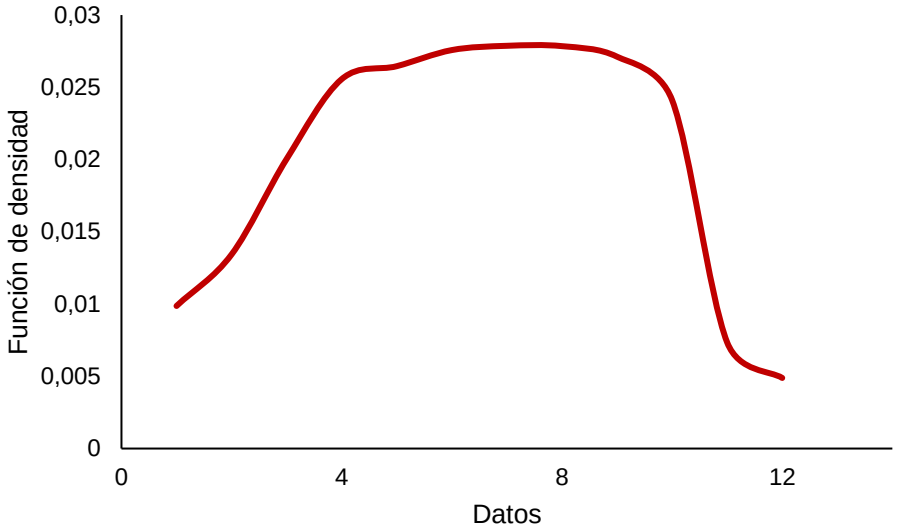

Figura C 9 Distribución normal para la fragancia B de la nota sensorial MADERA

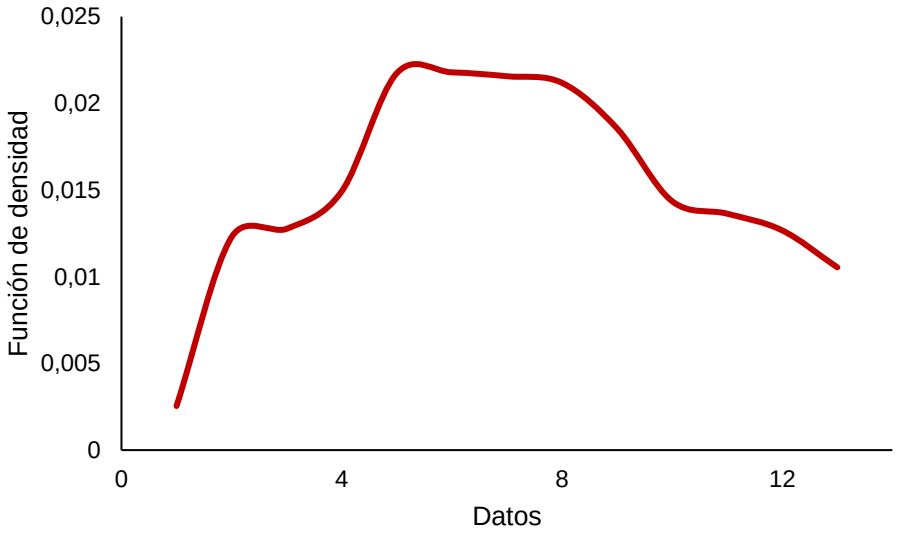

Figura C 10 Distribución normal para la fragancia C de la nota sensorial CÍTRICO

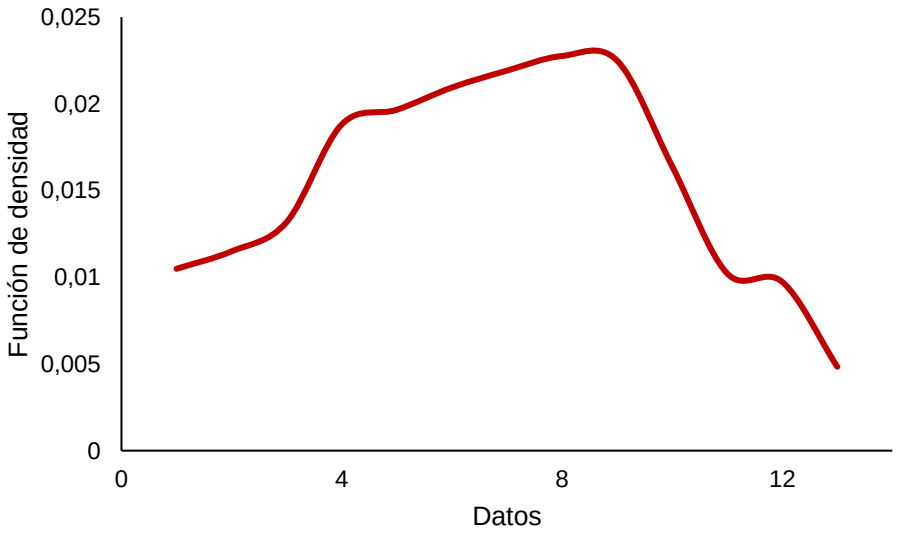

Figura C 11 Distribución normal para la fragancia C de la nota sensorial MADERA

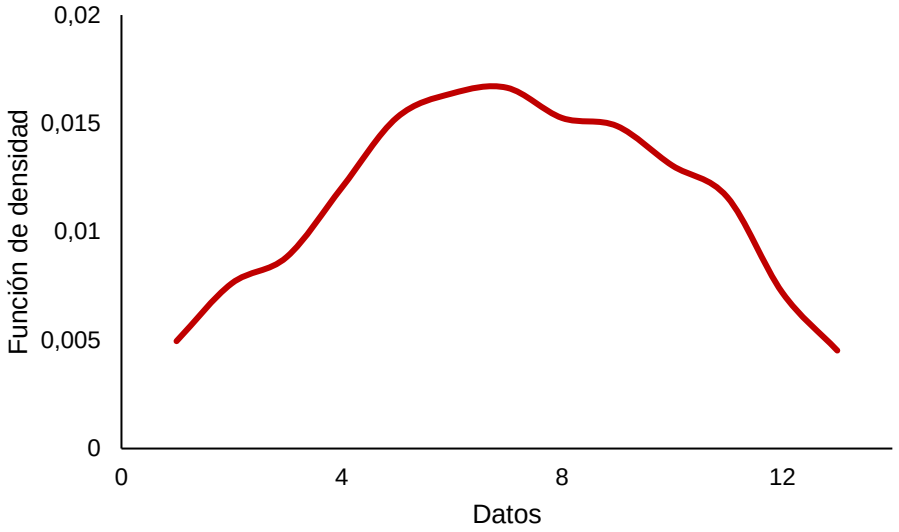

Figura C 12 Distribución normal para la fragancia D de la nota sensorial CÍTRICO

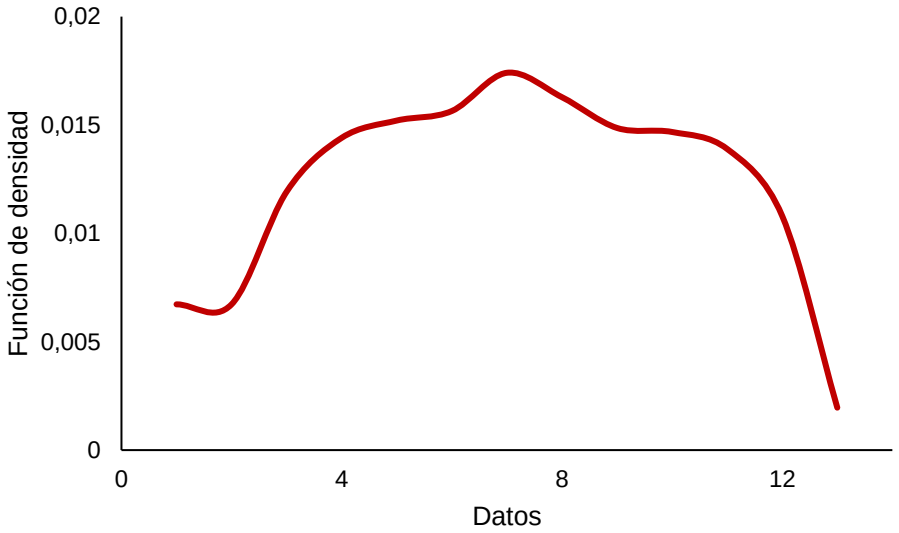

Figura C 13 Distribución normal para la fragancia D de la nota sensorial MADERA

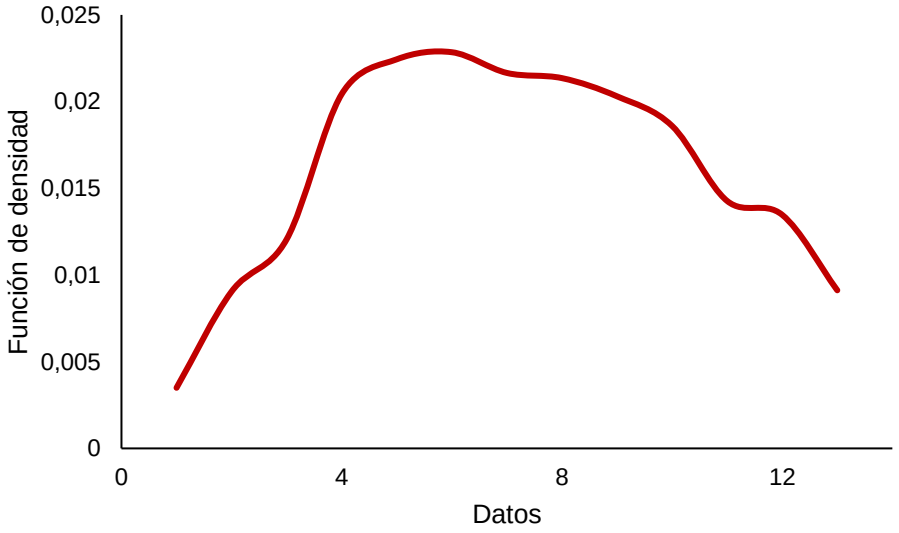

Figura C 14 Distribución normal para la fragancia E de la nota sensorial CÍTRICO

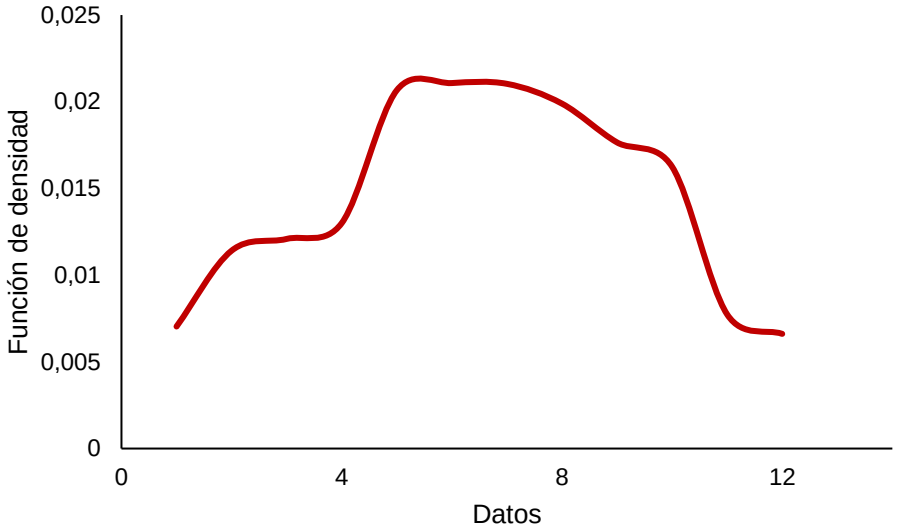

Figura C 15 Distribución normal para la fragancia E de la nota sensorial MADERA

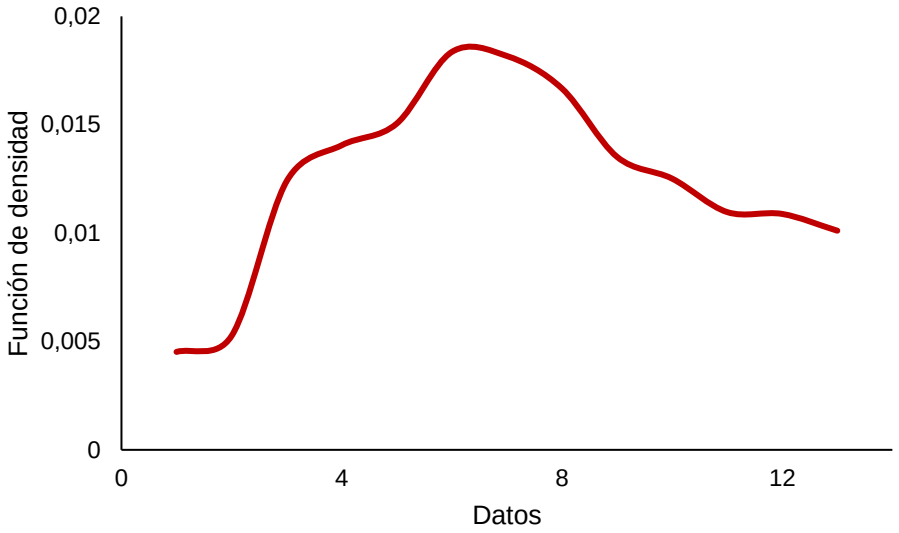

Figura C 16 Distribución normal para la fragancia F de la nota sensorial CÍTRICO

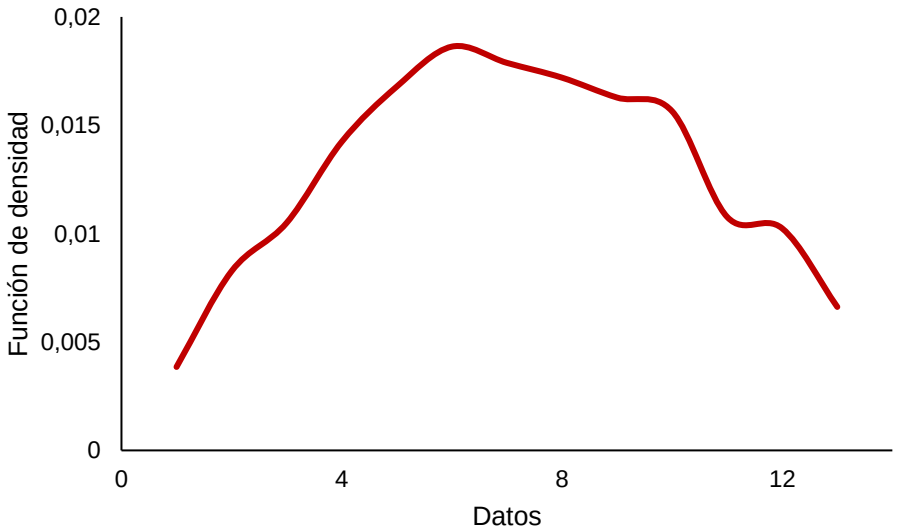

Figura C 17 Distribución normal para la fragancia F de la nota sensorial MADERA

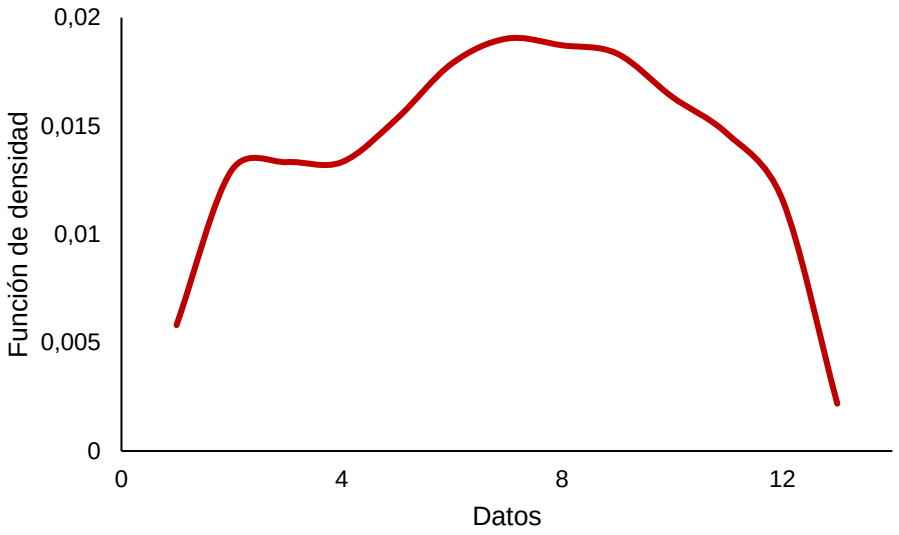

Figura C 18 Distribución normal para la fragancia G de la nota sensorial CÍTRICO

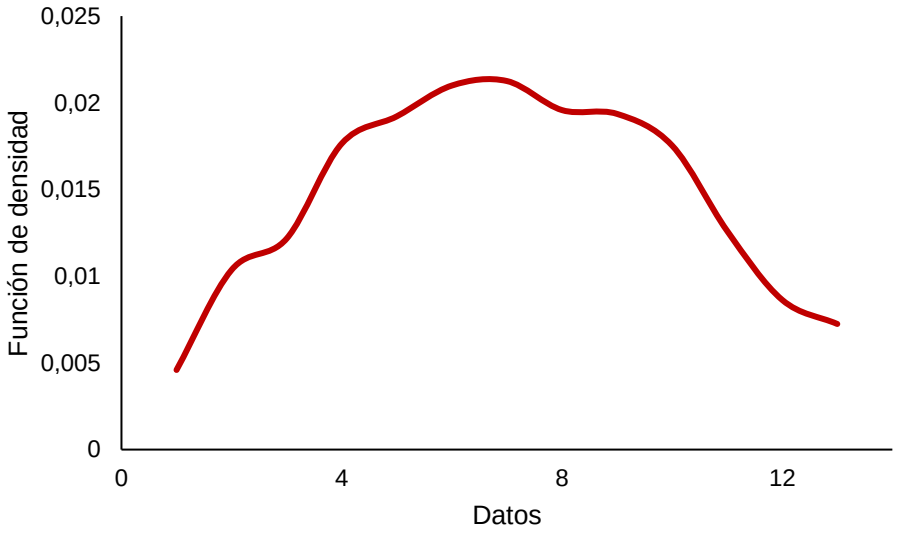

Figura C 19 Distribución normal para la fragancia G de la nota sensorial MADERA

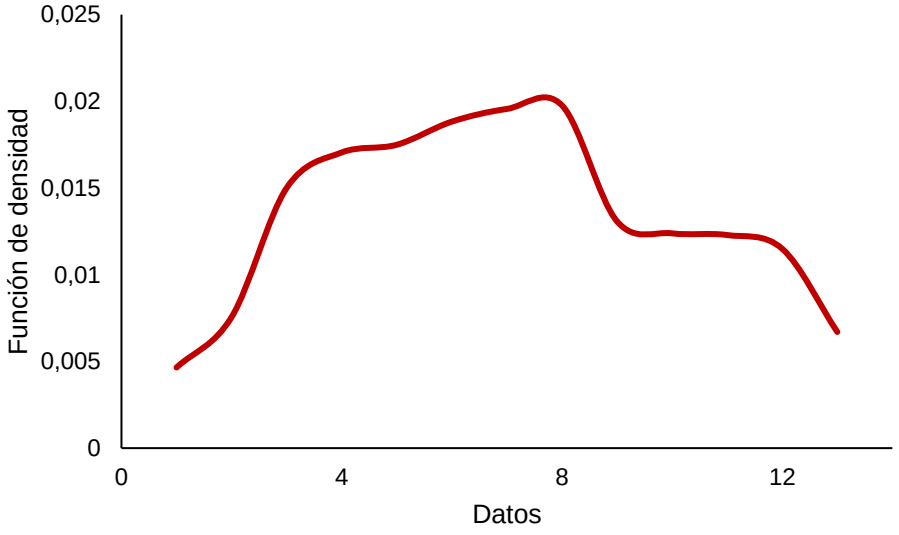

Figura C 20 Distribución normal para la fragancia H de la nota sensorial CÍTRICO

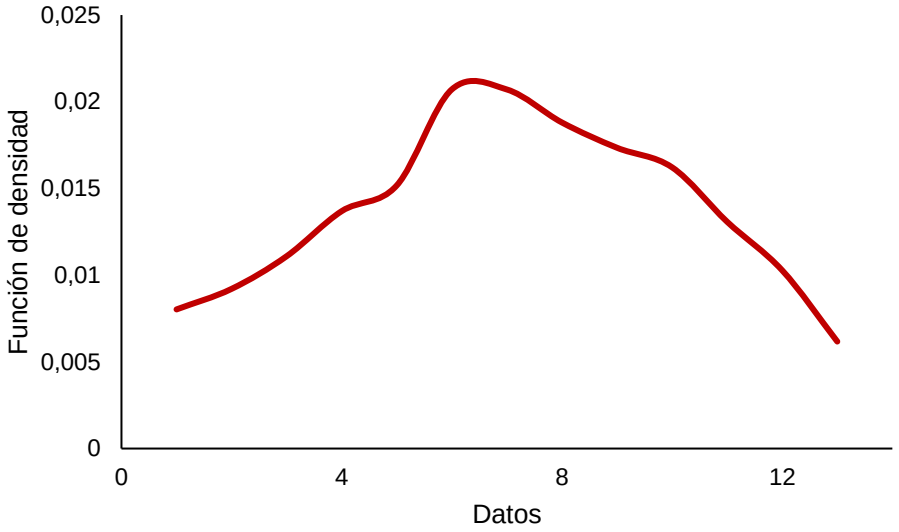

Figura C 21 Distribución normal para la fragancia H de la nota sensorial MADERA

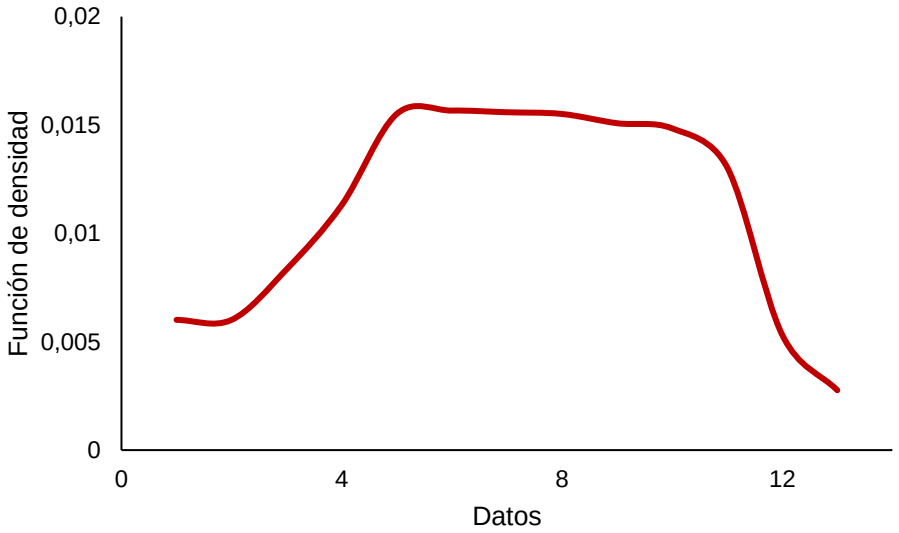

Figura C 22 Distribución normal para la fragancia I de la nota sensorial CÍTRICO

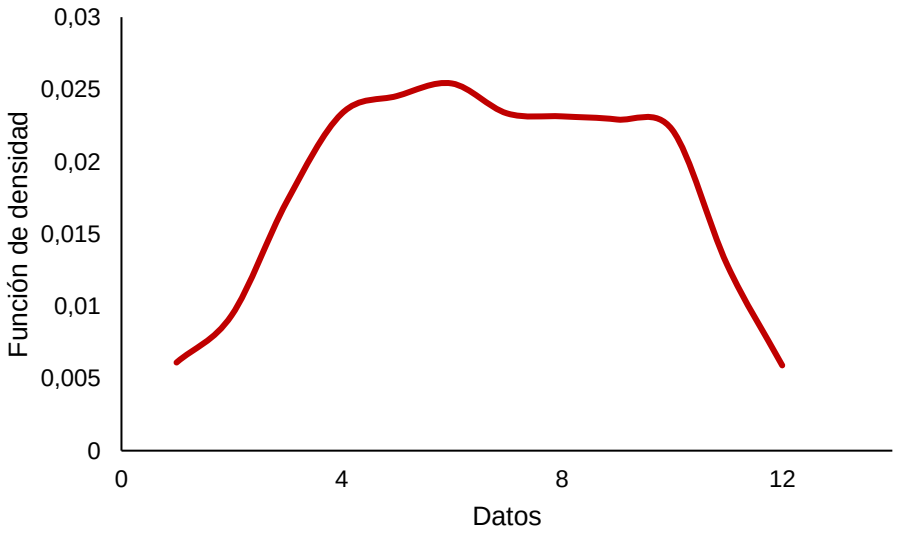

Figura C 23 Distribución normal para la fragancia I de la nota sensorial MADERA

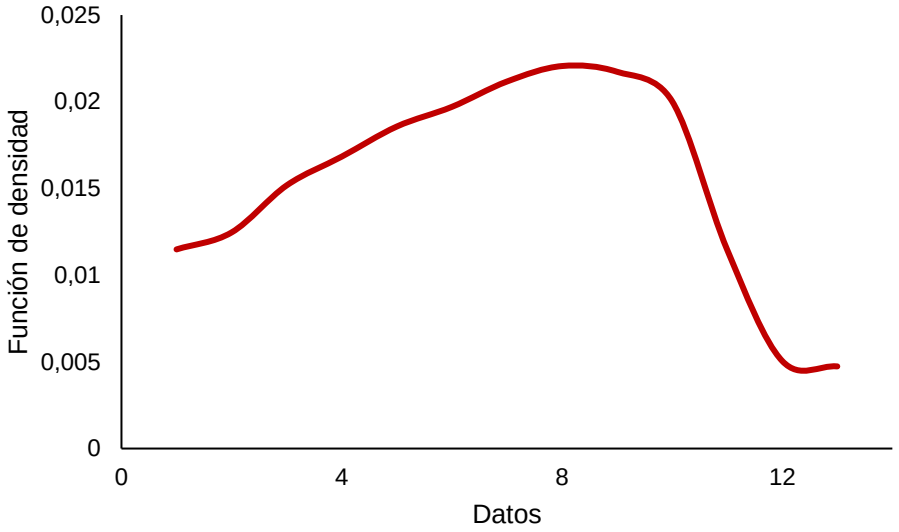

Figura C 24 Distribución normal para la fragancia J de la nota sensorial CÍTRICO

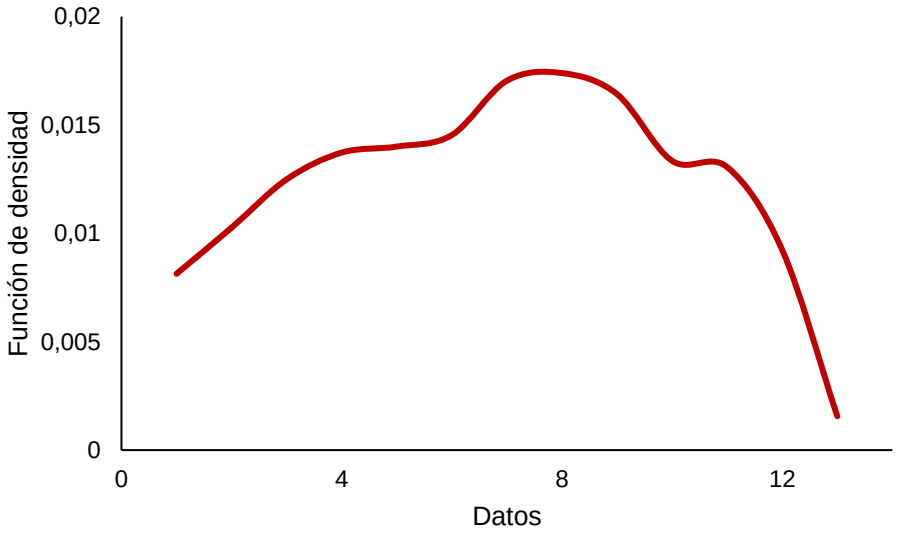

Figura C 25 Distribución normal para la fragancia J de la nota sensorial MADERA

10. ANEXO D Resultados y perfiles sensoriales depurados

Tabla D 1 Resultados sensoriales de la fragancia A

Fragancia	Fragancia A								
Códigos aleatorios	399, 140, 438								
Panelista	Floral	Frutal	Aldehídica	Verde	Cítrico	Fougere	Musky	Edible	Madera
1			26,3		38,7		43,3	14,3	44,3
2	37,3		24,7	50,3	46,0	52,3		5,7	17,0
3	35,3	16,7	20,3	18,3		45,0	24,7	8,7	
4	63,3	12,3		46,7	36,3	32,7	32,7	30,0	41,7
5	66,0	37,0	34,7	46,7	37,7		42,7		32,0
6	63,3		20,7		36,7	47,7			
7	39,3		27,0	37,3		68,0		37,7	45,3
8	60,3	28,0	24,7	26,7		64,3		11,7	32,3
9			20,0			42,7			32,3
10	35,7	9,3	21,3	20,7	25,7	31,3	26,0		
11	66,0	26,0		31,0	49,0		22,0	12,3	34,3
12				19,7					16,0
13	69,7	37,3	36,0	48,7	45,7	51,7	39,0		32,7
Promedio	54	24	26	35	39	48	33	17	33
Mediana	62	26	25	34	38	48	33	12	33
Primer Cuartíl (Q1)	38	15	21	22	37	43	25	10	32
Tercer Cuartíl (Q3)	65	33	27	47	46	52	41	22	40
Rango Intercuartílico (RIC)	27	18	6	25	9	9	16	12	8
Límite inferior (Q1*10%)	34	13	19	20	33	38	23	9	29
Límite superior (Q3*10%)	72	36	30	51	50	58	45	24	44

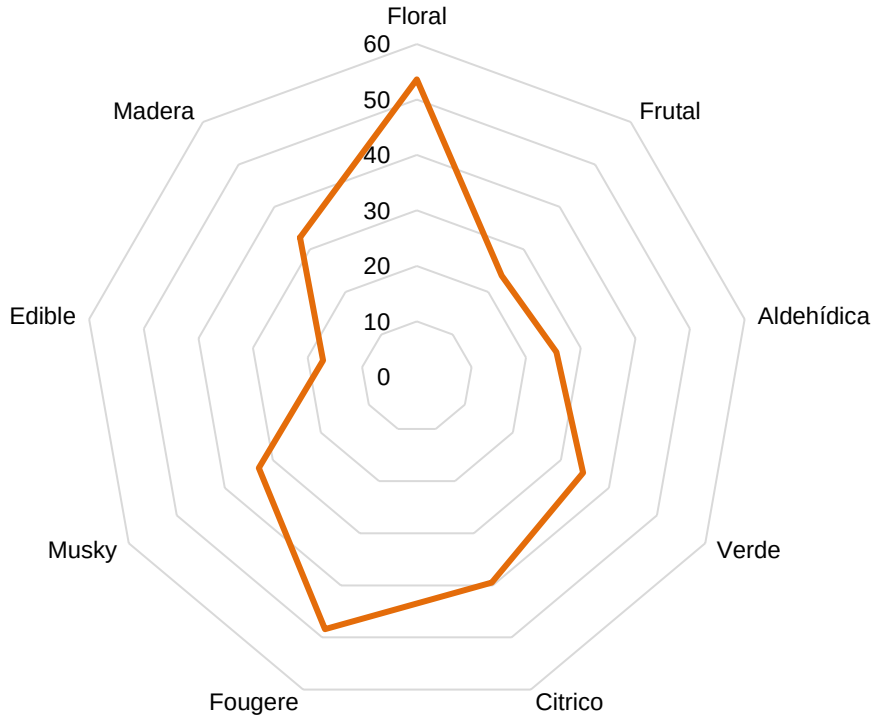

Figura D 1 Perfil sensorial de la fragancia A realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 2 Resultados sensoriales de la fragancia C

Fragancia	Fragancia C								
Códigos aleatorios	416, 177, 657								
Panelista	Floral	Frutal	Aldehídica	Verde	Cítrico	Fougere	Musky	Edible	Madera
1	12,5	77,5	22,0	31,5	36,5		47,5	31,5	28,5
2			23,5	40,0	40,7	37,7	31,7	20,7	16,3
3	13,7		27,0	54,0					
4	27,7	74,0			38,7	40,0	19,7	32,3	48,0
5		54,7	25,7	28,3	54,7		49,0		
6			20,0		48,3	53,3	44,5		
7	27,0	64,7	22,7	42,7	60,0	42,7	49,0	32,3	40,0
8	28,7	66,7		36,0	42,3	50,3	39,0	31,0	21,0
9			26,7	20,3					18,7
10	34,0	57,0			22,0		22,3	13,7	
11	33,7	60,3	22,3		55,7	20,7	48,7	38,3	15,0
12						10,7	18,0		
13	33,0	56,0			57,0	42,0	35,0		26,0
Promedio	26	64	24	36	46	37	37	29	27
Mediana	28	63	23	36	45	41	39	32	24
Primer Cuartíl (Q1)	24	57	22	30	39	33	27	26	18
Tercer Cuartíl (Q3)	33	69	26	41	55	45	48	32	31
Rango Intercuartílico (RIC)	9	12	4	11	16	12	21	6	13

Límite inferior (Q1*10%)	21	51	20	27	35	30	24	23	16
Límite superior (Q3*10%)	36	75	29	45	61	49	53	36	35

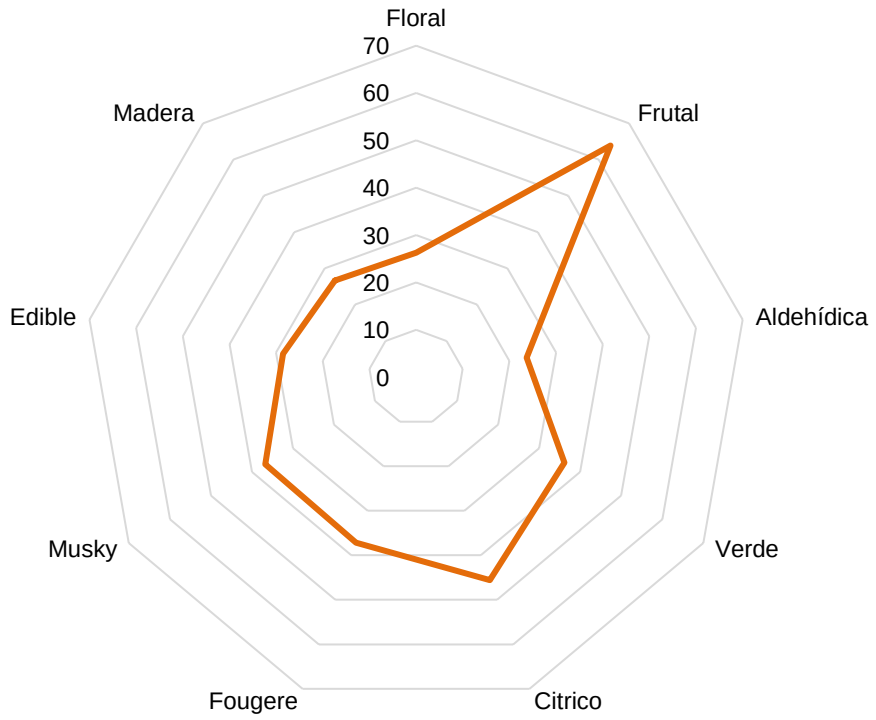

Figura D 2 Perfil sensorial de la fragancia C realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 3 Resultados sensoriales de la fragancia D

Fragancia	**Fragancia D**								
Códigos aleatorios	**387, 669, 958**								
Panelista	**Floral**	**Frutal**	**Aldehídica**	**Verde**	**Cítrico**	**Fougere**	**Musky**	**Edible**	**Madera**
1	12,5	64,5	19,0	25,5	25,0	59,0	41,0	41,0	44,5
2	25,0	66,7	22,0	34,0	44,0	46,7	34,0	28,0	19,7
3	12,3		9,0		40,0			25,0	
4		43,3			34,3	64,3	34,0	31,3	47,0
5		62,3		37,0	64,7	56,3		36,7	45,0
6	37,5		17,0	41,0		52,5		42,0	
7	48,3	55,0	11,7	37,0	54,3	61,0			
8	22,3	39,0	8,0	33,7	61,0	65,0			31,0
9	12,0								
10	27,3	38,7		12,7		26,0	35,3	34,0	
11	32,3	41,7	24,3	8,3	55,7	28,7	47,0	28,7	17,5
12	13,0		10,7				32,0	27,0	21,0
13				38,0		66,0	43,0		40,0
Promedio	24	51	15	30	47	53	38	33	33
Mediana	24	49	14	34	49	58	35	31	36

Primer Cuartíl (Q1)	13	41	10	26	39	48	34	28	21
Tercer Cuartíl (Q3)	31	63	20	37	57	64	42	37	45
Rango Intercuartílico (RIC)	18	22	10	12	18	15	8	9	24
Límite inferior (Q1*10%)	11	37	9	23	35	43	31	25	19
Límite superior (Q3*10%)	34	69	22	41	63	70	46	40	49

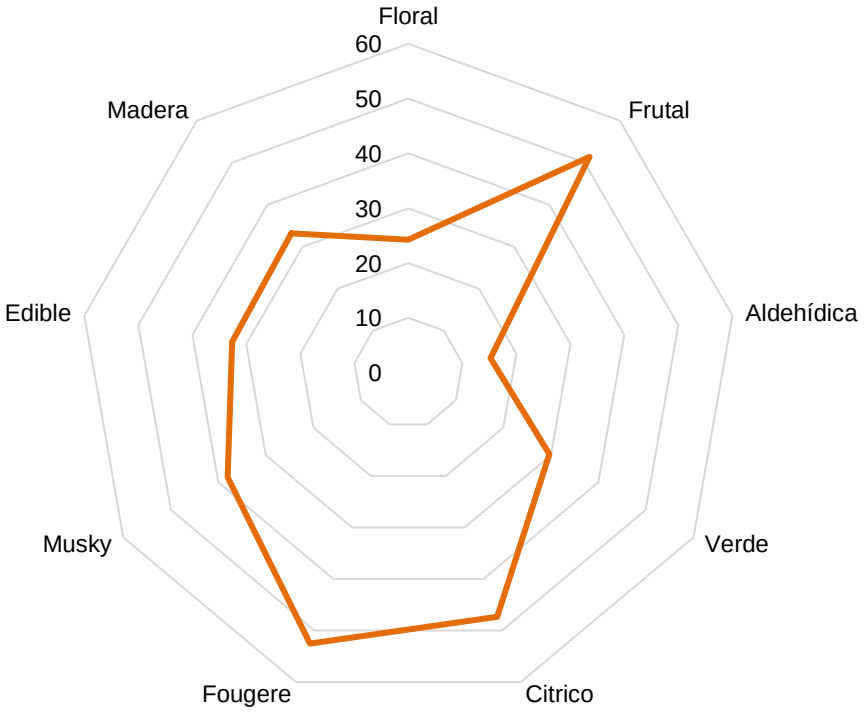

Figura D 3 Perfil sensorial de la fragancia D realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 4 Resultados sensoriales de la fragancia E

Fragancia	**Fragancia E**								
Códigos aleatorios	**642, 984, 970**								
Panelista	**Floral**	**Frutal**	**Aldehídica**	**Verde**	**Cítrico**	**Fougere**	**Musky**	**Edible**	**Madera**
1		39,7		14,3	39,7		51,7	36,7	
2	55,0	32,0	24,0	45,3	42,3	67,7	31,0	6,5	23,7
3		14,0			25,3	53,7	36,7		
4	63,0	20,7			45,0	50,7	36,7	25,7	39,3
5	63,3		26,3	33,0				39,0	
6	46,5				30,0	62,0			
7	54,7		28,3	42,3		56,0	51,7	21,0	41,7
8	59,0	27,0		37,3	32,0	45,7			30,0
9	34,0					21,0			

10			20,0	10,0			30,7		9,3
11	56,3	43,3	22,3	16,3			30,0	19,0	34,7
12	33,3	4,0	31,3	11,3		23,0		25,0	8,0
13	59,7	34,7	40,0	36,0	40,3	51,0	30,7		30,3
Promedio	52	27	27	27	36	48	37	25	27
Mediana	56	30	26	33	40	51	34	25	30
Primer Cuartíl (Q1)	49	19	23	14	31	46	31	20	20
Tercer Cuartíl (Q3)	60	36	30	37	41	56	40	31	36
Rango Intercuartílico (RIC)	11	17	7	23	10	10	9	11	16
Límite inferior (Q1*10%)	44	17	21	13	28	41	28	18	18
Límite superior (Q3*10%)	65	40	33	41	45	62	44	34	39

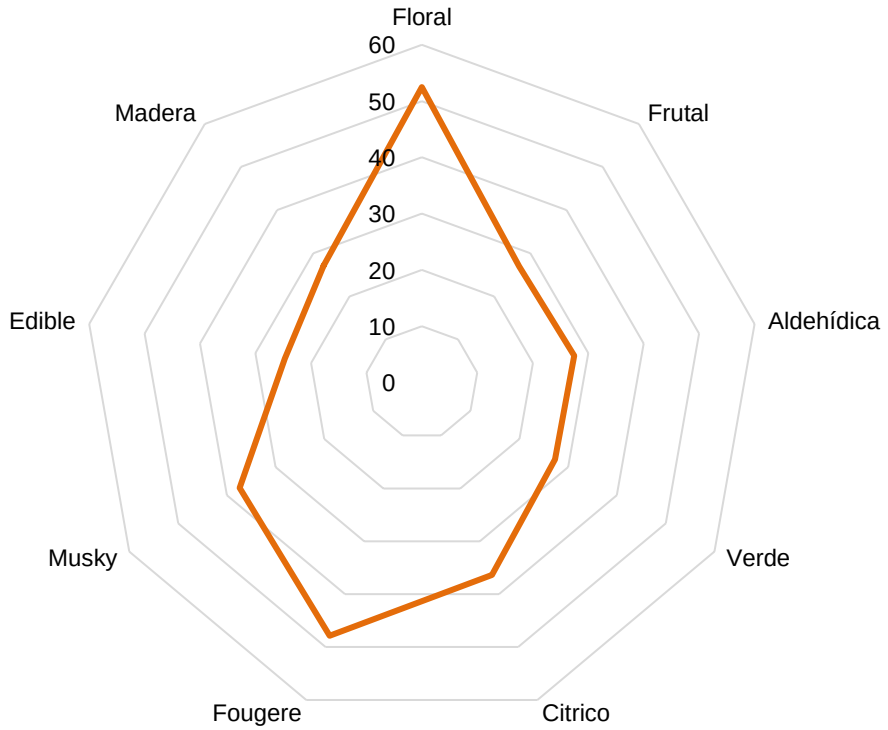

Figura D 4 Perfil sensorial de la fragancia E realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 5 Resultados sensoriales de la fragancia F

Fragancia	**Fragancia F**								
Códigos aleatorios	**409, 232, 398**								
Panelista	**Floral**	**Frutal**	**Aldehídica**	**Verde**	**Cítrico**	**Fougere**	**Musky**	**Edible**	**Madera**
1	49,0	13,0	30,0	36,5	22,5		20,5	13,5	
2		6,5	20,0	26,5	60,0	62,7	25,0	15,0	52,0
3	32,0	21,7	21,0	15,0	20,3	56,0	30,0	2,3	

4	34,5	31,5		41,0	58,5		29,0	26,5	23,5
5	38,7	25,7	26,3	25,7	38,3	66,7		25,3	37,3
6	44,3				55,3	61,0			
7	42,0		27,3	36,3	53,3				45,7
8		24,0		38,7	40,0		35,7	12,7	48,0
9						62,3			
10				16,7		54,0	20,7		29,3
11	53,3	41,0	18,0	20,0	58,3	63,0	23,0	13,7	
12			19,7			56,3	19,7		
13	44,0	44,5			46,0		39,0		50,5
Promedio	42	26	23	28	45	60	27	16	41
Mediana	43	25	21	27	50	62	25	14	46
Primer Cuartíl (Q1)	38	20	20	20	39	56	21	13	33
Tercer Cuartíl (Q3)	46	34	27	37	58	63	30	20	49
Rango Intercuartílico (RIC)	8	14	7	17	19	7	9	7	16
Límite inferior (Q1*10%)	34	18	18	18	35	51	19	12	30
Límite superior (Q3*10%)	50	37	30	40	63	69	33	22	54

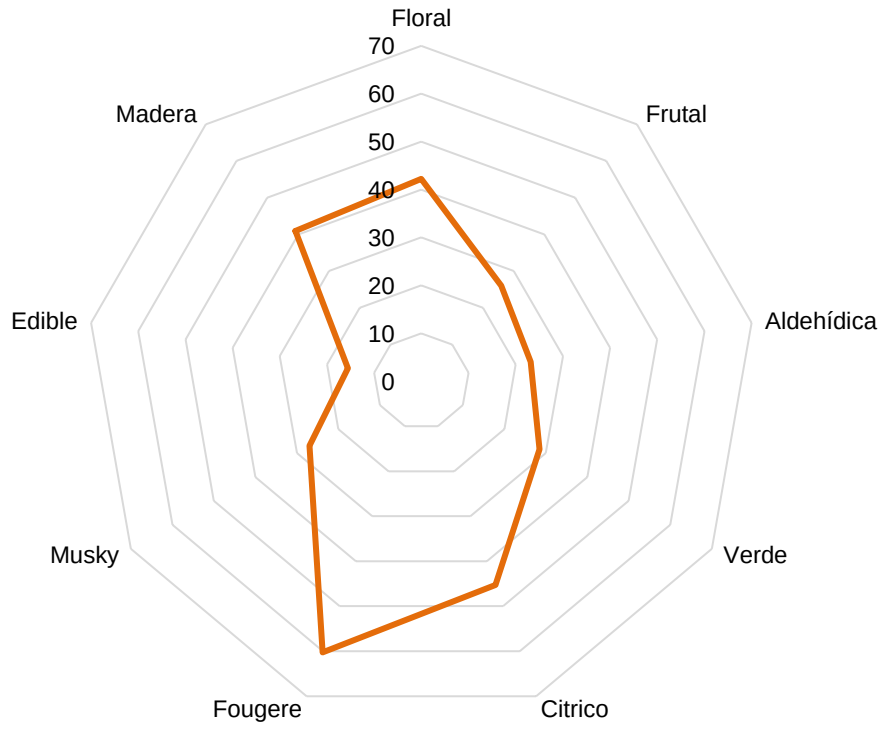

Figura D 5 Perfil sensorial de la fragancia F realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 6 Resultados sensoriales de la fragancia G

Fragancia	Fragancia G								
Códigos aleatorios	412, 849, 704								
Panelista	Floral	Frutal	Aldehídica	Verde	Cítrico	Fougere	Musky	Edible	Madera
1				40,0	39,0			10,0	
2	39,0	40,3	35,0	29,7	36,3	42,0	24,0	27,7	44,5
3	26,3	25,3	20,7	22,3	17,7	34,3	44,3	9,0	
4	53,0				14,0	32,0	26,0	18,0	40,5
5	53,0	32,3	37,3	12,0	47,3	41,0	40,3	19,7	41,0
6		38,3	16,3		37,7	35,5			
7	37,3		15,3	34,3		51,0	48,0	34,0	
8	46,0	24,7	24,0	28,3	23,3				24,3
9	28,0		25,3						21,3
10		23,3	28,3		13,3		23,3	16,7	
11	40,3	36,0	26,3	19,3		23,3	34,3	14,5	31,7
12					14,0				
13	53,0	46,3		42,0	44,0	55,7	40,0		29,7
Promedio	**42**	**33**	**25**	**29**	**29**	**39**	**35**	**19**	**33**
Mediana	40	34	25	29	30	38	37	17	32
Primer Cuartíl (Q1)	37	25	21	22	15	34	26	13	27
Tercer Cuartíl (Q3)	53	39	28	36	39	44	41	22	41
Rango Intercuartílico (RIC)	16	14	7	14	24	10	15	9	14
Límite inferior (Q1*10%)	34	23	19	19	13	30	23	12	24
Límite superior (Q3*10%)	58	43	31	39	43	49	45	24	45

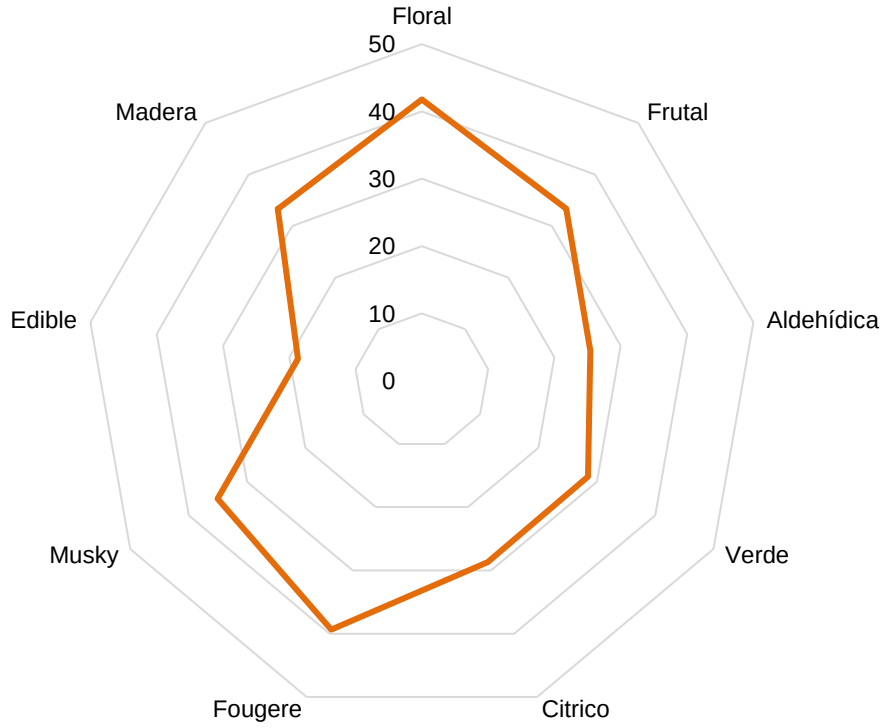

Figura D 6 Perfil sensorial de la fragancia G realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 7 Resultados sensoriales de la fragancia H

Fragancia	Fragancia H								
Códigos aleatorios	516, 600, 312								
Panelista	Floral	Frutal	Aldehídica	Verde	Cítrico	Fougere	Musky	Edible	Madera
1	13,0	64,0	27,0		65,0	49,0			27,0
2	21,5	93,3	15,0	24,0	34,0	23,5	14,5	18,7	26,7
3	19,3	64,3	16,7		33,0	15,7	20,0	42,7	11,3
4	32,5	92,5	25,0		41,0		33,0		
5	22,7	67,3		21,0	63,7	47,0			
6		93,3	28,0	41,5	63,5	42,5	35,0		40,0
7	30,3	66,7	21,0	39,0		47,3		34,0	
8		65,3	18,7	37,7	62,3		14,3		35,0
9		67,7					23,0		
10				18,0	37,7	10,0		19,0	
11	24,3	92,0	14,7	17,5	43,3		17,3	33,0	9,0
12		60,7				11,0	15,7	34,0	
13	27,0	82,0		41,0		25,0	37,0	41,0	38,0
Promedio	24	76	21	30	49	30	23	32	27
Mediana	24	68	20	31	43	25	20	34	27
Primer Cuartíl (Q1)	21	65	16	20	38	16	16	26	19
Tercer Cuartíl (Q3)	28	92	26	40	64	47	33	38	37
Rango Intercuartílico (RIC)	7	27	10	20	26	31	17	12	18

Límite inferior (Q1*10%)	19	59	15	18	34	14	14	23	17
Límite superior (Q3*10%)	31	101	28	43	70	52	36	41	40

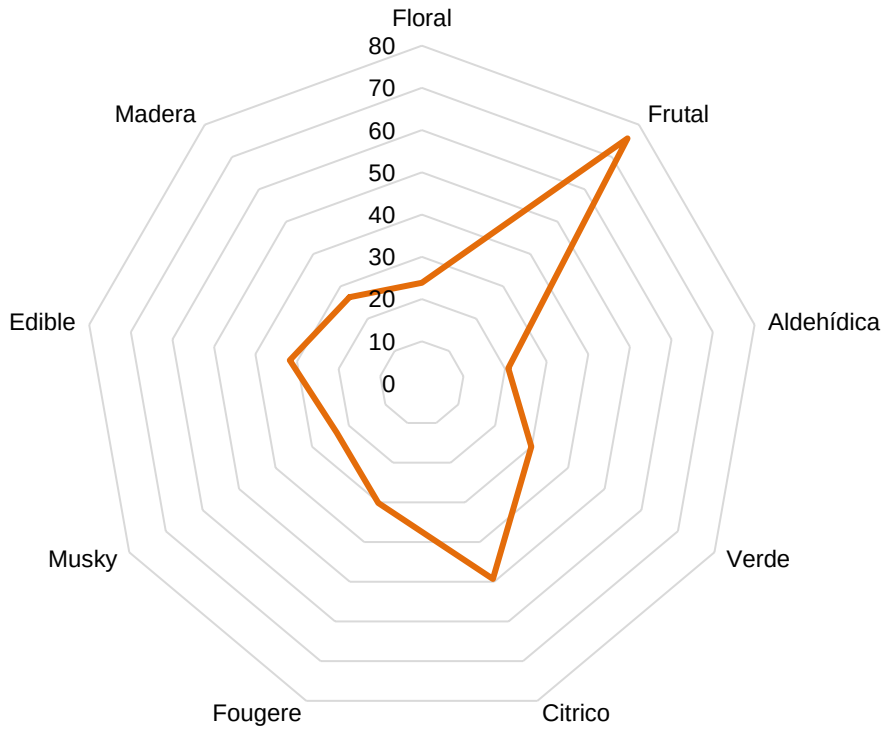

Figura D 7 Perfil sensorial de la fragancia H realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 8 Resultados sensoriales de la fragancia I

Fragancia	**Fragancia I**								
Códigos aleatorios	**159, 773, 949**								
Panelista	**Floral**	**Frutal**	**Aldehídica**	**Verde**	**Cítrico**	**Fougere**	**Musky**	**Edible**	**Madera**
1	12,0	53,0	20,5	20,0	39,0		65,0	48,5	
2	40,3	37,0	24,0	34,0	38,0	38,3	33,0	41,7	35,3
3			25,0	11,3	42,3	38,0			
4	23,0	49,0			31,5	35,5	63,5		
5	43,7	53,3	29,3	26,3	43,7	31,0	29,0	46,7	36,3
6		31,0	31,5				48,0	51,3	
7	38,7	48,7	25,0			37,0	66,0	48,7	35,0
8	54,7	36,7		26,3	14,7	39,0	63,7		24,0
9	18,3							30,7	27,7
10			21,7				26,7	30,0	
11		48,7	22,0	24,7		25,7	38,7		21,7
12		27,0		10,7				49,0	
13	50,0	44,7		36,3	36,3	33,7	35,7	50,3	34,7
Promedio	35	43	25	24	35	35	47	44	31
Mediana	40	47	25	26	38	36	43	49	35

Primer Cuartíl (Q1)	22	37	22	18	34	33	34	42	26
Tercer Cuartíl (Q3)	45	49	26	28	41	38	64	49	35
Rango Intercuartílico (RIC)	23	12	4	10	7	5	30	7	9
Límite inferior (Q1*10%)	20	33	20	16	31	30	30	38	23
Límite superior (Q3*10%)	50	54	29	31	45	42	70	54	39

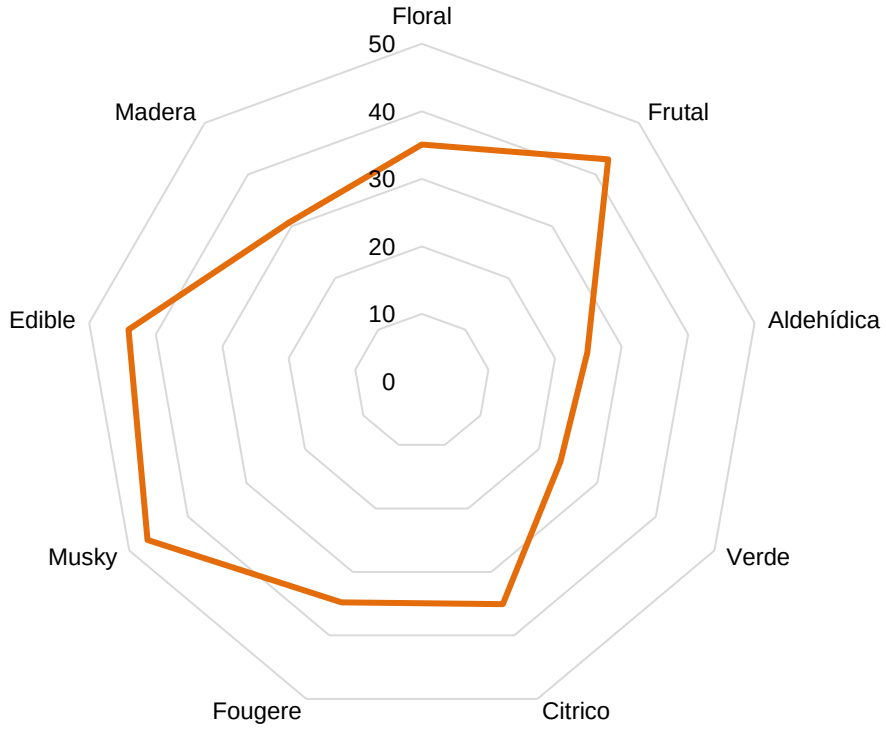

Figura D 8 Perfil sensorial de la fragancia I realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

Tabla D 9 Resultados sensoriales de la fragancia J

Fragancia	**Fragancia J**								
Códigos aleatorios	**203, 814, 926**								
Panelista	**Floral**	**Frutal**	**Aldehídica**	**Verde**	**Cítrico**	**Fougere**	**Musky**	**Edible**	**Madera**
1			15,0				74,0		
2	51,3	38,7	20,3		24,0	39,0	63,0	22,3	30,7
3	24,0			12,3		27,3	40,0	21,0	
4	55,5			13,5	12,0	36,0	69,5	42,0	45,0
5	36,3	25,0	25,7	28,3	28,7	56,0	58,3	26,7	36,3
6	51,3					54,3	65,0	30,0	
7	53,3	39,7	18,3	29,3		47,0	71,7	30,7	45,7
8	37,7	29,0		9,3	15,3	21,0			12,3
9						20,0	41,0		13,0

10	21,3	14,0			10,0		55,0	22,0	
11		37,7	20,7	12,0		31,7	69,0	24,0	
12			13,0	5,7	7,3			29,3	14,3
13	58,0	38,0	23,0	25,5	19,5	54,0			23,0
Promedio	43	32	19	17	17	39	61	28	28
Mediana	51	38	20	13	15	38	64	27	27
Primer Cuartíl (Q1)	36	27	17	11	11	28	56	22	14
Tercer Cuartíl (Q3)	53	38	22	26	22	52	69	30	39
Rango Intercuartílico (RIC)	17	11	5	15	11	24	13	8	25
Límite inferior (Q1*10%)	33	24	15	10	10	26	50	20	13
Límite superior (Q3*10%)	59	42	24	29	24	57	76	33	42

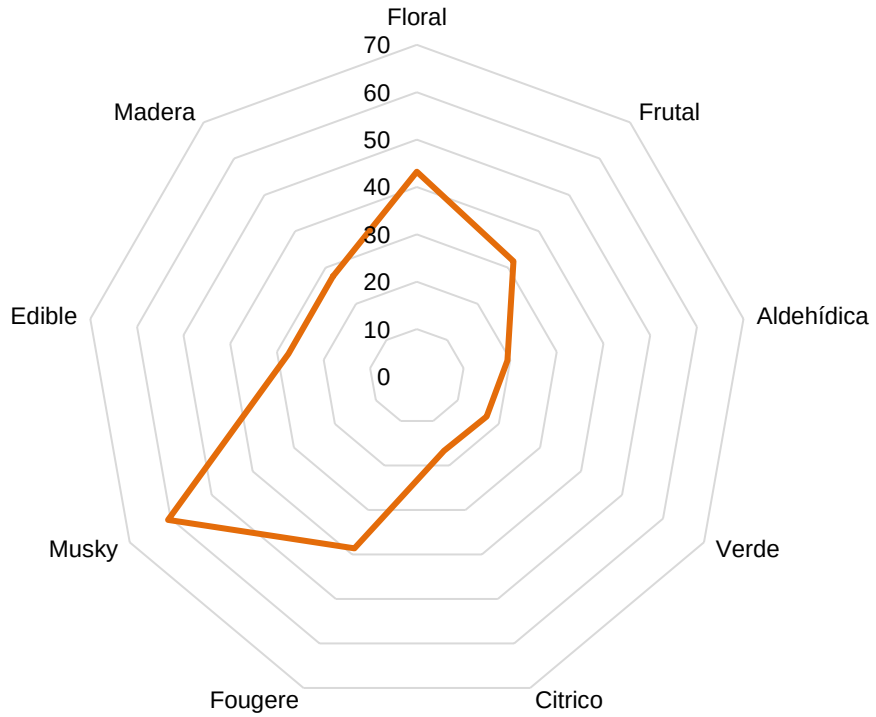

Figura D 9 Perfil sensorial de la fragancia J realizada por los panelistas en la evaluación sensorial

11. ANEXO E Diagramas box-plot para cada fragancia

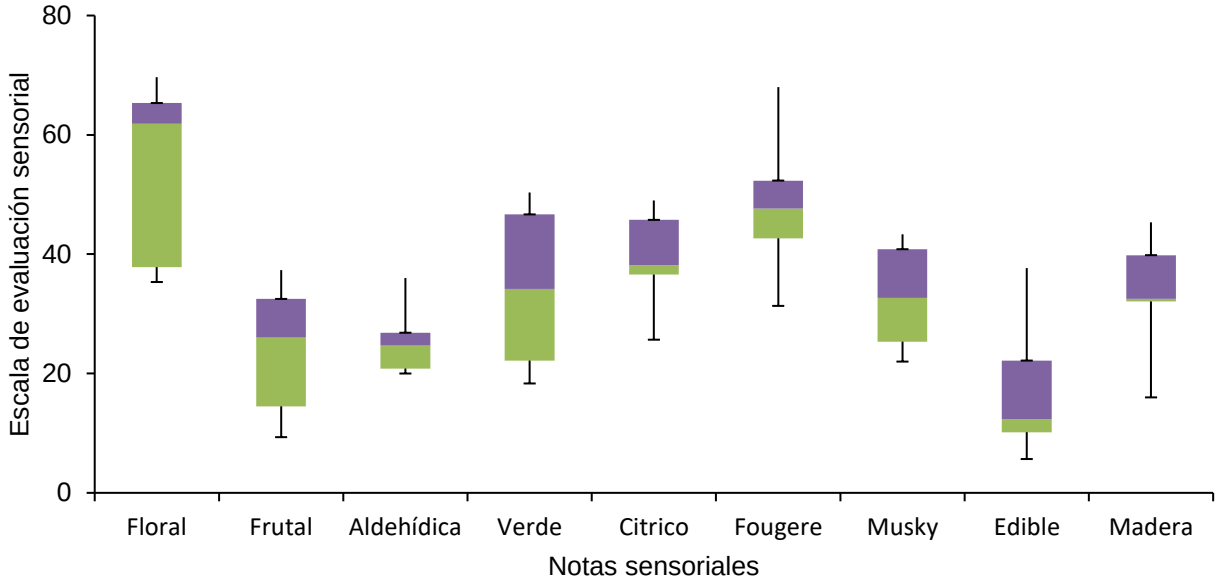

Figura E 1 Diagrama box-plot depurado de la fragancia A para todas las notas sensoriales.

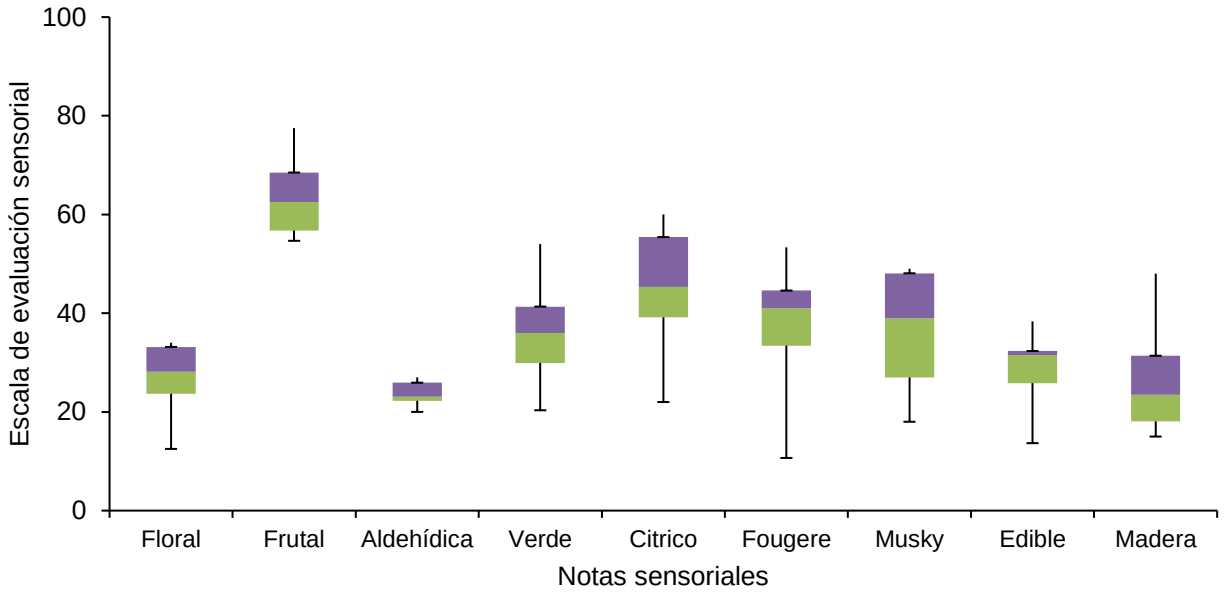

Figura E 2 Diagrama box-plot depurado de la fragancia C para todas las notas sensoriales

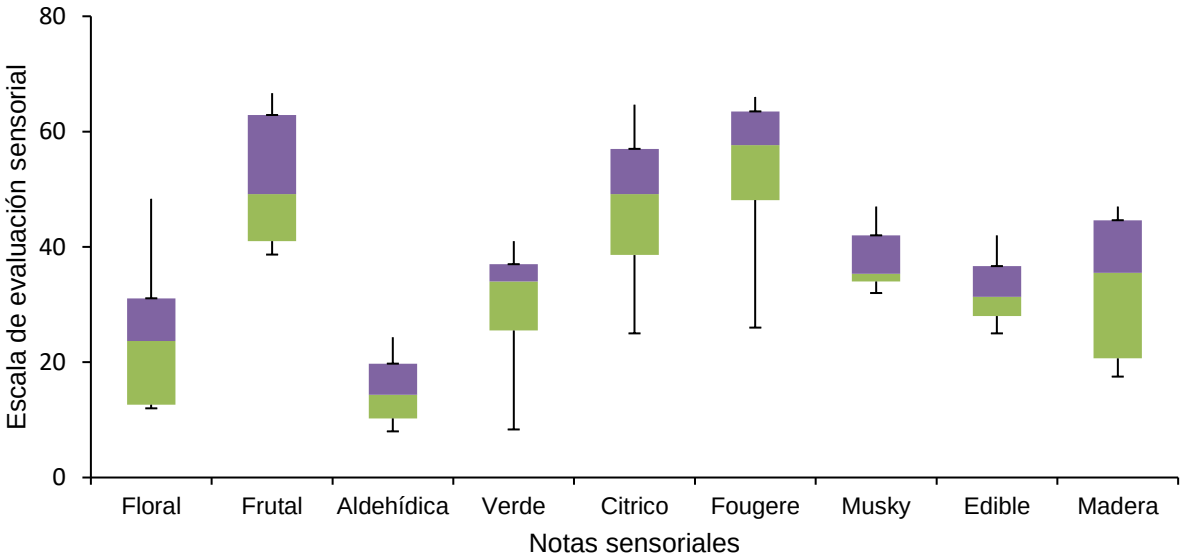

Figura E 3 Diagrama box-plot depurado de la fragancia D para todas las notas sensoriales

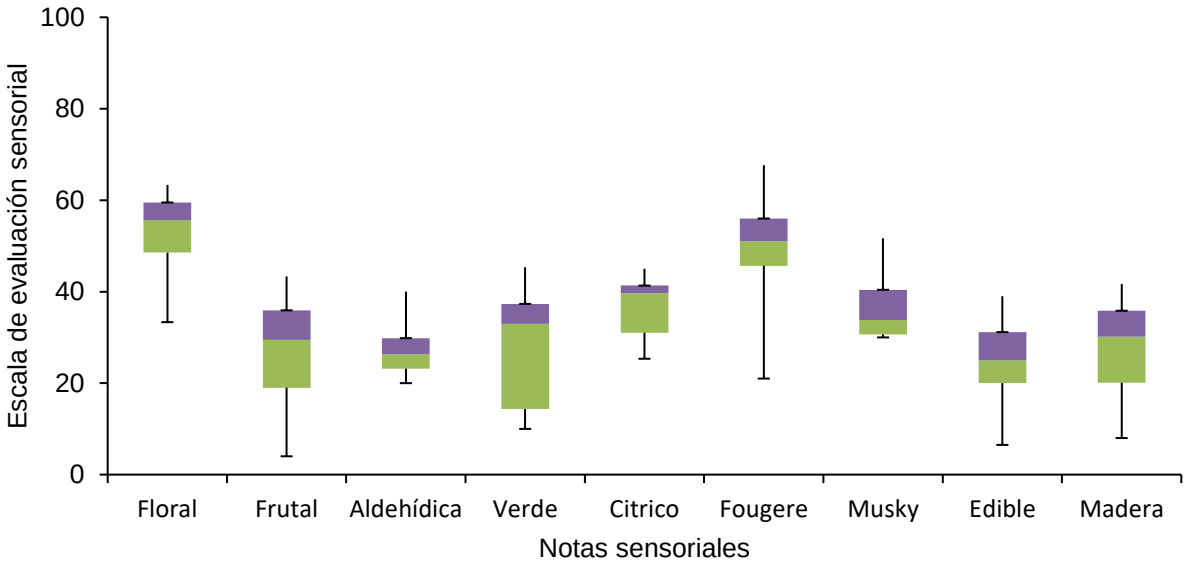

Figura E 4 Diagrama box-plot depurado de la fragancia E para todas las notas sensoriales

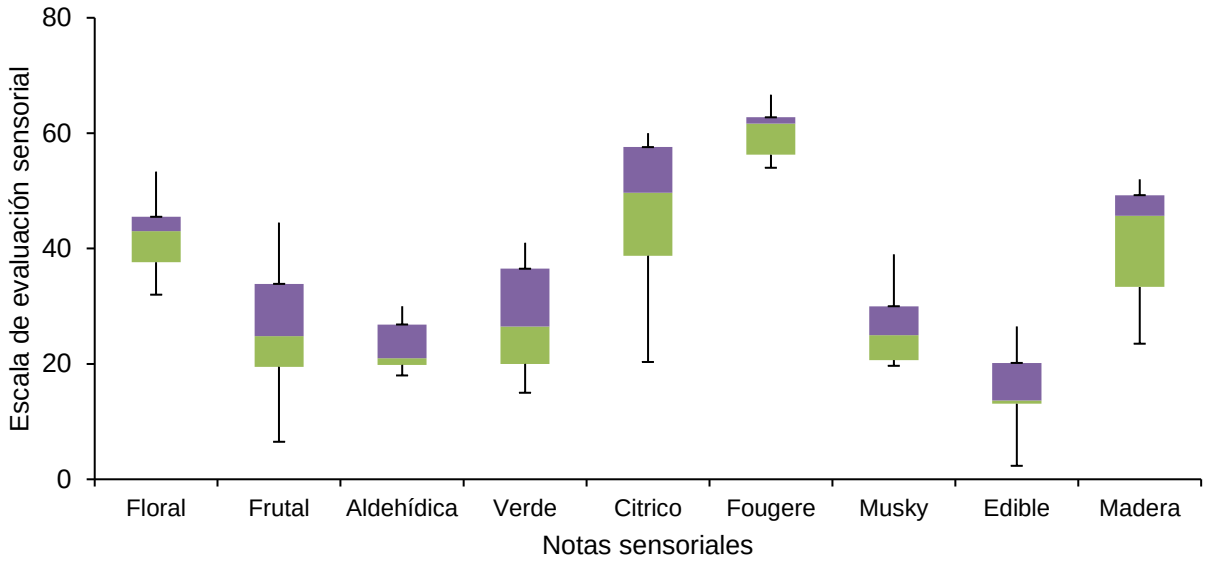

Figura E 5 Diagrama box-plot depurado de la fragancia F para todas las notas sensoriales

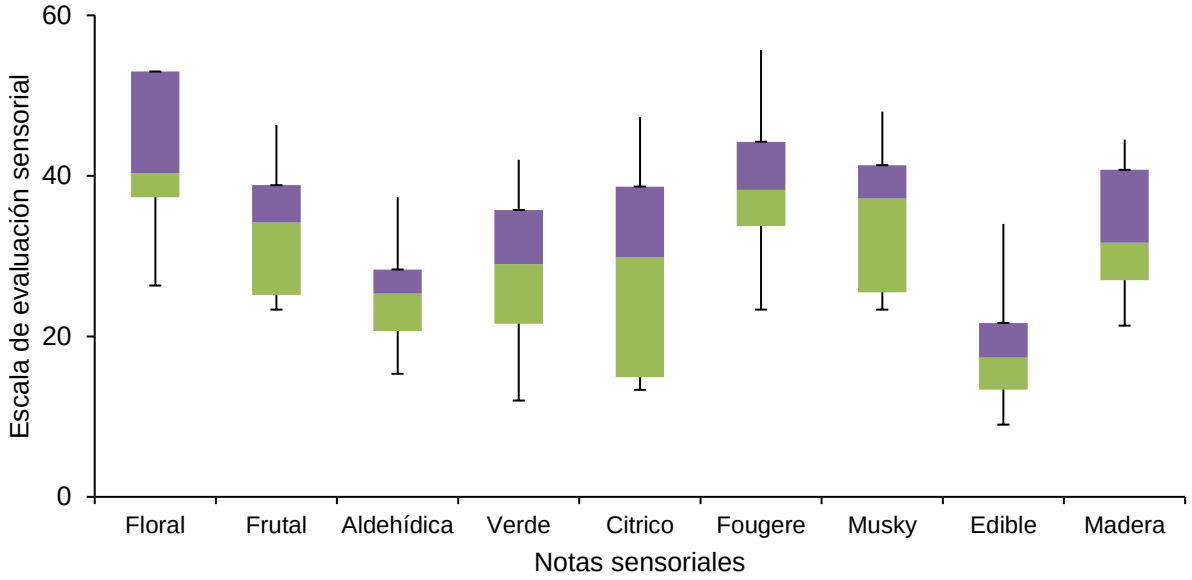

Figura E 6 Diagrama box-plot depurado de la fragancia G para todas las notas sensoriales

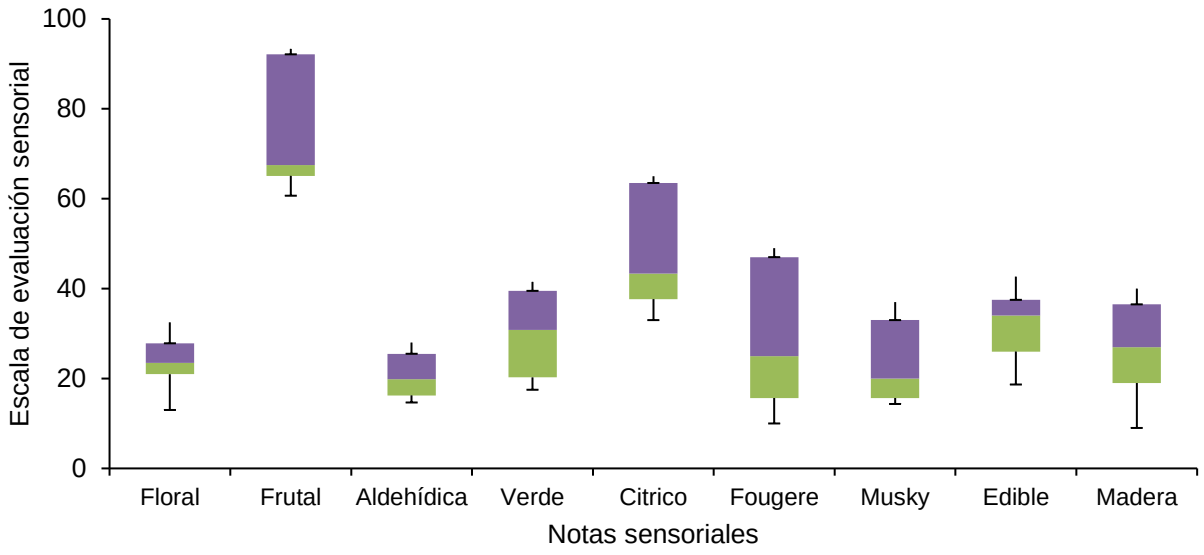

Figura E 7 Diagrama box-plot depurado de la fragancia H para todas las notas sensoriales

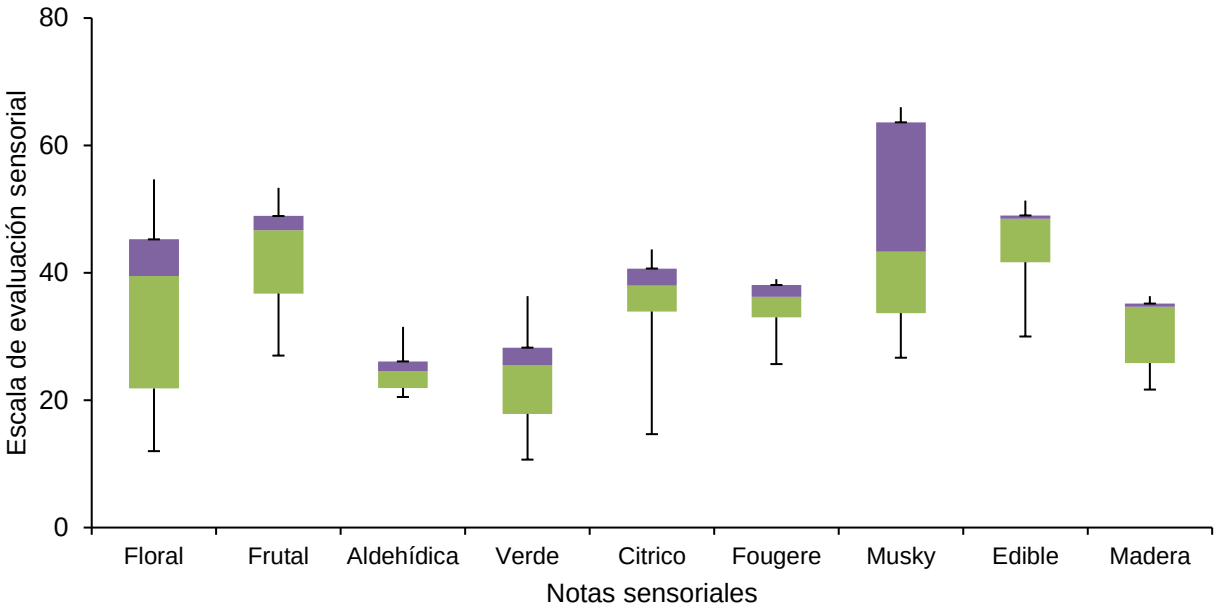

Figura E 8 Diagrama box-plot depurado de la fragancia I para todas las notas sensoriales

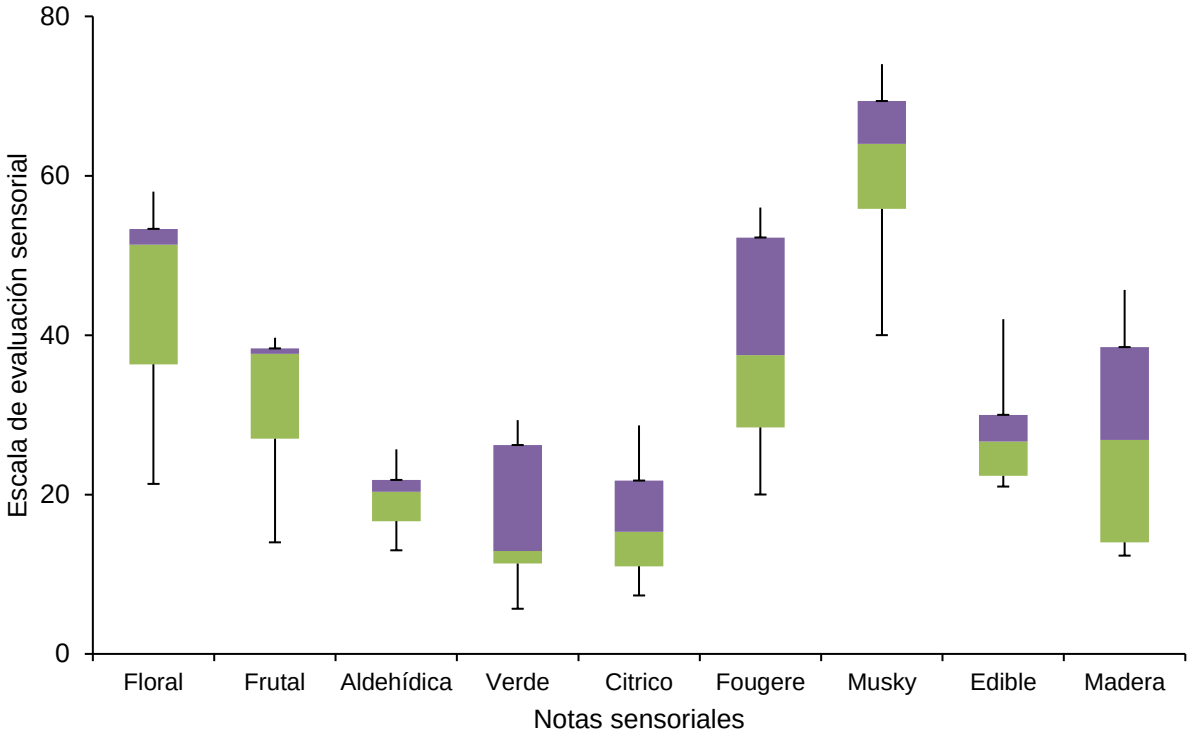

Figura E 9 Diagrama box-plot depurado de la fragancia J para todas las notas sensoriales

12. ANEXO F Matriz de correlación

Tabla G 1 Matriz de correlación construida a partir de los resultados sensoriales y los instrumentales

FRAGANCIA	Floral	Frutal	Aldehídico	Verde	Cítrico	Fougere
Fragancia B	28,0	53,0	17,7	29,1	36,7	40,1
Fragancia G	37,4	35,7	28,8	26,0	31,8	34,8
Fragancia H	21,5	74,0	19,8	28,4	44,0	30,9
Fragancia I	32,3	34,3	26,7	26,9	35,2	31,3
Fragancia C	26,1	58,0	25,2	38,4	37,9	34,5
Fragancia A	47,0	25,8	30,4	33,3	35,6	48,0
Fragancia E	45,8	25,1	30,9	30,2	33,7	47,6
Fragancia D	32,0	49,5	20,3	26,0	44,3	42,4
Fragancia F	40,0	25,4	25,0	28,8	36,3	62,9
Fragancia J	37,4	30,9	22,4	17,4	20,7	38,7

FRAGANCIA	Musky	Edible	Madera	Acetato de Hexilo	2,6-dimetiloct-7-en-2-ol	Linalool
Fragancia B	38,3	53,4	23,3	0,0%	0,0%	2,6%
Fragancia J	36,4	23,5	32,8	0,8%	2,5%	2,4%
Fragancia G	28,1	31,6	26,5	3,2%	0,0%	0,0%
Fragancia H	38,6	44,0	31,1	0,5%	2,3%	4,6%
Fragancia I	32,6	27,3	25,8	2,5%	0,0%	3,9%
Fragancia C	31,5	22,1	32,4	1,6%	8,2%	3,8%
Fragancia A	42,3	27,9	33,2	0,0%	11,7%	0,0%
Fragancia E	37,9	37,9	31,6	1,7%	6,2%	1,5%
Fragancia D	32,3	17,3	39,3	3,9%	6,5%	0,0%
Fragancia F	56,4	33,7	28,2	0,0%	0,0%	0,0%

FRAGANCIA	Cumarina	Acetato de dihidro-diciclopentadienilo	Limoneno	Tetrahidro-4-metil-2-(2-metilpropenil)-2H-pirano	Acetato de bencilo	Acetato de stiralilo
Fragancia B	2,5%	5,0%	0,6%	0,0%	0,0%	0,6%
Fragancia J	2,5%	9,3%	0,0%	0,3%	1,7%	1,3%
Fragancia G	0,0%	7,9%	7,1%	0,0%	2,0%	2,4%
Fragancia H	1,7%	0,0%	5,7%	0,0%	1,4%	0,7%
Fragancia I	1,2%	3,2%	1,4%	0,0%	0,8%	0,5%
Fragancia C	0,0%	10,4%	0,1%	0,3%	0,0%	0,0%
Fragancia A	0,9%	5,9%	0,0%	0,3%	3,6%	0,6%
Fragancia E	0,0%	3,6%	5,2%	0,2%	2,1%	1,2%
Fragancia D	2,8%	10,4%	0,4%	0,0%	0,0%	0,0%
Fragancia F	0,0%	0,0%	0,0%	0,6%	0,0%	0,0%

FRAGANCIA	Acetato de Dimetilbencilcarbinol	Etilvainillina	Isobutirato de fenoxietilo	Lilial	Gama undecalactona	(E)-2-etil-4-(2,2,3-trimetil-1-ciclopent-3-enil) but-2-en-1-ol
Fragancia B	0,0%	2,1%	1,4%	5,0%	0,6%	0,6%
Fragancia J	2,5%	0,3%	0,0%	5,5%	0,6%	2,5%
Fragancia G	0,0%	0,0%	6,9%	1,6%	0,8%	0,5%
Fragancia H	0,6%	1,2%	7,5%	5,8%	0,3%	3,1%
Fragancia I	1,3%	0,2%	3,4%	5,6%	0,3%	1,8%
Fragancia C	1,6%	0,0%	0,0%	5,5%	0,0%	0,0%
Fragancia A	0,8%	0,5%	2,3%	5,4%	0,0%	0,6%
Fragancia E	0,8%	0,6%	3,0%	4,3%	0,2%	2,1%
Fragancia D	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%
Fragancia F	2,5%	0,6%	0,0%	0,0%	0,3%	9,1%

FRAGANCIA	Tetrametil acetiloctahidronaftalenos	Hexil Cinamaldehido	(4aR,5R,7aS)-2,2,5,8,8,9a-hexametiloctahidro-4H-4a,9-metanoazuleno[5,6-d][1,3]dioxol	Hexahidro hexametil-ciclopentabenzopirano	Acetato de 2-tert-butilciclohexilo	1-2,6,6-trimetil-3-ciclohexen-1-il-2-buten-1-ona
Fragancia B	24,9%	2,8%	0,2%	6,4%	6,4%	0,1%
Fragancia J	1,0%	1,3%	0,1%	6,4%	3,4%	0,0%
Fragancia G	4,4%	3,5%	0,2%	6,9%	15,9%	0,7%
Fragancia H	4,2%	15,1%	0,0%	5,2%	3,5%	0,5%
Fragancia I	4,6%	5,6%	0,0%	2,7%	11,5%	0,4%
Fragancia C	6,6%	0,0%	0,2%	5,5%	8,2%	0,5%
Fragancia A	5,4%	2,3%	0,1%	12,2%	5,4%	0,4%
Fragancia E	5,7%	8,2%	0,1%	9,5%	8,2%	0,1%
Fragancia D	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%
Fragancia F	0,0%	11,4%	0,0%	57,1%	0,0%	0,3%

FRAGANCIA	(2E)-3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-ol	5-heptiloxolan-2-ona
Fragancia B	0,1%	1,4%
Fragancia J	1,3%	2,6%
Fragancia G	0,0%	14,2%
Fragancia H	0,7%	2,3%
Fragancia I	1,7%	2,7%
Fragancia C	0,0%	1,1%
Fragancia A	0,7%	1,6%
Fragancia E	0,0%	2,6%
Fragancia D	0,0%	0,0%
Fragancia F	2,5%	0,0%