



7º Congreso Argentino  
Química Analítica

2013

Mendoza - Arg.

"Sustentabilidad e Integración Multidisciplinaria: nuevos desafíos de la Química Analítica"

1 al 4 de octubre

*Auditorio Ángel Bustelo*

*Mendoza - Argentina*

**Libro de Resúmenes**



## CLASIFICACIÓN E IDENTIFICACIÓN QUIMIOMÉTRICA DE WHISKYS DE ALTO VALOR COMERCIAL EN FUNCIÓN DEL GRADO DE AÑEJAMIENTO

P-C-15

Maria Magdalena Alba<sup>1</sup>  
 Silvana Mariela Azcárate<sup>2</sup>  
 Eduardo Jorge Marchevsky<sup>3</sup>  
 José Manuel Camiña<sup>2</sup>  
 Miguel Angel Cantarelli<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de La Pampa, La Pampa, Argentina.  
<sup>2</sup>Instituto de las Ciencias de la Tierra y Ambientales de La Pampa (INCIATAP), Santa Rosa, La Pampa, Argentina.  
<sup>3</sup>Instituto de Química San Luis (INQUISAL), San Luis, Argentina.



WHISKYS  
 CLASIFICACION  
 CALIDAD  
 QUIMIOMETRIA

El surgimiento de nuevas habilidades para la elaboración de whiskys impone la necesidad de aplicación de sistemas formales que permitan garantizar la calidad de los productos. Los fraudes, falsificaciones y adulteraciones son moneda corriente en esta industria, de manera que es indispensable la evaluación de cada una de las etapas implicadas en la producción de una bebida como así también en el producto final [1-4]. El objetivo del trabajo fue realizar la clasificación e identificación de whiskys de alto valor comercial, utilizando absorbiometría molecular UV-vis de espectro completo en combinación de herramientas multivariadas, a los fines de desarrollar nuevas metodologías de análisis de mayor rapidez y menores costos. Las herramientas multivariadas empleadas para estos fines fueron el Análisis de Componentes Principales (PCA) y el Análisis Discriminante Lineal (LDA) [3,6]. Un total de quince marcas diferentes de whiskys fueron analizadas. Seis muestras de cada whisky fueron analizadas para luego ser clasificadas e identificadas empleando como herramientas multivariadas de análisis antes citadas. Los programas multivariados empleados fueron The Unscrambler (Thorheim, Noruega) e InfoStat (Córdoba, Argentina). En el presente trabajo se han expuesto los resultados de la clasificación e identificación multivariada de quince marcas de whiskys comerciales. En función los resultados obtenidos, el presente trabajo puede ser de utilidad para determinar el origen y autenticidad de whiskys y asegurar el control de calidad en la industria de bebidas alcohólicas.

### Referencias

- [1] Frausto-Reyes, C. Spectrochim. Acta A. 61 (2005) 2657.
- [2] Zayas, P.E.; Hernández, Sainz, D. Rev. Nac. de Ing. y Arquí. 4 (2001) 311.
- [3] Urbano-Cuadrado M.; Luque de Castro, M. D.; Pérez-Juan, P.M.; García-Olmo, J.; Gómez-Nieto, M.A. Anal. Chim. Acta. 527 (2004) 81.
- [4] Mongay-Fernandez, C. Quimiometría. (2005) Universidad de Valencia.
- [5] Massart, D.L.; Vandeginste, B.G.M.; Buydens, L.M.C.; de Jong, S.; Lewi, P.J.; Smeyers-Verbeke, J. (1997) Handbook of Chemometrics and Qualimetrics, vol. A, Elsevier, Amsterdam.

### Agradecimientos

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (UNLPam).  
 Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

## INTRODUCCIÓN

El whisky (en galés escocés, uisge-beatha), whiskey (en irlandés, uisce beatha o uisce) o glicgeal es una bebida alcohólica obtenida por la destilación de un mosto fermentado de cereales como cebada, trigo, maltado, centeno y maíz, y posterior envejecimiento en barriles de madera, tradicionalmente de roble blanco. Esta bebida alcohólica se comercializa con un contenido alcohólico de entre 40 y 62 % en volumen. El término whisky o whiskey deriva del galés escocés "uisge beatha" y del galés irlandés "uisce beatha", que significa, en ambos casos, "agua de vida" del latín aqua vitae, equivalent. Diferentes técnicas han sido utilizadas por la industria del whisky desde el año 1900 para la autenticación y detección de muestras falsificadas, que van desde la química clásica al uso de instrumentación analítica avanzada.

En general, un whisky puede ser caracterizado por tres propiedades: el contenido de etanol (un whisky debe adherirse a un contenido mínimo de 40% (v/v)); el congénere (el whisky contiene una serie de congéneres durante los procesos de fermentación y maduración), la consistencia del color (whisky puede ser alterado con el uso de colorantes específicos).

La cromatografía de gases (GC) puede proporcionar información tanto en el contenido de etanol y el aumento de los perfiles de alcohol en el whisky, diferenciando entre las diferentes bebidas alcohólicas, y distinguir entre whiskys de maíz y de grano en el perfil de congéneres verificándose posibles adulteraciones en la mencionada bebida.

Por otro lado, no existen metodologías analíticas capaces detectar adulteraciones en estas bebidas por espectrofotometría UV-Vis. Por lo tanto, el presente trabajo considera, el estudio combinado, utilizando abscorimetría molecular UV-Vis de espectro completo y métodos quimiométricos para la clasificación e identificación de whiskys de alto valor comercial a fin de proponer un nuevo método analítico rápido y sencillo para la clasificación e identificación de las mismas, con fines de control de calidad.

El surgimiento de nuevas habilidades para la elaboración de whiskys impone la necesidad de aplicación de sistemas formales que permitan garantizar la calidad de los productos. Los fraudes, falsificaciones y adulteraciones son moneda corriente en esta industria, de manera que es indispensable la evaluación de cada una de las etapas implicadas en la producción de una bebida como así también en el producto final [1-3]. El objetivo del trabajo fue realizar la clasificación e identificación de whiskys de alto valor comercial, utilizando abscorimetría molecular UV-Vis de espectro completo en combinación de herramientas multivariadas, a los fines de desarrollar nuevas metodologías de análisis de mayor rapidez y menor costo. Las herramientas multivariadas empleadas para estos fines fueron el Análisis de Componentes Principales (PCA) y el Análisis Discriminante Lineal (LDA) [4,5].

## METODOLOGÍA

Un total de quince marcas diferentes de whiskys comerciales fueron analizadas, incluyendo dos marcas de whisky de alto valor comercial como lo son "J&B" (8, 12 y 15 años de añejamiento) y "Johnny Walker" (Etiqueta Roja: 8 años de añejamiento y Etiqueta Negra: 12 años de añejamiento). Las determinaciones analíticas fueron realizadas a través de espectrofotometría de absorción molecular de espectro completo. Se efectuaron ensayos preliminares con el objeto de obtener la dilución y el pH al cual la absorción en el espectro UV-Vis de las bebidas fueas óptimo y se evitasen los errores a la Ley de Lambert-Beer. Se determinó la absorción de las diluciones 1/50, 1/25, 1/10, 1/5, 1/2,5, y para los whiskys puros. Con esto se pudo hallar a la dilución 1/10 como la más adecuada para posteriores ensayos. Luego, se realizó el estudio de comportamiento espectral a diferentes pH (1, 3, 5, 7, 9 y 12), utilizando diferentes soluciones reguladoras, preparadas a partir de la tabla de Clark y Lubs. Seis muestras de cada whisky fueron analizadas para luego ser clasificadas empleando como herramientas multivariadas de análisis, el Análisis de Componentes Principales (PCA), a su vez dentro de la matriz de datos resultante, se obtuvo el modelo multivariado discriminante que permitió clasificar e identificar las muestras de whiskys de alto valor comercial antes mencionados. Los pequeños multivariados empleados fueron The Unscrambler (Thorheim, Noruega) e Infostat (Córdoba, Argentina).

## RESULTADOS

A fin de obtener un modelo multivariado que permita la clasificación e identificación adecuada de las marcas de alto valor comercial basados en la información espectral, se utilizaron modelos preliminares y se evaluó la incidencia de las variables originales (espectro) sobre dichos modelos. Una vez realizado esto, el modelo definitivo tuvo como variables relevantes, la región espectral UV (unidades de absorbancia) que mejor poder clasificatorio se obtuvo, al pH seleccionado que fue en rango básico, pH=12. Con estas variables seleccionadas (rango desde 210,41 a 300,7 nm), fue posible la clasificación e identificación de las dos marcas de alto valor comercial a través de los métodos multivariados empleados, además de discriminarse por años de añejamiento.

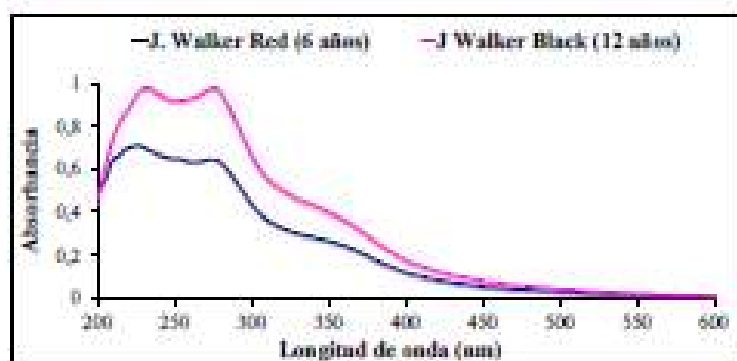


Gráfico 1. Espectros de absorción molecular, Whiskys "Johnny Walker" Etiqueta Roja (8 años de añejamiento) y Etiqueta Negra (12 años de añejamiento).

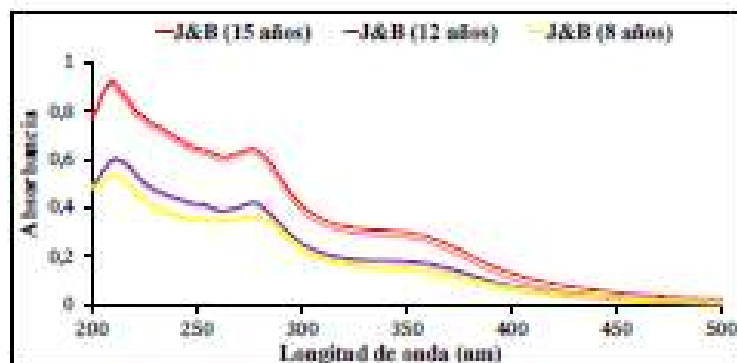


Gráfico 2. Espectros de absorción molecular de los Whiskys "J&B" (8, 12 y 15 años de añejamiento).

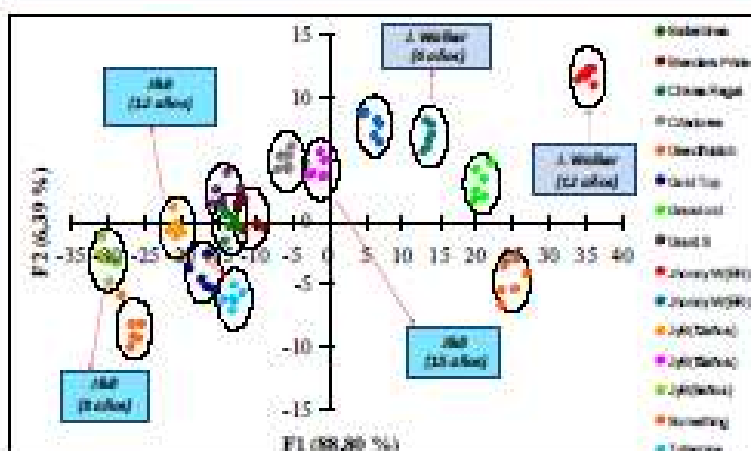


Gráfico 3. Gráfico de scores discriminantes.

Gráfico 1, muestra los espectros de absorción molecular de los Whiskys "Johnny Walker" Etiqueta Roja (8 años de añejamiento) y Etiqueta Negra (12 años de añejamiento) desde 190 nm a 600 nm, en la dilución y al pH óptimo seleccionados. Se observa claramente la similitud en los espectros pero lo suficientemente diferentes por el cual fue posible su discriminación mediante el modelo multivariado. Gráfico 2, muestra los espectros de absorción molecular de los Whiskys "J&B" (8, 12 y 15 años de añejamiento) desde 190 nm a 500 nm, en la dilución y al pH óptimo seleccionados. También se observa claramente la similitud entre los espectros pero lo suficientemente diferentes por el cual fue posible su discriminación mediante el modelo multivariado. Gráfico 3, muestra los scores discriminantes definidos por el primer y segundo Factor Discriminante, resultándose claramente los cinco grupos bien establecidos correspondientes a las quince muestras de whiskys analizados. Además se muestra como se clasifican y discriminan en el espacio bidimensional establecido por los factores discriminantes, los whiskys de alto valor comercial en sus respectivos años de añejamiento. El porcentaje de varianza explicada por el modelo multivariado discriminante fue del 95,2 %, resultando que solamente dos Factores Discriminantes son necesarios par explicar la varianza de la información original (longitudes de onda).

## CONCLUSIONES

En el presente trabajo se han expuesto los resultados de la clasificación e identificación multivariada de dos marcas de whiskys de alto valor comercial de un total de quince marcas de whiskys de consumo masivo. En función los resultados obtenidos, el presente trabajo pretende ser de utilidad para determinar el origen y autenticidad de whiskys de alto valor comercial, evitando de esta manera posibles fraudes y falsificaciones y asegurar el control de la calidad en la industria de bebidas alcohólicas.

## BIBLIOGRAFIA

[1] Frusto-Reyes, C. Spectrochim. Acta A. 61 (2005) 2687.  
 [2] Zayas, P.E.; Hernández, Sainz, D. Rev. Mex. de Ing. y Arqu. 4 (2000) 311.  
 [3] Urbano-Cuadrado, M.; Luján de Castro, M. D.; Pérez-Juan, P.M.; García-Olmo, J.; Gómez-Riello, M.A. Anal. Chim. Acta. 527 (2004) 61.  
 [4] Mongay-Fernandez, C. Quimiometría. (2005) Universidad de Valencia.  
 [5] Massart, D.L.; Vandeginste, B.G.M.; Buydens, L.M.C.; de Jong, S.; Lewi, P.J.; Smeyers-Verbeke, J. (1997) Handbook of Chemometrics and Qualityrics, vol. A, Elsevier, Amsterdam.