

7. ANEXOS

Anexo1. Análisis discriminante (clasificación para el color).

De cada una de las etapas de maduración discriminadas visualmente se separaron tres muestras de 20 frutos cada una, que serían posteriormente objeto de análisis químico para determinar la composición del aceite esencial.

En cada una de las muestras se llevó a cabo la medición de las variables L^* , a^* y b^* para cada fruto, calculándose los valores medios para cada variable. Estos valores fueron sometidos a análisis discriminante para validar la clasificación visual inicialmente aplicada.

Tabla: Valores medios de L^* , a^* y b^* para cada una de las muestras de las cuatro etapas de maduración definidas.

Muestra	L	a	b
D	51.35	-10.27	25.76
D	51.63	-10.46	25.82
D	53.21	-11.49	25.94
C	55.78	-5.38	29.95
C	56.16	-6.50	29.54
C	56.92	-6.78	30.04
B	57.52	1.03	31.92
B	58.25	3.16	32.88
B	55.71	5.30	31.55
A	56.79	16.42	32.99
A	56.57	16.89	32.91
A	57.11	15.65	33.06

Resultados del análisis discriminante:

Análisis Discriminante

Variable de clasificación: Muestra

Variabes independientes:

L
 a^*
 b^*

Número de casos completos: 12

Número de grupos: 4

<i>Función Discriminante</i>	<i>Eigenvalor</i>	<i>Porcentaje Relativo de Varianza</i>	<i>Correlación Canónica</i>
1	308.363	95.04	0.99838
2	15.8997	4.90	0.96996
3	0.178468	0.06	0.38915

Funciones Derivadas	Lambda de Wilks	Chi-Cuadrada	GL	Valor-P
1	0.000162306	65.4452	9	0.0000
2	0.0502114	22.4363	4	0.0002
3	0.848559	1.2316	1	0.2671

El StatAdvisor

Este procedimiento está diseñado para desarrollar un conjunto de funciones discriminantes el cual puede ayudar a predecir Muestra con base en los valores de otras variables cuantitativas. 12 casos fueron utilizados para desarrollar un modelo que discrimine entre los 4 niveles de Muestra. 3 variables predictoras fueron introducidas. Las 2 funciones discriminantes con valores-P menores que 0.05 son estadísticamente significativas con un nivel de confianza del 95.0%. Para graficar las funciones dicriminantes, seleccione Funciones Discriminantes de la lista de Opciones Gráficas. Para predecir nuevas observaciones, seleccione Tabla de Clasificación de la lista de Opciones Tabulares.

Coefficientes de la Función de Clasificación para Muestra

	A	B	C	D
L	148.637	116.765	103.094	97.8022
a	94.4783	71.027	57.103	49.1637
b	61.5059	90.2231	85.6139	59.2161
CONSTANTE	-6009.79	-4899.71	-4002.69	-3048.4

El StatAdvisor

Esta ventana muestra las funciones usadas para clasificar observaciones. Hay una función para cada uno de los 4 niveles de Muestra. Por ejemplo, la función usada para el primer nivel de Muestra es

$$F1: -6009.79 + 148.637*L + 94.4783*a + 61.5059*b$$

$$F2: -4899.71 + 116.765*L + 71.027*a + 90.223*b$$

Se utilizan estas funciones para predecir a que nivel de Muestra pertenecen las nuevas observaciones. Para mayores detalles, seleccione Tabla de Clasificación de la lista de Opciones Tabulares.

Tabla de Clasificación

Actual Muestra	Tamaño de Grupo	Muestra/Predicho			
		A	B	C	D
A	3	3	0	0	0
		(100.00%)	(0.00%)	(0.00%)	(0.00%)
B	3	0	3	0	0
		(0.00%)	(100.00%)	(0.00%)	(0.00%)
C	3	0	0	3	0
		(0.00%)	(0.00%)	(100.00%)	(0.00%)
D	3	0	0	0	3
		(0.00%)	(0.00%)	(0.00%)	(100.00%)

Porcentaje de casos correctamente clasificados: 100.00%

Grupo	Probabilidad Previa
1	0.2500
2	0.2500
3	0.2500
4	0.2500

Fila	Etiqueta	Grupo Actual	Grupo Más Alto	Valor Más Alto	Distancia Cuadrada	Prob.	2° Grupo Más Alto	2° Valor Más Alto	Distancia Cuadrada	Prob.
1	D	D	D	2994.24	1.47602	1.0000	C	2910.13	169.697	0.0000
2	D	D	D	3015.83	0.713104	1.0000	C	2933.28	165.82	0.0000
3	D	D	D	3126.83	4.22723	1.0000	C	3047.62	162.634	0.0000
4	C	C	C	4004.79	1.41628	1.0000	B	3933.51	143.967	0.0000
5	C	C	C	3944.9	1.09685	1.0000	D	3873.85	143.207	0.0000
6	C	C	C	4050.07	0.523646	1.0000	B	3975.3	150.061	0.0000
7	B	B	B	4769.7	4.6771	1.0000	C	4718.86	106.371	0.0000
8	B	B	B	5092.85	4.50542	1.0000	C	4997.93	194.326	0.0000
9	B	B	B	4828.26	4.68596	1.0000	C	4744.41	172.389	0.0000
10	A	A	A	6011.71	0.00786209	1.0000	B	5874.11	275.208	0.0000
11	A	A	A	6018.5	0.292584	1.0000	B	5874.59	288.108	0.0000
12	A	A	A	5990.83	0.377939	1.0000	B	5863.1	255.841	0.0000

* = incorrectamente clasificado.

El StatAdvisor

Esta tabla muestra los resultados de utilizar las funciones discriminantes derivadas para clasificar observaciones. Se enlistan las dos calificaciones más altas entre las funciones de clasificación para cada una de las 12 observaciones empleadas para ajustar el modelo, así como para cualquier nueva observación. Por ejemplo, la fila 1 tuvo la calificación más alta para Muestra = D y la segunda más alta para Muestra = C. De hecho, el valor verdadero de Muestra era D. Entre las 12 observaciones empleadas para ajustar el modelo, 12, ó el 100.0% fueron clasificadas correctamente. Puede predecir observaciones adicionales agregando nuevas filas al archivo de datos actual, llenar los valores para las variables independientes, pero dejando la celda para Muestra en blanco.

Anexo 2. Cromatogramas (MS).



