



Facultad de Veterinaria
Universidad Zaragoza



Trabajo de Fin de Máster en Calidad, Seguridad y Tecnología de los Alimentos

Evaluación del potencial aromático de diversas variedades de manzana
mediante el estudio sensoquímico de sus precursores

Aromatic potential evaluation of various apple
varieties through the sensory-chemical study of their precursors

Autor/es

Raúl Oliva Palomo

Director/es

Arancha de la Fuente Blanco
Mónica Bueno Fernández

Facultad de Veterinaria
2025-2026

ÍNDICE

RESUMEN	2
ABSTRACT	2
1. INTRODUCCIÓN	3
2. OBJETIVOS	5
3. MATERIALES Y MÉTODOS	5
3.1. REACTIVOS	5
3.2. MUESTRAS	6
3.3. MÉTODOS	6
3.3.1. Preparación de muestras	6
3.3.1.1. Extracción de la pulpa y maceración	6
3.3.1.2. Destilación	7
3.3.1.3. Preparación de reconstituido	8
3.3.1.4. Embolsado e hidrólisis	8
3.3.2. Análisis mediante extracción en fase sólida (SPE) y análisis cuantitativo por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS)	9
3.3.2.1 Preparación de muestra para el análisis por SPE	9
3.3.2.2. Concentración y aislamiento de los precursores mediante SPE	10
3.3.2.3. Análisis cromatográfico	11
3.3.3. Tratamiento de datos	12
3.3.4. Análisis sensorial	13
3.3.4.1. Panelistas	13
3.3.4.2. Tratamiento de datos	13
3.3.5. Relación entre la composición química y los grupos sensoriales	14
4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	14
4.1. Sensorial	14
4.2. Cuantitativo	15
4.3. Relación entre la composición química y los grupos sensoriales	20
5. CONCLUSIONES	24
6. BIBLIOGRAFÍA	25
ANEXOS	27

RESUMEN

La pulpa de manzana es uno de los principales subproductos de la industria de zumos y sidras. Su generación en grandes volúmenes representa un desafío logístico, económico y ambiental significativo que, sin embargo, posee un valor infrautilizado: su contenido en precursores de aroma.

El presente estudio tiene como objetivo central evaluar la relevancia sensorial de los precursores de aroma en diversas variedades de manzana y caracterizar cuantitativamente los compuestos odorantes liberados mediante hidrólisis. Para ello, se ha separado y macerado la pulpa de 24 cultivares de manzana diferentes para obtener un extracto que ha sido sometido a hidrólisis mediante incubación en anoxia a 75°C. Se han evaluado los hidrolizados sensorialmente en términos de aroma orthonasal con el fin de obtener una evaluación preliminar de la potencia y diversidad del aroma. Además, se han analizado los odorantes relevantes obtenidos tras la hidrólisis utilizando extracción en fase sólida (SPE) y cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS).

Este enfoque resulta altamente innovador al analizar el potencial aromático latente de variedades específicas para la elaboración de sidra. La identificación de estos precursores inodoros no solo ofrece una ventaja competitiva para el sector agroindustrial, permitiendo la creación de productos de alto valor añadido, sino que también proporciona una salida sostenible y circular para un residuo industrial.

ABSTRACT

Apple pomace is one of the main by-products of the juice and cider industry. Its generation in large volumes represents a significant logistical, economic, and environmental challenge, but it has an underrated value: its aroma precursor content.

The main objective of this study is to evaluate the sensory relevance of aroma precursors in different apple cultivars and to characterize the quantitatively odor compounds released by hydrolysis. To this end, the pulp of 24 different apple cultivars was separated and macerated to obtain an extract that was subjected to hydrolysis by incubation in anoxia at 75°C. The hydrolysates were evaluated sensorily in terms of orthonasal aroma to obtain a preliminary assessment of aroma potency and diversity. In addition, the relevant odorants obtained after hydrolysis were analyzed using solid-phase extraction (SPE) and gas chromatography coupled with mass spectrometry (GC-MS).

This approach is highly innovative in analyzing the latent aroma potential of specific varieties for cider production. Identification of these odorless precursors not only offers a competitive advantage for the agro-industrial sector, allowing the creation of high value-added products, but also provides a sustainable and circular outlet for industrial waste.

1. INTRODUCCIÓN

La manzana, con 97,3 millones de toneladas producidas fue la tercera fruta más cultivada y comida en el mundo en 2023, siendo China el mayor productor con el 51% del total global. En Europa se produjeron 17,5 millones de toneladas, donde es la fruta más producida solo por detrás de la uva (24,8 millones) (FAOSTAT, 2025). Pese a que España lidera la producción europea de frutas y verduras (Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, 2025), su producción de manzanas se situó en el octavo puesto a nivel europeo con 0,53 millones de toneladas en 2023. Sin embargo, en determinadas regiones de España la producción de manzana es destacable, como en Cataluña, Galicia y Aragón (Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, 2025).

El cultivo tradicional y la selección artificial han permitido el desarrollo de variedades autóctonas adaptadas al clima y los suelos propios de cada región. Sin embargo, estas variedades tradicionales están siendo reemplazadas por otras comerciales de origen extranjero, lo que causa la pérdida del patrimonio agrícola. No obstante, estas variedades autóctonas tienen un alto valor de biodiversidad y pueden presentar características inusuales de gran interés para los consumidores (Martínez et al., 2020). En la selección de manzanas, los consumidores usan principalmente criterios de calidad, como aspectos visuales y propiedades organolépticas tales como el sabor y la textura (Hou et al., 2023). Si nos centramos en el sabor de la fruta, esta es una de las cualidades más características de las manzanas y está determinada por el gusto y aroma. Mientras que el gusto está mayoritariamente determinado por los azúcares y los ácidos orgánicos presentes en la misma, el aroma se asocia a una compleja mezcla, propia de cada variedad, de compuestos volátiles en diferentes proporciones. En manzanas han sido identificados más de 300 compuestos volátiles entre los que se encuentran compuestos de diferentes familias como son ésteres, alcoholes, aldehídos, cetonas y éteres. Sin embargo, muchos de ellos se encuentran en cantidades traza y, a pesar de ello, pueden ser detectadas mediante el olfato y otorgar un olor propio a cada variedad de manzana, siendo la relación de concentración entre todos estos compuestos los que aporten la variabilidad sensorial encontrada en las mismas.

Pero el aroma también está definido por sustancias no volátiles denominadas precursores aromáticos que carecen de actividad odorante por sí mismas. Esto es debido a que estas moléculas están compuestas por una fracción glucídica o azúcar (glicona) unida a una molécula volátil (aglicona) y la molécula volátil o aroma solo se libera mediante la hidrólisis del enlace O-glicosídico entre la glicona y la aglicona, proceso que puede ocurrir a altas temperaturas o por acción enzimática (Hjelmeland et al., 2015). No obstante, el comportamiento de las agliconas tras la hidrólisis varía según su naturaleza: pueden liberarse moléculas directamente odorantes, como alcoholes lineales o terpenos, o producirse compuestos intermedios que requieren reacciones adicionales para volverse volátiles (Sefton et al., 2011). En la Figura 1 se muestran dos ejemplos de mecanismo de ruptura de dos precursores para la liberación del odorante. Asimismo, diversos estudios han investigado la hidrólisis de estos precursores por la microbiota oral y su impacto en la percepción del sabor (Cuadrado-Silva et al., 2022; Parker et al., 2017).

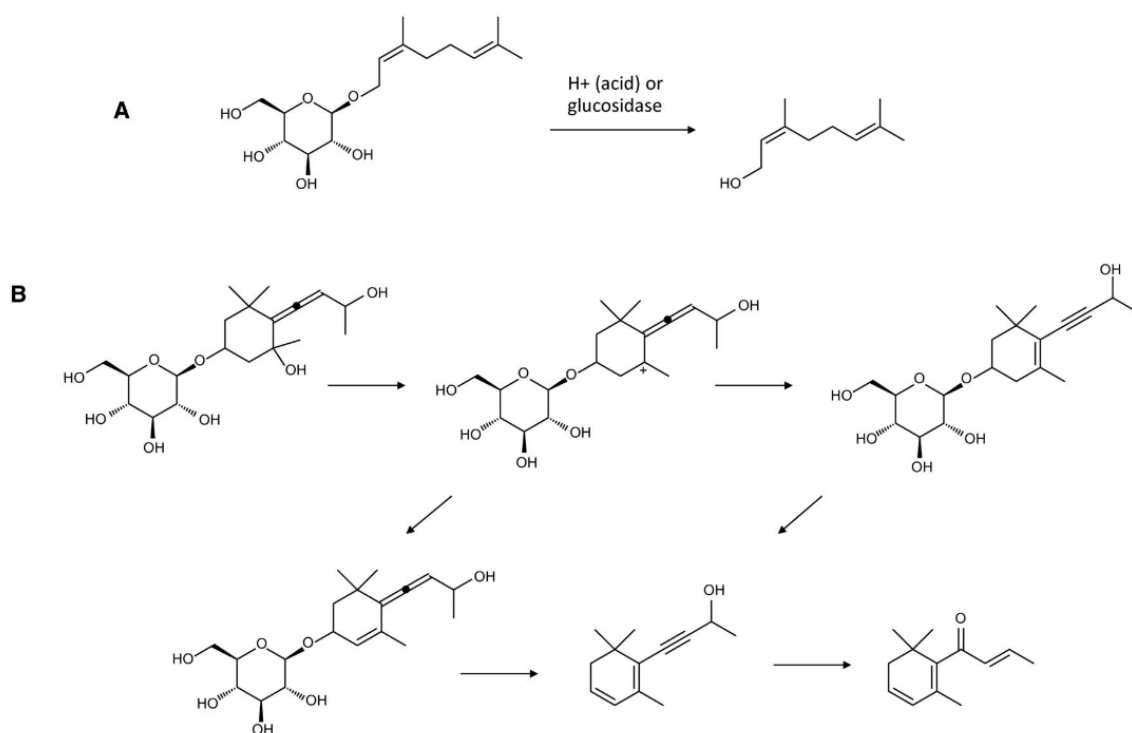


Figura 1. (A) Esquema de hidrólisis de neril- β -D-glucopiranosido a nerol. (B) Formación de β -damascenona propuesta a partir de un precursor glicosídico (Hjelmeland, 2015).

Estos precursores, en el caso de la manzana, están presentes tanto en el zumo como en la pulpa. Sin embargo, la pulpa de manzana es considerada un subproducto que, junto con la piel y las semillas, se generan en grandes cantidades durante la producción de zumo y sidra. Este residuo supone un desafío económico y logístico significativo para las industrias debido a su gran volumen e impacto ambiental (Llavata et al., 2022). Este material representa una fuente infrutilizada de nutrientes y compuestos bioactivos, por ello, algunos estudios han explorado su potencial como alimento funcional y aditivo alimentario gracias a su contenido en minerales, ácidos grasos esenciales, proteínas, antioxidantes y fibra (Thomas et al., 2025). Sin embargo, a pesar de su reconocido valor nutricional, el potencial de la pulpa de manzana como fuente de compuestos aromáticos para mejorar el perfil sensorial de la manzana y sus derivados ha sido poco investigado.

Para el aislamiento de estos precursores se han empleado muchas metodologías, pero la más extendida es la extracción en fase sólida (SPE). Esta metodología se caracteriza por ser un método de preparación de muestras altamente eficaz basado en la distribución selectiva de los analitos entre dos fases. Durante el proceso de extracción, la muestra líquida atraviesa un lecho de partículas adsorbentes por las que los analitos presentan una mayor afinidad que el disolvente original. Posteriormente, estos son recuperados mediante la elución con un disolvente apropiado. Esta técnica simplifica el análisis al concentrar los compuestos de interés y eliminar interferencias de la matriz, tales como grasas, proteínas y pigmentos. Además, frente a otros métodos convencionales, la SPE destaca por reducir el consumo de disolventes y los

tiempos de operación, factores que han consolidado su implementación en numerosos protocolos de análisis estandarizados (Badaway et al., 2022). La técnica SPE ha sido utilizada conjuntamente en cromatografía de gases con detector de masas (GC-MS) para identificar y cuantificar compuestos odorantes en una gran variedad de alimentos como en vinos (Ferreira et al., 2019; Alegre et al., 2020), aceite de oliva (Aparicio-Ruiz et al., 2018), carne (Wettasinghe et al., 2001) y pan entre otros (Drakula et al., 2022).

2. OBJETIVOS

El principal objetivo del presente estudio es evaluar la relevancia sensorial de los precursores de aroma en diferentes variedades de manzana y caracterizar cuantitativamente los compuestos odorantes liberados tras su hidrólisis. Como aspecto novedoso, este trabajo aborda el estudio del potencial aromático asociado a los precursores presentes en manzanas aptas para sidra, lo que podría suponer una clara ventaja competitiva en su procesamiento para generar productos de alto valor añadido.

Para alcanzar este objetivo, se plantean como objetivos específicos: (i) la obtención de extractos acuosos de precursores de aroma a partir de 24 pulpas de manzana mediante maceración con metanol-agua y posterior eliminación del disolvente orgánico; (ii) la hidrólisis de dichos extractos acuosos para la liberación de los compuestos odorantes; (iii) la concentración y aislamiento de los compuestos liberados mediante extracción en fase sólida (SPE) y su cuantificación por GC-MS; y (iv) la evaluación sensorial del aroma generado. Este trabajo persigue objetivos que abarcan desde el dominio instrumental de la cámara de anoxia y el rotavapor, hasta la formación en técnicas de extracción en fase sólida (SPE) y cromatografía de gases-espectrometría de masas (GC-MS). De manera complementaria, se contempla el desarrollo de habilidades transversales en documentación bibliográfica, diseño de experimentos y la metodología necesaria para el correcto tratamiento y discusión de datos científicos.

3. MATERIALES Y MÉTODOS

3.1. REACTIVOS

Los reactivos empleados para el desarrollo de los siguientes procedimientos son fluoruro sódico (Panreac Quimica, España), hidroxibutilanisol (BHA) (SAFC Supply Solutions, EEUU), etanol de grado HPLC (Merck KGaA, Alemania), metanol (pureza $\geq 99,9\%$) de grado de reactivo analítico (Fischer Scientific, Bélgica), diclorometano (99,8%) de grado de pesticidas traza (Fischer Scientific, Bélgica). Los patrones utilizados para la cuantificación se obtuvieron de las casas comerciales Sigma Aldrich (EEUU) y Cymit (España) con una pureza superior al 98%.

3.2. MUESTRAS

Se recolectaron un total de 24 variedades de manzanas aptas para sidra provenientes del Centro de Investigación y Tecnología Agroalimentaria de Aragón (CITA) y de la Universidad Pública de Navarra (UPNA) de la cosecha de 2025. El nombre de cada variedad, el peso de partida, el peso de la pulpa y el rendimiento total de pulpa se encuentran recogidos en la Tabla 1.

Tabla 1: Variedades de manzana empleadas, el peso empleado, el peso de la pulpa y su rendimiento

Variedad	Peso total (g)	Peso pulpa (g)	Rendimiento de la pulpa %
Belleza Roma	2213	417,9	28,62
Royal Gala	2250	443,9	29,63
Emperatriz	2280	503,7	30,78
Esperiega	2420	424,8	25,00
UPNA-0163	2202	416,8	27,22
UPNA-0200	2600	886,1	48,11
UPNA-0095	2367	772,6	48,95
UPNA-0110	1765	402,1	35,88
Golden Delicious	2126	481,8	31,44
MA-299	2317	733,4	45,73
MA-242	2396	627,6	35,92
Reineta	2380	596,0	31,58
Verde Doncella	1971	447,4	30,40
MA-143	2372	615,2	35,66
MA-215	2200	469,4	28,42
MA-221	2060	391,1	25,46
Fuji	2059	399,7	25,60
Reineta Gris	2051	550,6	36,09
Granny Smith	2095	480,0	29,46
UPNA-0073	2500	733,7	46,92
UPNA-0114	2500	575,4	33,04
UPNA-0255	2500	614,2	34,85
UPNA-0026	2500	593,0	33,15
UPNA-0291	2100	434,2	31,66

3.3. MÉTODOS

3.3.1. Preparación de muestras

3.3.1.1. Extracción de la pulpa y maceración

Las manzanas se pelaron, descorazonaron y se partieron en trozos utilizando un pelador de manzanas (Figura 2). Los trozos se licuaron (Magefesa) para separar el zumo de la pulpa. Se pesó el zumo obtenido y se guardó en congelador tras purgarlo con nitrógeno durante 20 minutos por borboteo.



Figura 2: Pelado de las manzanas

La pulpa se pesó en un frasco pyrex de 1 L y se añadió un 0,02% de BHA y 0,004% de NaF en peso de pulpa (% w/w) de los mismos. Posteriormente, se añadió a la pulpa un volumen equivalente en peso (% w/w) de una disolución de metanol/agua al 50%. Esta mezcla se maceró durante 24 h a temperatura ambiente protegida con nitrógeno. La botella que contiene la mezcla se agitó manualmente cada hora para asegurar un buen mezclado.

Tras las 24 h de maceración, la mezcla se centrifugó en una centrífuga Allegra X-22R a 4500 rpm y 4 °C durante 10 minutos. Para asegurarnos de haber retirado toda la pulpa, se separaron los sólidos mediante filtración a vacío, utilizando primero un embudo Buchner y posteriormente una placa filtrante (Figura 3). Este macerado filtrado se borboteó con nitrógeno y se guardó en el congelador hasta su uso.



Figura 3: Filtrado del macerado con placa filtrante

3.3.1.2. Destilación

El macerado filtrado se destiló utilizando un rotavapor Buchi R-215 equipado con una bomba de vacío V-700 a una presión mínima de 18 bar en un baño de agua termostatzado a 25 °C para eliminar el metanol. El proceso se consideró finalizado cuando se destiló al menos la mitad del volumen del macerado (Figura 4). Este macerado destilado (o extracto acuso rotaevaporado) se almacenó en botes de vidrio ámbar. El espacio de cabeza del bote se purgó con nitrógeno y se congeló a -20 °C.



Figura 4: Destilación en rotavapor del metanol

3.3.1.3. Preparación de reconstituido

Se prepararon 250 mL de reconstituido de extracto de pulpa de cada variedad de manzana (Vrec) a partir de las muestras de extracto acuoso rotaevaporadas (Vrot) para reestablecer la concentración que había previamente en los macerados, es decir, el volumen inicial de pulpa (Vmac). Para la reconstitución, se le añadió a cada muestra un volumen de disolución compuesta por agua purificada (usando un sistema de purificación Milli-Q, Millipore, Massachusetts, EE.UU.) y 5 g/L de ácido málico, ajustada a pH=3,8 (Vaq). Dicho volumen se calculó siguiendo la Ecuación 1.

$$V_{aq} = \frac{V_{rec} \cdot V_{rot}}{V_{mac}} \text{ (Ecuación 1)}$$

Donde el volumen de extracto acuoso utilizado es igual al volumen de reconstituido necesario por el volumen de rotaevaporado obtenido y dividido entre el volumen del macerado.

3.3.1.4. Embolsado e hidrólisis

Las muestras anteriormente preparadas se introdujeron en una cámara de anoxia AnaeroGen™ (Thermo Scientific Waltham, Massachusetts, EE.UU.) y se distribuyeron en 12 viales roscados de 20 mL etiquetados con el nombre de la variedad (Figura 5). Estos viales se dejaron abiertos en la cámara durante 30 min para reemplazar todo el aire que pudieran contener por argón. Posteriormente, estos viales se cerraron y se embolsaron en packs de manera que, para cada variedad, dos viales se destinaron para el análisis cuantitativo y diez para el análisis sensorial.



Figura 5. Preparación de viales en el interior de la cámara de anoxia

El embolsado fue doble, de manera que la primera bolsa con viales se termosella a vacío, se introduce dentro de otra y a esta última se le añade carbón activo (AnaeroGen™). Posteriormente, esta segunda bolsa se termosella a vacío. Las muestras embolsadas fueron guardadas en refrigeración a 5 °C hasta su uso.

Para llevar a cabo la etapa de hidrólisis, las muestras embolsadas se introdujeron en una estufa (Memmert 10-800) a 75°C durante 192 horas. Tras este periodo, se sacaron de la estufa, se aminoraron y se guardaron a 5 °C hasta el día siguiente.

3.3.2. Extracción en fase sólida (SPE) y análisis cuantitativo por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS)

3.3.2.1. Preparación de muestra para el análisis por SPE

Tras la hidrólisis se observó la presencia de partículas en suspensión (Figura 6). Por ello, las muestras se centrifugaron en tubos Falcon de 20 mL a 4500 rpm durante 10 minutos a 4°C para evitar que los cartuchos se obturasen posteriormente.

Una vez terminada la centrifugación, se recogió el sobrenadante utilizando una pipeta Pasteur de plástico. A la pulpa de manzana reconstituida hidrolizada y centrifugada se le dio el nombre de “pulpa hidrolizada”.

A continuación, para cada variedad se prepararon por duplicado muestras de 10 mL en matraces aforados. En cada matraz se añadió inicialmente la mitad del volumen final de pulpa hidrolizada, seguido de 66 µL de estándar interno (disolución hidroalcohólica al 40% en etanol y 5,7 mg/L de 2-octanol). Finalmente, los matraces se enrasaron con pulpa hidrolizada.



Figura 6: Muestras tras la hidrólisis con sólidos precipitados en el interior

3.3.2.2. Concentración y aislamiento de los precursores mediante SPE

Los precursores de las muestras fueron concentrados y aislados mediante extracción en fase sólida. Para ello, se prepararon cartuchos de 1 mL con 70 mg de resina Isolute ENV+. Este cartucho se acondicionó antes de pasar las muestras con 2 mL de diclorometano (DCM), 2 mL de metanol (MeOH) y 2 mL de una disolución hidroalcohólica 2% de etanol ajustada a pH=3,8 con 5g/L de ácido málico, todo sin vacío. A continuación, se añadieron los 10 mL de muestra y se percolaron a través del cartucho con un leve vacío (Figura 7) y, por último, se pasaron 1,5 mL de agua destilada sin vacío para eliminar los azúcares.



Figura 7: Percolado de las muestras a través de los cartuchos

Una vez finalizado el lavado se secaron los cartuchos a vacío durante 30 minutos. Los cartuchos secos se eluyeron con 0,8 mL de DCM que contenía un 5% v/v MeOH y se recogió el eluato

en viales de 2 mL (Figura 8), de los cuales 0,2 mL se trasvasaron a viales de inserto para su inyección en el cromatógrafo de gases (GC).

Una vez obtenidos todos los eluatos se tomaron 100 μ L de cada uno de ellos y se juntaron en un mismo vial para generar una mezcla control. Esta mezcla se utilizó para controlar el funcionamiento del GC-MS a lo largo de toda la cola de muestras.



Figura 8: Elución de los cartuchos

3.3.2.3. Análisis cromatográfico

Para el análisis cuantitativo de los extractos se ha empleado el cromatógrafo de gases 8890 GC System (Agilent Technologies, EEUU) (Figura 9) con un detector de masas 5977C GC/MSD y un inyector automático 7693A. La columna instalada en el cromatógrafo es de fase ZB-WAX con unas dimensiones de 30m x 0,25mm x 0,50 μ m.



Figura 9: Cromatógrafo de gases empleado para el análisis

La inyección fue de 2 µL de muestra a 250°C en modo splitless, usando helio como gas portador a 11 psi. El programa de temperaturas del horno fue el siguiente: temperatura inicial de 40 °C por 5 minutos; de 40 a 65 °C fue aumentando 1 °C/min; de 65 a 120 °C fue aumentando a un ritmo de 4 °C/min; luego aumentó a una velocidad de 2 °C/min hasta alcanzar los 145 °C y, por último, hubo otro aumento de temperatura hasta 240 °C a velocidad 4 °C/min. El detector se empleó en modo SCAN entre 40-250 m/z. La línea de transferencia se mantuvo a 240 °C y la fuente de ionización de impacto electrónica (EI) a 230 °C.

3.3.3. Tratamiento de datos

La cuantificación se realizó en áreas relativas en función de las áreas absolutas de cada compuesto y la del 2-octanol utilizado como estándar interno (SI), siguiendo la ecuación 2.

$$\text{Área relativa} = \frac{\text{Área absoluta analito}}{\text{Área absoluta SI}} \text{ (Ecuación 2)}$$

La cuantificación se realizó mediante el cálculo de los factores de respuesta. Para el cual, se prepararon disoluciones sintéticas que contenían concentraciones conocidas de los distintos analitos y estándares internos en DCM (ver Anexo A1). Para cada analito se determinó su FR (Ecuación 3) como el cociente entre el área relativa del analito y su concentración.

$$FR \text{ analito} = \frac{\text{Área relativa analito}}{\text{Concentración conocida}} \text{ (Ecuación 3)}$$

Posteriormente, se obtuvieron las concentraciones de los analitos en las muestras al relacionar el área relativa de los compuestos presentes en las mismas con su FR (Ecuación 4). Como el extracto tiene un volumen de 0,8 mL de DCM/MeOH y hemos partido de 10 mL de hidrolizado de manzana, hay que aplicar un factor de dilución.

$$[\text{Analito en muestra}] = \frac{\text{Área relativa analito}}{FR \text{ analito}} * 0,08 \text{ (Ecuación 4)}$$

Una vez obtenidas las concentraciones de cada compuesto para cada variedad se determinó cuáles de estos compuestos eran significativos mediante un análisis de varianza (ANOVA) de un factor. En él se tomaron las concentraciones de los compuestos en cada réplica como variables cuantitativas y los nombres de las muestras como variable cualitativa.

Para aquellos compuestos con resultado significativo ($p < 0.05$), se llevó a cabo un análisis de componentes principales (PCA) sobre las concentraciones de las réplicas para comprobar la idoneidad del análisis.

A continuación, se realizó un análisis PCA sobre las concentraciones medias obtenidas para cada una de las variedades, con el objetivo de ver su distribución en el espacio. A partir de los vectores propios de los compuestos para cada componente principal (PC), se realizó un Análisis

de Conglomerados Jerárquico (CAJ) con el fin de identificar los compuestos que caracterizan cada variedad.

3.3.4. Análisis sensorial

3.3.4.1. Panelistas

En la tarea participaron un total de 16 panelistas (10 mujeres y 6 hombres de edades comprendidas entre los 23 y 61 años). Los participantes pertenecían al Laboratorio de Análisis de Aroma y Enología (LAAE) y al Centro de Investigación y Tecnología Agroalimentaria de Aragón (CITA).

Muestras: Se partió de 10 viales de 20 mL para cada una de las 24 variedades y una réplica de la variedad UPNA-0200. Para cada variedad los viales se mezclaron en un pyrex de 250 mL para asegurar que la muestra fuera homogénea.

Procedimiento: El análisis sensorial está diseñado con la técnica de agrupación libre, también llamada “free sorting”. Según este procedimiento, para cada una de las 25 muestras de pulpa hidrolizada (correspondientes a las 24 variedades y una réplica de UPNA-0200), se sirvieron 10 mL en copas negras (ISO 3591:1977), etiquetadas con un código de tres dígitos asignado aleatoriamente a cada variedad de manzana. A los participantes se les indicó que evaluaran el aroma de las mismas y las olieran una vez de izquierda a derecha. A continuación, podían olerlas todas las veces que quisieran y en cualquier orden. Posteriormente se les pidió que las agruparan por similitud de aroma. Los panelistas podían clasificar las muestras en tantos grupos como creyeran necesario hasta un máximo de 24 grupos. Una vez creados los grupos, se pidió que describieran cada uno de ellos con un máximo de tres atributos. Las respuestas fueron registradas en tablets utilizando el programa RedJade (RedJade Sensory Solutions LLC, EEUU). Las indicaciones y hoja de respuestas dadas a los participantes están recogidas en el Anexo A2. Este estudio ha pasado el Comité de Ética con número de registro CEISH_2025_6.

3.3.4.2. Tratamiento de datos

Los datos obtenidos se tabularon en una matriz donde los jueces se dispusieron en las filas y las muestras en las columnas. Para cada juez, se indicó el grupo al que asignó cada muestra, generando así una matriz de datos brutos (Figura 10).

Participant	BELLEZA RO	ROYAL GALA	EMPERATRIZ	ESPERIEGA	UPNA-0163	UPNA-0200	UPNA-0095	UPNA-0110	GOLDEN DEL MA-299	MA-242	REINETA	
j1	4	4	4	4	5	3	2	1	4	2	1	3
j2	1	1	4	3	1	1	3	9	8	6	1	2
j3	5	3	5	5	5	2	1	1	4	2	3	5
j4	2	2	2	2	3	4	1	1	2	1	4	1
j5	6	2	2	2	6	3	3	1	5	6	4	3
j6	3	4	2	3	3	1	1	2	4	2	1	3
j7	4	6	7	7	5	9	5	4	6	3	7	5
j8	7	3	4	4	1	3	4	4	1	2	6	4
j9	7	9	8	8	5	2	3	6	2	4	8	6
j10	3	1	6	2	4	5	5	5	1	3	2	6
j11	5	4	1	7	1	7	3	8	8	6	1	8
j12	8	5	7	7	7	7	3	6	5	1	7	5
j13	6	1	1	5	9	1	4	7	5	11	6	10
j14	1	1	3	1	4	3	2	2	3	2	3	3
j15	1	3	4	7	3	12	9	13	2	2	13	13
j16	11	5	6	6	4	9	7	4	4	1	10	9

Figura 10: Matriz de datos brutos con las respuestas de los jueces

A partir de esta, se construyó una matriz de similitud que cuantifica la frecuencia con la que dos variedades fueron agrupadas conjuntamente. Posteriormente, se realizó un Escalamiento Multidimensional (MDS) utilizando el complemento de Excel XLSTAT versión 2022.3.2.1353. Para determinar el número óptimo de dimensiones, se evaluó el parámetro de Stress, seleccionando una configuración con un valor inferior a 0,20. Finalmente, con las dimensiones seleccionadas se llevó a cabo un CAJ. De esta manera, se obtiene un cluster que agrupa las variedades en función de la similitud del aroma entre ellas.

Para conocer los atributos que caracterizan cada muestra y grupo del cluster, se llevó a cabo un proceso de triangulación, en el cual al menos tres personas clasificaron de forma independiente los descriptores en familias semánticas. Durante este proceso, los descriptores se agruparon por similitud terminológica, seleccionando el término más representativo como nombre de cada categoría. Una vez establecidas las clasificaciones individuales, se procedió a una fase de consenso para resolver discrepancias y definir las categorías finales. Tras la categorización, se elaboró una tabla por cada variedad en la que se contabilizó la frecuencia de citación de cada categoría, permitiendo así cuantificar la importancia de cada atributo para cada muestra. Solo se tomaron en cuenta los atributos que tuvieran una frecuencia de citación igual o superior al 19%.

3.3.5. Relación entre la composición química y los grupos sensoriales

La primera etapa para realizar la comparación de los datos cuantitativos y sensoriales fue realizar un ANOVA de los componentes principales del PCA de las medias respecto a los grupos obtenidos del cluster sensorial. Se definieron como variables cuantitativas las puntuaciones factoriales del PCA y como variables cualitativas los grupos deducidos del CAJ sensorial. Este análisis permitió identificar los PCs del PCA que presentan una relación significativa con el análisis sensorial.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Sensorial

Con los grupos obtenidos del sorting se ha elaborado un dendrograma (Figura 11) que muestra la similitud sensorial entre las variedades de manzana. Aquellas variedades que se encuentran en la misma rama comparten grupo sensorial, de manera que comparten unos descriptores de olor similares. Para conocer dichos descriptores, se han calculado las frecuencias de citación de los atributos en cada muestra de acuerdo al procedimiento descrito anteriormente.

Con las frecuencias de citación obtenidas en el sorting, se han elegido los atributos característicos de cada variedad (incluidas en dendrograma completo adjunto en el Anexo 5). Con esos atributos de las variedades individuales se han seleccionado los atributos que caracterizan cada grupo, los cuales se han indicado junto a la rama del CAJ correspondiente a cada grupo (Figura 11).

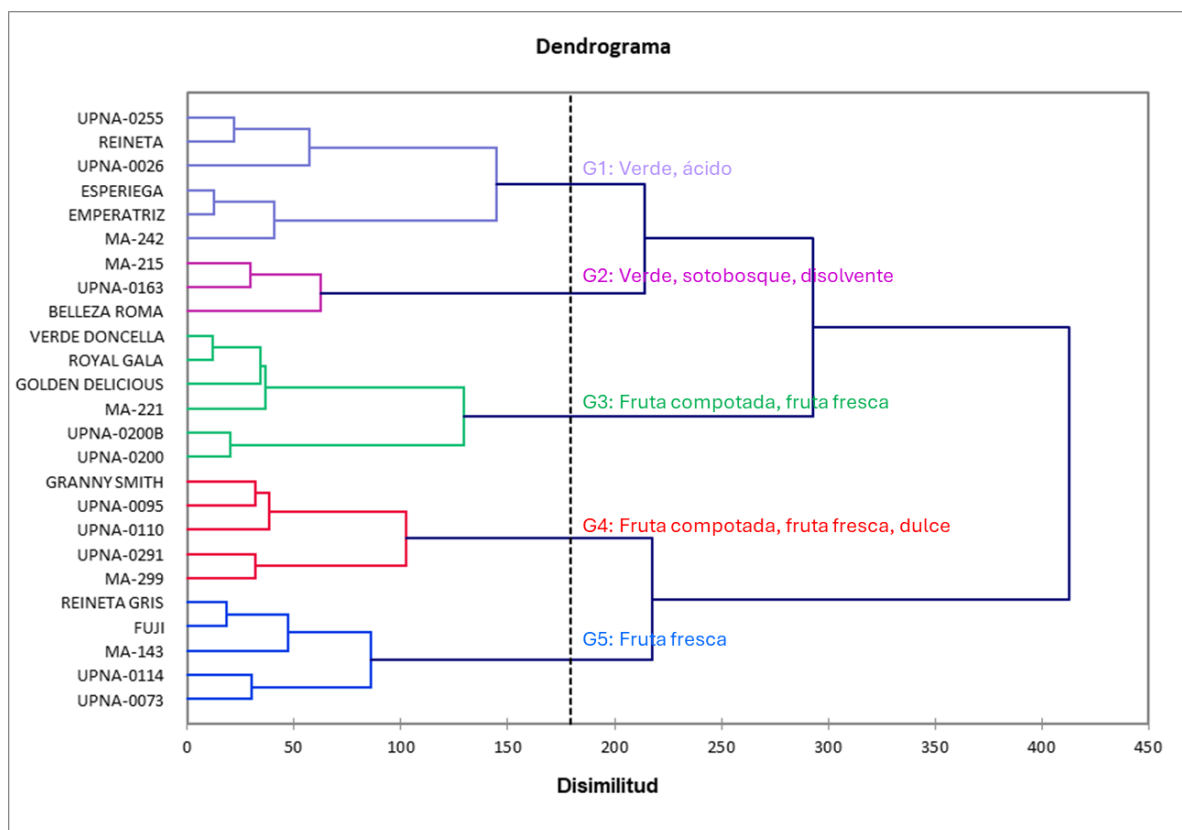


Figura 11: CAJ de las variedades obtenido del sorting

En primer lugar, se puede observar que muestras replicadas introducidas como controles (UPNA_200) se agrupan juntas en el dendrograma, lo que respalda la consistencia del panel.

Se han obtenido cinco grupos distintos a partir de este cluster: 1) El primer grupo está formado por UPNA-0255, Reineta, UPNA-0026, Esperiega y Emperatriz, y presentan olores verdes y ácidos, 2) al segundo pertenecen MA-215, UPNA-0163 y Belleza Roma y se caracterizan por olores verdes, a sotobosque y a disolventes, 3) el tercero lo constituyen Verde Doncella, Royal Gala, Golden Delicious, MA-221 y UPNA-0200, y tienen olor a fruta compotada y fruta fresca, 4) el cuarto agrupa a Granny Smith, UPNA-0095, UPNA-0110, UPNA-0291 y MA-299, y comporten olores a fruta compotada, fruta fresca y dulce, 5) el quinto está formado por las variedades Reineta Gris, Fuji, MA-143, UPNA-0114 y UPNA-0073, y huelen a fruta fresca.

4.2. Cuantitativo

En este estudio se ha caracterizado químicamente el aroma potencial de la pulpa, es decir, el que se libera de los precursores, en 24 variedades de manzana (10 variedades comerciales y 14 variedades autóctonas). Para ello se han cuantificado 50 compuestos odorantes en todas las muestras. Las concentraciones medias junto con su desviación se recogen en los Anexos A3 (variedades comerciales) y A4 (variedades autóctonas) construyéndose por primera vez una base de datos de consulta del aroma potencial de la pulpa.

Para determinar que compuestos generan diferencias entre las variedades, se realizó un ANOVA de un factor para las concentraciones de los diferentes compuestos. La tabla con los compuestos significativos ($p < 0.05$, es decir, con una confianza del 95%) y su coeficiente de correlación de Pearson se encuentra recogida en la Tabla 2. De los 48 compuestos analizados en las muestras, se ha determinado que 8 de ellos no son significativos: dihidro-2-metil-3-furanona, furfural etil eter, lactato de etilo, E-2-octenal, ácido acético, acetilfuran, furfurol y furaneol. Es probable que algunos de estos compuestos provengan de reacciones de Maillard producidas durante la hidrólisis, sin embargo, el lactato de etilo, el E-2-octenal y el ácido acético se puede decir que son compuestos constituyentes de todas las variedades estudiadas.

Tabla 2: Compuestos significativos y no significativos (resaltados en rojo) encontrados en la comparación de las 24 variedades analizadas

Compuesto	F	p	Compuesto	F	p
2,3-pentanedione	4,68	<0,001	ethyl levulate	3,7	0,001
hexanal	5,33	<0,001	phenylacetaldehyde	61,8	<0,001
D-limonene	2,84	0,008	butyric acid	71,5	<0,001
2-methyl-1-butanol	24,03	<0,001	furfurol	1,3	n.s.
t-2-hexenal	23,95	<0,001	ethyl 3-hydroxyhexanoate	1268,8	<0,001
dihydro-2-methyl-3-furanone	1,18	n.s.	2-methylbutyric acid	247,5	<0,001
furfuryl ethyl ether	1,23	n.s.	4-hexanolide	108,4	<0,001
1-hepten-3-one	47,59	<0,001	butyl 3-hydroxybutyrate	227,3	<0,001
ethyl lactate	1,99	n.s.	methionol	15,8	<0,001
1-hexanol	203,80	<0,001	mephaneine	48,4	<0,001
nonanal	9,49	<0,001	methyl nicotinate	1484,0	<0,001
phenol	36,10	<0,001	beta-damascenone	9,8	<0,001
E-2-octenal	1,92	n.s.	furaneol	0,7	n.s.
alpha-angelicalactone	7,73	<0,001	component of texanol	32,6	<0,001
methional	29,21	<0,001	hexanoic acid	65,2	<0,001
furfural	9,46	<0,001	ethyl hexanoate	706,0	<0,001
acetic acid	1,16	n.s.	b-phenylethanol	31,5	<0,001
acetyl furan	1,92	n.s.	2-acetylpyrrole	11,7	<0,001
ethyl 3-hydroxybutyrate	1269,69	<0,001	1-(2-thienyl)-1,2-propanedione	28,3	<0,001
benzaldehyde	3,72	0,001	1,3-octanediol	92,1	<0,001
ethyl 3-hydroxy-2-methylbutyrate	684,43	<0,001	arosol	83,6	<0,001
methyl levulate	16,01	<0,001	eugenol	36,0	<0,001
5-methylfurfural	21,41	<0,001	p-vinylguaicol	74,0	<0,001
isobutyric acid	7,64	<0,001	hemineurine	12,8	<0,001

A continuación, se realizó un PCA con las concentraciones de los compuestos en cada una de las réplicas solamente con los 40 compuestos significativos (Figura 12). De esta manera, se puede comprobar dos cosas: 1) que la mezcla de control se encuentra en el centro del diagrama y, 2) observar cómo están distribuidas las réplicas.

La primera observación, que las réplicas de la mezcla control se ubican en el centro, indica que la cromatografía ha sido adecuada a lo largo de la cola de muestras. También se puede observar que las réplicas de las muestras se encuentran cercanas entre ellas, excepto para la Verde Doncella y UPNA 163, marcadas de color marrón y morado respectivamente, que están ligeramente separadas. Esta diferencia entre réplicas para estas dos variedades puede deberse a que la extracción de las mismas no ha sido perfecta. A pesar de ello se han considerado como similares para tratamientos de datos posteriores.

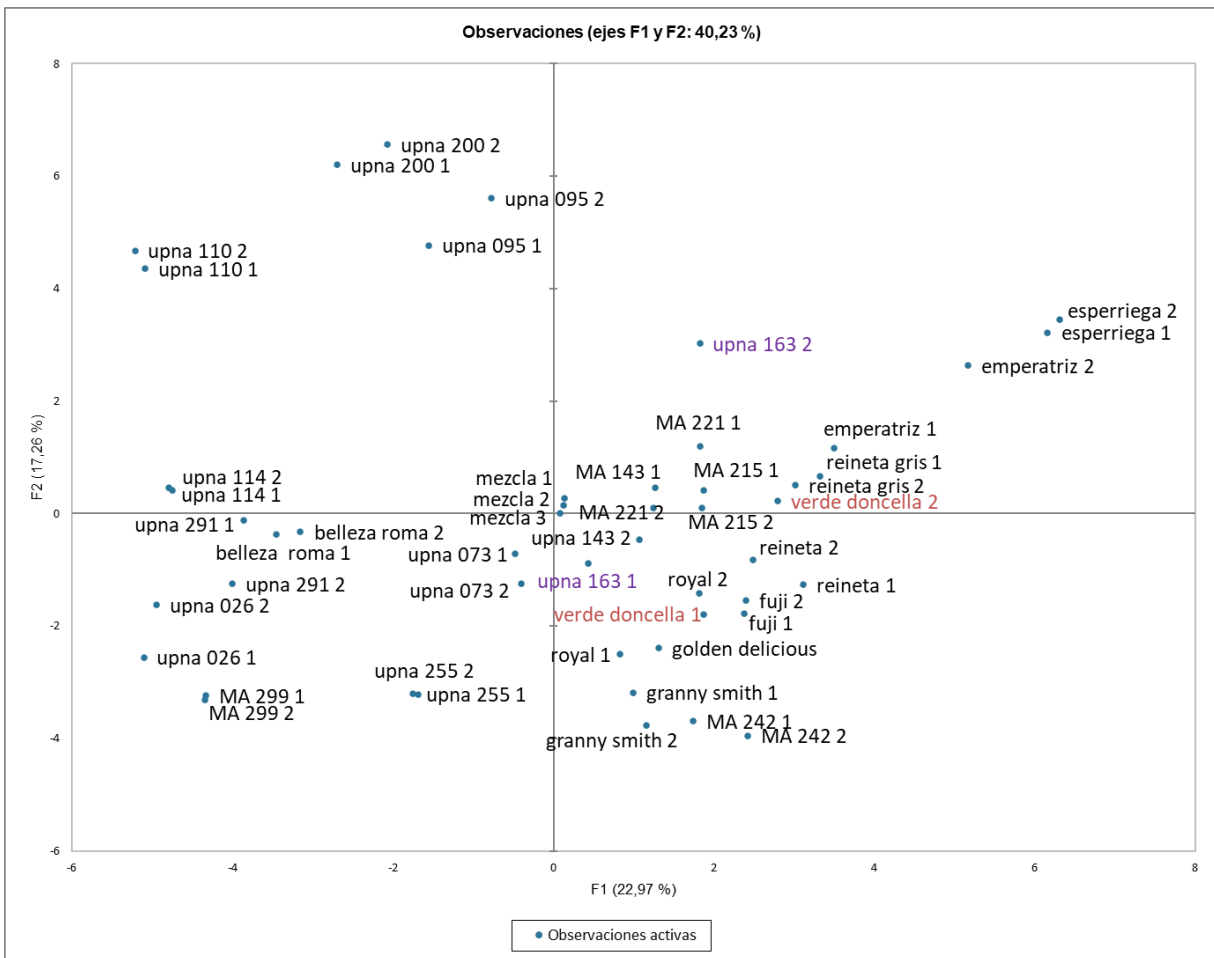


Figura 12: PCA de las concentraciones de los compuestos significativos entre variedades en cada una de las réplicas

De acuerdo a ello, se realizó un análisis PCA sobre las concentraciones medias obtenidas para cada una de las variedades, cuya representación se encuentra recogida en la Figura 13. En este PCA podemos observar cómo están distribuidas las diferentes variedades de forma homogénea en el espacio bidimensional. Este PCA representa un 41,71% de la varianza explicada, donde el PC1 explica un 23,64% y el PC2 18,07%. No obstante, la proyección de las variedades en este espacio no muestra una agrupación clara en función de los grupos sensoriales previamente definidos, lo que indica una ausencia de correspondencia directa entre las dos primeras componentes y la clasificación sensorial.

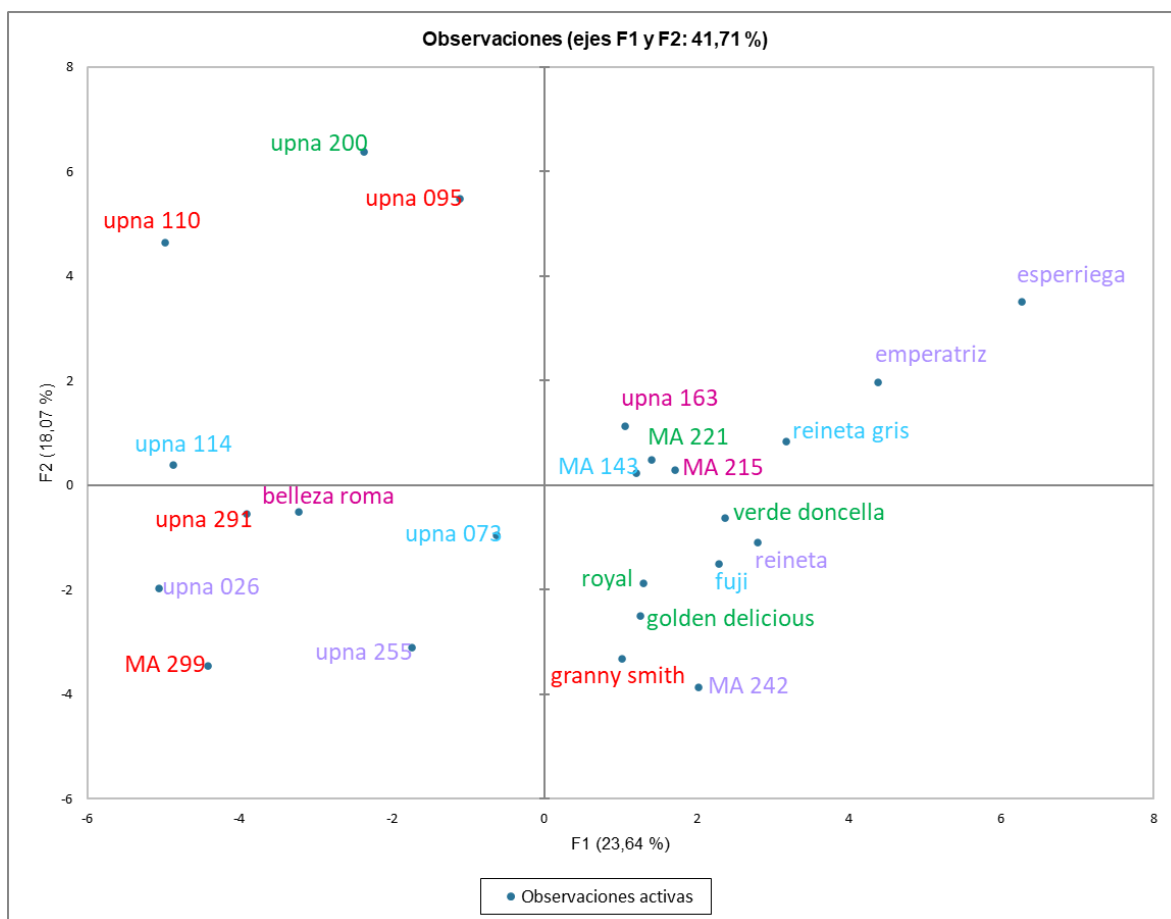


Figura 13: Proyección de las variedades de manzana en el PCA basado en las concentraciones medias de los compuestos significativos entre variedades. Los colores indican el grupo sensorial al que pertenecen. G1(morado), G2 (fucsia), G3 (verde), G4 (rojo), G5 (azul)

La Figura 14 presenta un biplot en el que se muestra la proyección de las variedades de manzana junto con los vectores correspondientes a los compuestos analizados, en función de sus concentraciones. Esta representación permite visualizar las relaciones entre las variedades y los compuestos responsables de su diferenciación en el espacio definido por los dos primeros componentes principales. La longitud y dirección de estos vectores indican la magnitud y el sentido de la influencia de cada compuesto sobre las PCs. Esta influencia se cuantifica mediante los cosenos cuadrados de las variables. Por lo tanto, un valor elevado de coseno cuadrado señala que el compuesto está bien representado en el plano del PCA, siendo determinante para explicar las diferencias observadas entre las variedades.

Prestando atención a la Figura 14 y a los cosenos cuadrados (datos no mostrados), podemos deducir cuales son los compuestos más relevantes para ciertas variedades.

El levulato de etilo, fenol, 5-metilfurfural y 2-acetilpirrol, cuyos cosenos cuadrados son 0,495, 0,452, 0,683 y 0,662 respectivamente, se relacionan con las variedades Emperatriz y Esperriega. Asimismo, el hexanoato de etilo (0,499), 4-hexanolide (0,585), 3-hidroxi butirato de etilo (0,582) y 1,3-octanodiona (0,347) son variables importantes para la variedad UPNA-0110. También se observa cierta correlación del 3-hidroxi-2-metilbutirato de etilo (0,129) y ácido hexanóico (0,405) con las variedades UPNA-0114, UPNA-0291 y Belleza Roma.

analizaron maduras y los compuestos se liberaron a partir de precursores. En este contexto, los aldehídos forman un grupo propio, mientras que alcoholes y ésteres, que comparten vías biosintéticas, se agrupan juntos. Esta organización refleja tanto la relación metabólica entre los compuestos como su abundancia relativa en las muestras analizadas.

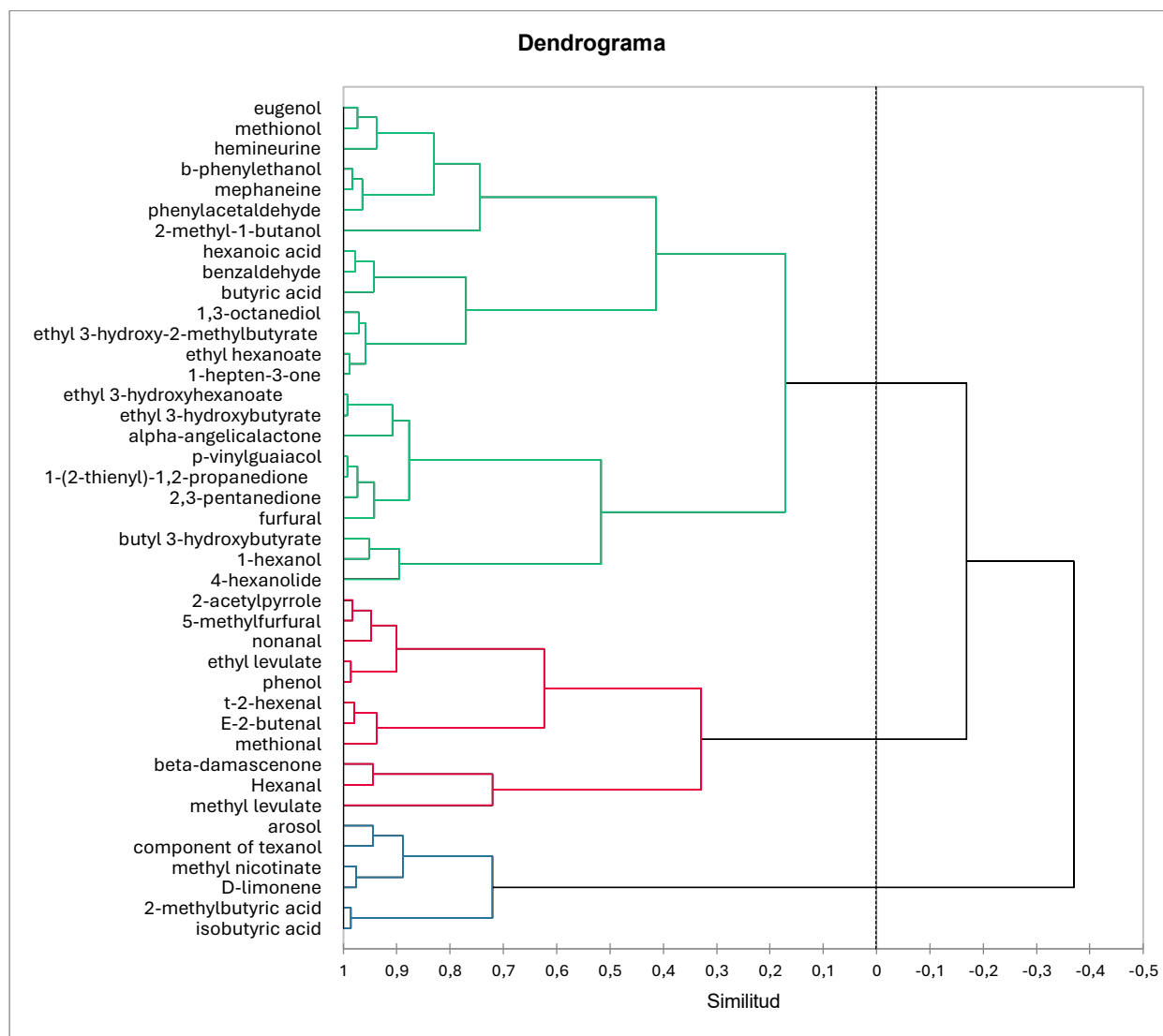


Figura 15: CAJ de los compuestos volátiles basado en los vectores propios del PCA

4.3. Relación entre la composición química y los grupos sensoriales

Para poder relacionar los datos del análisis químico con los del análisis sensorial, se realizó un ANOVA sobre las puntuaciones factoriales (F1-F10, correspondientes a valores propios >1) obtenidos del PCA calculado a partir de las concentraciones medias, considerando como factor fijo los grupos sensoriales deducidos del sorting (G1-G5). La Tabla 3 indica qué componentes principales se relacionan con el análisis sensorial. Como se puede observar de los resultados del ANOVA, solo PC3, PC4 y PC8 diferencian significativamente entre los grupos sensorial.

Tabla 3: Componentes principales (representados como puntuaciones factoriales, F) significativos y no significativos (marcados de rojo)

Componentes principales	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9	F10
F	1,362	0,173	4,039	3,243	0,100	0,718	0,978	3,023	1,977	0,359
p	n.s.	n.s.	0,016	0,035	n.s.	n.s.	n.s.	0,044	n.s.	n.s.

Para la representación posterior se eligieron únicamente los componentes PC3 y PC4 ya que son las dos que representan un mayor porcentaje de varianza de entre ellas. Sobre estas componentes se realizó un PCA, cuyos resultados se muestran en la Figura 16. En este PCA, se puede observar que las variedades se agrupan de forma consistente con los grupos obtenidos del sorting. Se han mantenido los mismos colores asignados en las figuras anteriores.

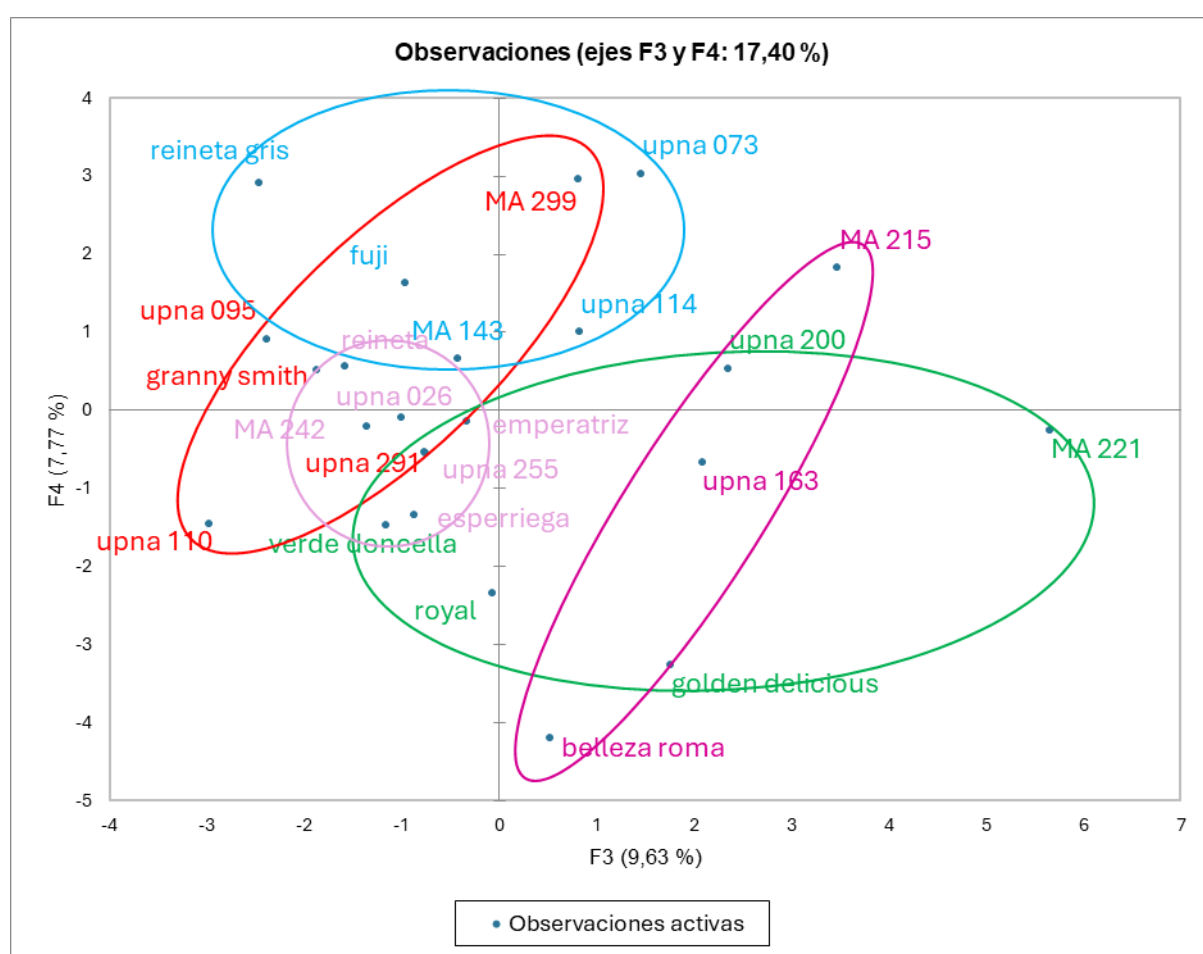


Figura 16: Proyección de las muestras (variedades) en el plano formado por las componentes PC3 y PC4 sensorialmente significativos del PCA de las medias. Los colores indican el grupo sensorial al que pertenecen. G1(rosa), G2 (fucsia), G3 (verde), G4 (rojo), G5 (azul)

El grupo 1 del clúster sensorial está formado por Reineta, UPNA-0255, UPNA-0026, MA-242, Emperatriz y Esperiega, se encuentra en una pequeña zona situada cerca del centro del PCA. El grupo 2, formado por MA-215, UPNA-0163 y Belleza Roma está en la parte derecha. El grupo 3 se sitúa en la parte inferior derecha y pertenecen a él UPNA-0200, Royal Gala, Verde Doncella, Golden Delicious y MA-221. El grupo 4 está formado por MA-299, UPNA-0095,

En esta representación, la disposición de las variedades en el espacio debería confirmar la relación entre la composición química y la percepción sensorial, ya que el espacio está compartimentado según el grupo sensorial al que pertenece la variedad. Por lo tanto, los vectores de los compuestos que apuntan hacia una zona específica actúan como los determinantes para caracterizar el grupo.

- El grupo 1 (verde, ácido) se encuentra cerca del centro, por lo que no hay compuestos con una gran relevancia significativa. P-vinilguaiacol, eugenol y furfural por nombrar algunos, estos compuestos aportan olores tostados y ahumados.
- El grupo 2 (verde, sotobosque, disolvente) está determinado por 2-metil-1-butanol, fenilacetaldehído, levulato de metilo, 1-hexanol y beta-damascenona, compuestos con atributos afrutados, dulces, florales, grasos y pungentes.
- El grupo 3 (fruta compotada y fruta fresca) comparte varios compuestos representativos con el grupo 2, tales son el fenilacetaldehído, levulato de metilo, 1-hexanol y beta-damascenona, aunque tiene otros propios como b-feniletanol, mefaneina, 3-hidroxi-butirato de butilo y E-2-butenal. Sus atributos son afrutados, florales, dulces y pungentes.
- El grupo 4 (fruta compotada, fruta fresca, dulce) tiene como compuestos característicos el 3-hidroxi-butirato de etilo, 3-hidroxi-hexanoato de etilo, arosol y alfa-angelicalactona y p-vinilguaiaco, Estos compuestos tienen atributos afrutados, frescos y dulces que coinciden con los del grupo.
- Por último, el grupo 5 (fruta fresca) viene determinado por ácido isobutírico, texanol, benzaldehído y arosol, cuyos atributos son queso, dulce y floral.

Los descriptores de aroma de los compuestos han sido consultados en la página web www.thegoodscentscompany.com.

A pesar de que la distribución de variedades y compuestos en el PCA tiene una coherencia estadística inicial, se observa que, en ciertos casos, los atributos teóricos de los compuestos no coinciden con los atributos de los grupos sensoriales con los que comparten espacio.

Esta discordancia puede atribuirse a que tal vez no hayan sido incluidos en el análisis cuantitativo ciertos compuestos con importancia sensorial significativa.

Además, la relevancia sensorial de un compuesto no depende únicamente de su concentración sino de su valor de actividad odorante (OAV) relacionado con el umbral de olfativo. Al no conocer los umbrales de olfacción de muchos de los compuestos, no se puede determinar con certeza el impacto sensorial de cada odorante.

Por último, aunque menos probable, se pueden dar interacciones positivas o negativas entre olores presentes en la misma variedad que un análisis como el PCA no logran reflejar.

5. CONCLUSIONES

En este estudio se evaluó el potencial aromático de diversas variedades de manzana mediante el estudio sensoquímico de sus precursores, combinando un enfoque cuantitativo de compuestos liberados tras la hidrólisis de los precursores mediante GC-MS con un análisis sensorial orientado a caracterizar la diversidad percibida de aromas sobre los mismos extractos hidrolizados. Se han encontrado diferencias significativas en la composición química de 24 variedades y se ha constatado la diversidad aromática que presentan, lo que se confirmó mediante análisis estadísticos como ANOVA y PCA.

Aunque la agrupación obtenida mediante el PCA fue sólida, algunas discrepancias entre los atributos de los compuestos y los atributos de los grupos sensoriales sugiere la existencia de compuestos clave no detectados, y/o que el impacto sensorial de los compuestos cuantificados no pudo evaluarse por falta de valores de actividad odorante (OAVs) para muchos de estos compuestos en la matriz estudiada. Esto indica que futuros estudios podrían enfocarse en analizar compuestos adicionales de los que se conoce su presencia en manzanas y obtener sus umbrales de olfacción con el fin de calcular los OAVs.

Los resultados obtenidos en este trabajo contribuyen a conocer el potencial aromático de los precursores en la pulpa de la manzana, información que podría tener aplicaciones en la industria agroalimentaria. La pulpa de manzana, que normalmente se considera un residuo, podría aprovecharse para obtener compuestos volátiles de interés sensorial, susceptibles de incorporarse en diversos productos alimentarios. Además, la valoración de la diversidad aromática entre variedades resalta la importancia de mantener las variedades autóctonas y conservar la biodiversidad, contribuyendo a la preservación del patrimonio genético de las manzanas.

6. BIBLIOGRAFÍA

Alegre, Y., Sáenz-Navajas, M.-P., Hernández-Orte, P. & Ferreira, V. (2020). Sensory, olfactometric and chemical characterization of the aroma potential of Garnacha and Tempranillo winemaking grapes. *Food Chemistry*, 331, 127207. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127207>

Aparicio-Ruiz, R., García-González, D. L., Morales, M. T., Lobo-Prieto, A. & Romero, I. (2018). Comparison of two analytical methods validated for the determination of volatile compounds in virgin olive oil: GC-FID vs GC-MS. *Talanta*, 187, 133-141. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2018.05.008>

Badawy, M. E. I., El-Nouby, M. A. M., Kimani, P. K., Lim, L. W. & Rabea, E. I. (2022). A review of the modern principles and applications of solid-phase extraction techniques in chromatographic analysis. *Analytical Sciences*, 38(12), 1457-1487. <https://doi.org/10.1007/s44211-022-00190-8>

Chen, F., Nollet, L. M. L., Hui, Y. H., Guiné, R. P. F., Isabel Mínguez-Mosquera, M., Pessoa, F. L. P., Sidhu, J. S., Stanfi, P., Martín-Belloso, O., Paliyath, G., le Quéré, J.-L. & Sinha, N. (s. f.). *HANDBOOK OF FRUIT AND VEGETABLE FLAVORS*.

Cuadrado-Silva, C. T., Muñoz-González, C., Giraldo, R., del Pozo-Bayón, M. Á. & Osorio, C. (2022). Bioconversion of Glycosidic Precursors from Sour Guava (*Psidium friedrichsthalianum* Nied.) Fruit by the Oral Microbiota into Odor-Active Volatile Compounds. *Molecules*, 27(4), 1269. <https://doi.org/10.3390/molecules27041269>

Drakula, S., Mustač, N. Č., Novotni, D., Voučko, B., Krpan, M., Hruškar, M. & Čurić, D. (2022). Optimization and Validation of a HS-SPME/GC-MS Method for the Analysis of Gluten-Free Bread Volatile Flavor Compounds. *Food Analytical Methods*, 15(5), 1155-1170. <https://doi.org/10.1007/s12161-021-02076-3>

Espino-Díaz, M., Sepúlveda, D. R., González-Aguilar, G. & Olivas, G. I. (2016). Biochemistry of apple aroma: A review. *Food Technology and Biotechnology*, 54(4). <https://doi.org/10.17113/ftb.54.04.16.4248>

FAOSTAT. (10 de diciembre de 2025). En *Cultivos y productos de ganadería*. <https://www.fao.org/faostat/es/#data/QCL>

Ferreira, V. & Lopez, R. (2019). The Actual and Potential Aroma of Winemaking Grapes. *Biomolecules*, 9(12), 818. <https://doi.org/10.3390/biom9120818>

Hjelmeland, A. K. & Ebeler, S. E. (2015). Glycosidically Bound Volatile Aroma Compounds in Grapes and Wine: A Review. *American Journal of Enology and Viticulture*, 66(1), 1-11. <https://doi.org/10.5344/ajev.2014.14104>

Hou, X., Jiang, J., Luo, C., Rehman, L., Li, X. & Xie, X. (2023). Advances in detecting fruit aroma compounds by combining chromatography and spectrometry. En *Journal of the Science*

of *Food and Agriculture* (Vol. 103, Número 10, pp. 4755-4766). John Wiley and Sons Ltd.
<https://doi.org/10.1002/jsfa.12498>

Llavata, B., Picinelli, A., Simal, S. & Cárcel, J. A. (2022). Cider apple pomace as a source of nutrients: Evaluation of the polyphenolic profile, antioxidant and fiber properties after drying process at different temperatures. *Food Chemistry: X*, 15, 100403.
<https://doi.org/10.1016/j.fochx.2022.100403>

Martínez, R., Legua, P., Hernández, F., Carbonell-Barrachina, Á., Gogorcena, Y., Martínez-Nicolás, J. J. & Melgarejo, P. (2020). Molecular, physico-chemical, and sensory characterization of the traditional spanish apple variety «pero de cehegín». *Agronomy*, 10(8).
<https://doi.org/10.3390/agronomy10081093>

Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación. (2025 de Diciembre de 10). En *Frutas y Hortalizas*. https://www.mapa.gob.es/es/agricultura/temas/producciones-agricolas/frutas-y-hortalizas/informacion_general#ancla4

Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación. (10 de Diciembre de 2025). En *Anuario*. <https://www.mapa.gob.es/es/estadistica/temas/publicaciones/anuario-de-estadistica/2024>

Parker, M., Black, C. A., Barker, A., Pearson, W., Hayasaka, Y. & Francis, I. L. (2017). The contribution of wine-derived monoterpene glycosides to retronasal odour during tasting. *Food Chemistry*, 232, 413-424. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.03.163>

Pérez, A. G. & Sanz, C. (2008). Formation of fruit flavour. En *Fruit and Vegetable Flavour* (pp. 41-70). Elsevier. <https://doi.org/10.1533/9781845694296.2.41>

Sefton, M. A., Skouroumounis, G. K., Elsey, G. M. & Taylor, D. K. (2011). Occurrence, Sensory Impact, Formation, and Fate of Damascenone in Grapes, Wines, and Other Foods and Beverages. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 59(18), 9717-9746.
<https://doi.org/10.1021/jf201450q>

Thomas, F., Abebe, G., Emenike, C. & Martynenko, A. (2025). Sustainable utilization of apple pomace: Technological aspects and emerging applications. *Food Research International*, 220, 117149. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2025.117149>

Wettasinghe, M., Vasanthan, T., Temelli, F. & Swallow, K. (2001). Volatile flavour composition of cooked by-product blends of chicken, beef and pork: a quantitative GC-MS investigation. *Food Research International*, 34(2-3), 149-158. [https://doi.org/10.1016/S0963-9969\(00\)00146-0](https://doi.org/10.1016/S0963-9969(00)00146-0)

ANEXOS

Anexo A1: Concentración (µg/L) de los patrones en las disoluciones sintéticas

Compuesto	CC FR 1 (ug/L)	CC FR 2 (ug/L)	CC FR 3 (ug/L)
2,3-pentanedione	868	1865	3348
Hexanal	169	363	652
1-butanol	2333	5026	8738
heptanal	0	0	0
D-limonene	116	249	448
2-methyl-1-butanol	36	77	138
t-2-hexenal	609	1312	2280
dihydro-2-methyl-3-furanone	59	126	227
furfuryl ethyl ether	0	0	0
1-hepten-3-one	0	0	0
ethyl lactate	4550	9802	17040
1-hexanol	182	391	702
nonanal	250	537	964
phenol	4469	9600	17239
E-2-octenal	0	0	0
alpha-angelicalactone	37	80	143
methional	26	56	101
furfural	22490	48449	84226
methyl 3-hydroxybutyrate	0	0	0
acetic acid	18923	40764	70867
acetylfuran	396	853	1483
ethyl 3-hydroxybutyrate	235	505	908
benzaldehyde	8	24	38
ethyl 3-hydroxy-2-methylbutyrate	0	0	0
methyl levulate	0	0	0
5-methylfurfural	4001	8620	14985
isobutyric acid	869	1873	3256
ethyl levulate	32	70	125
phenylacetaldehyde	48	149	237
butyric acid	384	828	1440
furfurol	2324	5007	8704
ethyl 3-hydroxyhexanoate	11	35	55
4-oxoisophorone	0	0	0
2-methylbutyric acid	2481	5331	9572
4-hexanolide	369	794	1380
butyl 3-hydroxybutyrate	0	0	0
methionol	9	26	42
mephaneine	1	3	5
methyl nicotinate	18	56	90
beta-damascenone	111	238	427
furaneol	8367	18025	31336
texanol	0	0	0
hexanoic acid	222	477	856
ethyl hexanoate	14135	30450	52936
b-phenylethanol	99	212	381
2-acetylpyrrole	90	194	349
1-(2-thienyl)-1,2-propanedione	0	0	0
1,3-octanediol	0	0	0
arosol	220	473	850
eugenol	136	292	525
p-vinylguaiacol	419	900	1616
hemineurine	58	124	223

Anexo A2: Indicaciones y hoja de respuestas del análisis sensorial



Análisis Sensorial

Fecha:

Instrucciones:

1. En frente de usted, tiene una serie de **25 copas** codificadas con un número de 3 dígitos.
2. Le pedimos que **HUELA cada MUESTRA** (exclusivamente por vía **ortonasal**) y que **CONSTITUYA GRUPOS** de copas basándose en la **SIMILARIDAD EN EL AROMA**.
 - a. En primer lugar, le pedimos que huela las muestras de izquierda a derecha. A continuación, puede proceder libremente
 - b. Puede oler las copas tantas veces como necesite y puede utilizar todo el tiempo que necesite para realizar este test.
 - c. Los grupos los debe hacer sobre la mesa, moviendo las copas y agrupándolas físicamente, en función de su similitud aromática
 - d. Un grupo puede, eventualmente, estar constituido por una sola muestra
3. Cuando termine de establecer el orden de las copas sobre el mantel, escriba sobre un post-it **dos o tres atributos** que describan ese grupo.
4. Una vez termine, llame al coordinador, este le dará una Tablet para que traslade sus respuestas.
5. Cuando esté listo, llame al coordinador y este le informará si ha acabado la tarea.

Muchísimas gracias por la colaboración, que disfruten de la cata.



Análisis Sensorial

Fecha:

CODIGO SUJETO.....

GRUPO	CÓDIGOS DE LAS MUESTRAS	ATRIBUTOS (máximo de 2-3 atributos)
GRUPO I		
GRUPO II		
GRUPO III		
GRUPO IV		
GRUPO V		
GRUPO VI		
GRUPO VII		
GRUPO VIII		
GRUPO IX		
GRUPO X		

Anexo A3: Concentración media \pm desviación ($\mu\text{g/L}$) de los compuestos de las variedades de manzana comerciales.

	Belleza Roma	Royal Gala	Esperriega	Emperatriz	Verde Doncella	Fuji	Granny Smith	Reineta Gris	Golden Delicious	Reineta
E-2-butenal	20,71 \pm 0,48	39,63 \pm 6,83	14,08 \pm 0,24	17,84 \pm 4,27	26,16 \pm 7,57	9,30 \pm 2,08	25,69 \pm 3,04	6,62 \pm 0,42	15,24	30,25 \pm 12,90
2,3-pentanedione	67,45 \pm 0,15	92,65 \pm 13,03	103,13 \pm 3,32	110,25 \pm 1,30	87,29 \pm 29,71	90,44 \pm 3,11	84,39 \pm 7,66	107,09 \pm 0,76	70,01	99,16 \pm 5,58
Hexanal	13,08 \pm 0,58	17,08 \pm 3,36	11,53 \pm 1,06	10,11 \pm 3,31	6,78 \pm 0,44	10,94 \pm 0,08	7,07 \pm 0,51	6,07 \pm 0,31	25,26	8,60 \pm 0,39
1-butanol	83,69 \pm 7,85	103,47 \pm 17,27	51,02 \pm 1,95	170,80 \pm 37,64	140,79 \pm 186,81	84,40 \pm 109,10	55,87 \pm 68,63	136,54 \pm 7,75	12,90	130,92 \pm 64,84
D-limonene	18,43 \pm 3,79	14,40 \pm 2,85	14,29 \pm 0,16	17,04 \pm 2,48	7,13 \pm 0,53	13,54 \pm 0,86	12,91 \pm 1,12	12,94 \pm 1,43	11,30	31,89 \pm 16,48
2-methyl-1-butanol	3,14 \pm 0,16	4,60 \pm 0,05	2,72 \pm 0,18	2,74 \pm 0,70	3,69 \pm 0,52	6,08 \pm 0,02	2,18 \pm 0,41	1,79 \pm 0,07	1,54	2,48 \pm 1,45
t-2-hexenal	17,84 \pm 0,80	49,60 \pm 8,84	86,69 \pm 1,01	67,68 \pm 12,39	64,59 \pm 13,73	72,49 \pm 12,61	43,03 \pm 10,55	58,51 \pm 2,18	86,87	77,69 \pm 3,35
dihydro-2-methyl-3-furanone	32,39 \pm 3,15	57,93 \pm 6,15	65,63 \pm 3,69	68,11 \pm 12,87	70,65 \pm 48,07	80,05 \pm 15,69	66,14 \pm 9,64	91,81 \pm 1,95	56,15	122,63 \pm 52,32
furfuryl ethyl ether	0,061 \pm 0,004	0,086 \pm 0,001	0,175 \pm 0,010	0,157 \pm 0,022	0,196 \pm 0,187	0,108 \pm 0,056	0,088 \pm 0,034	0,145 \pm 0,009	0,063	0,153 \pm 0,007
1-hepten-3-one	0,022 \pm 0,004	0	0	0	0,006 \pm 0,003	0	0	0,011 \pm 0,001	0,008	0,011 \pm 0,002
ethyl lactate	11,85 \pm 1,17	29,21 \pm 2,88	27,92 \pm 1,61	21,38 \pm 7,12	24,71 \pm 1,47	24,71 \pm 1,27	18,37 \pm 1,23	25,01 \pm 1,38	20,53	29,92 \pm 15,32
1-hexanol	53,87 \pm 1,26	7,78 \pm 1,04	5,96 \pm 0,01	5,12 \pm 1,79	5,20 \pm 0,00	2,99 \pm 0,03	4,00 \pm 0,01	6,03 \pm 0,31	10,81	8,08 \pm 0,68
nonanal	11,75 \pm 0,81	13,42 \pm 0,13	12,89 \pm 1,18	20,40 \pm 3,29	9,19 \pm 0,59	13,96 \pm 0,55	8,80 \pm 0,67	24,76 \pm 1,86	17,44	23,17 \pm 2,98
phenol	46,54 \pm 0,88	55,48 \pm 0,54	152,13 \pm 1,00	79,24 \pm 3,53	87,86 \pm 1,99	114,71 \pm 2,49	57,37 \pm 0,56	90,91 \pm 4,02	51,91	71,59 \pm 3,21
E-2-octenal	34,08 \pm 0,33	33,17 \pm 0,69	32,79 \pm 0,55	33,12 \pm 0,52	33,54 \pm 0,69	33,17 \pm 0,33	33,01 \pm 0,46	32,72 \pm 0,14	33,12	32,99 \pm 0,14
alpha-angelicalactone	6,17 \pm 0,25	6,59 \pm 0,26	10,10 \pm 0,03	8,45 \pm 0,26	5,85 \pm 0,48	6,73 \pm 0,16	5,65 \pm 0,18	8,11 \pm 0,15	4,62	6,03 \pm 0,58
methional	0,023 \pm 0,001	0,010 \pm 0,001	0,098 \pm 0,003	0	0,047 \pm 0,020	0	0,043 \pm 0,002	0	0,008	0
furfural	50.322 \pm 6.605	59.075 \pm 11.792	88.491 \pm 3.608	56.962 \pm 12.538	51.286 \pm 322	56.253 \pm 442	33.852 \pm 618	68.118 \pm 1.316	54.686	60.691 \pm 8.127
acetic acid	64,63 \pm 0,10	64,36 \pm 16,85	63,82 \pm 12,81	60,15 \pm 10,80	62,56 \pm 24,90	55,78 \pm 11,61	66,88 \pm 4,11	62,00 \pm 3,55	69,05	150,57 \pm 92,79
acetylfuran	21,82 \pm 2,44	41,31 \pm 11,28	66,78 \pm 6,00	61,65 \pm 14,07	73,16 \pm 57,13	45,47 \pm 4,77	28,00 \pm 8,03	68,13 \pm 1,02	35,78	62,24 \pm 2,03
ethyl 3-hydroxybutyrate	294,80 \pm 44,39	0	0	0	170,67 \pm 5,03	0	0	6,56 \pm 2,46	0	0
benzaldehyde	0,57 \pm 0,04	1,16 \pm 0,56	0,64 \pm 0,09	0,77 \pm 0,15	0,83 \pm 0,17	0,85 \pm 0,11	0,81 \pm 0,04	1,00 \pm 0,02	0,98	0,95 \pm 0,18
ethyl 3-hydroxy-2-methylbutyrate	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
methyl levulate	2,55 \pm 0,20	0,59 \pm 0,17	4,63 \pm 0,07	4,30 \pm 0,46	3,23 \pm 0,94	0,77 \pm 0,18	0,82 \pm 0,09	0,70 \pm 0,01	2,15	1,69 \pm 0,22
5-methylfurfural	198,99 \pm 19,44	305,58 \pm 86,45	609,96 \pm 4,82	520,45 \pm 92,67	361,34 \pm 64,38	387,05 \pm 19,46	252,29 \pm 20,57	555,59 \pm 6,54	292,65	483,72 \pm 15,48
isobutyric acid	5,11 \pm 0,26	5,74 \pm 0,41	5,16 \pm 1,29	12,30 \pm 2,54	9,42 \pm 1,84	14,60 \pm 1,69	16,74 \pm 0,28	13,52 \pm 0,78	6,07	12,04 \pm 5,47
ethyl levulate	3,52 \pm 0,46	4,85 \pm 1,05	8,36 \pm 0,38	8,04 \pm 1,43	7,05 \pm 3,39	4,77 \pm 0,55	4,06 \pm 0,29	7,31 \pm 0,14	4,07	6,22 \pm 0,05
phenylacetaldehyde	5,52 \pm 0,65	15,08 \pm 4,90	31,23 \pm 2,79	14,53 \pm 6,20	7,01 \pm 0,46	2,69 \pm 0,02	2,47 \pm 0,10	3,31 \pm 0,19	5,42	6,11 \pm 1,31

	Belleza Roma	Royal Gala	Esperriega	Emperatriz	Verde Doncella	Fuji	Granny Smith	Reineta Gris	Golden Delicious	Reineta
butyric acid	40,65 ± 6,45	19,41 ± 1,29	13,73 ± 1,82	25,45 ± 9,05	18,77 ± 3,00	25,29 ± 1,89	16,02 ± 0,55	29,83 ± 0,18	23,90	44,84 ± 14,73
furfural	115,45 ± 25,27	218,84 ± 24,10	264,16 ± 25,37	209,83 ± 31,60	289,94 ± 231,99	239,49 ± 135,06	173,19 ± 48,22	272,44 ± 21,41	131,47	464,57 ± 188,38
ethyl 3-hydroxyhexanoate	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2-methylbutyric acid	14,48 ± 1,26	27,47 ± 0,54	32,18 ± 3,11	62,32 ± 12,65	303,06 ± 3,02	710,11 ± 28,42	148,73 ± 1,47	44,18 ± 1,45	38,77	31,26 ± 0,69
4-hexanolide	16,71 ± 3,10	4,53 ± 0,58	1,27 ± 0,01	0,94 ± 0,02	1,25 ± 0,55	1,94 ± 0,24	1,08 ± 0,33	2,32 ± 0,11	1,21	3,59 ± 0,22
butyl 3-hydroxybutyrate	307,89 ± 19,59	47,61 ± 1,14	12,25 ± 1,66	26,60 ± 6,37	27,24 ± 6,54	15,47 ± 1,60	0	5,77 ± 2,06	108,20	34,22 ± 1,16
methionol	0,178 ± 0,053	0,005 ± 0,001	0,027 ± 0,000	0	0	0	0	0	0	0
mephaneine	0,287 ± 0,026	0,066 ± 0,010	0,106 ± 0,007	0,222 ± 0,012	0,106 ± 0,000	0,062 ± 0,003	0,163 ± 0,019	0	0,196	0,099 ± 0,004
methyl nicotinate	0,59 ± 0,01	5,08 ± 0,13	0,20 ± 0,02	0,44 ± 0,02	2,06 ± 0,04	7,83 ± 0,17	0,65 ± 0,01	5,08 ± 0,03	2,46	1,05 ± 0,01
beta-damascenone	8,20 ± 0,21	16,43 ± 2,97	13,41 ± 0,02	11,78 ± 3,74	15,14 ± 2,96	13,83 ± 0,00	7,56 ± 1,83	10,07 ± 0,16	22,18	14,24 ± 1,02
furaneol	0,314 ± 0,006	0,735 ± 0,142	1,502 ± 0,045	0,849 ± 0,255	2,577 ± 3,399	1,603 ± 1,972	0,602 ± 0,665	1,447 ± 0,716	0,200	2,665 ± 0,268
component of texanol	0	0	0	0	0,322 ± 0,009	3,019 ± 0,302	3,007 ± 0,353	3,090 ± 0,326	0,588	1,441 ± 0,625
hexanoic acid	22,56 ± 0,56	14,46 ± 3,30	11,09 ± 0,19	14,16 ± 2,75	14,77 ± 1,77	12,93 ± 2,14	9,16 ± 1,06	13,68 ± 0,99	17,35	14,59 ± 0,22
ethyl hexanoate	0,559 ± 0,010	0,081 ± 0,019	0,037 ± 0,003	0,040 ± 0,000	0,165 ± 0,001	0,067 ± 0,002	0,072 ± 0,007	0,337 ± 0,000	0,238	0,359 ± 0,004
b-phenylethanol	8,30 ± 4,14	7,25 ± 2,20	4,50 ± 0,73	4,83 ± 0,43	3,30 ± 0,36	2,91 ± 0,06	2,81 ± 0,30	3,41 ± 0,03	15,51	5,97 ± 0,78
2-acetylpyrrole	3,372 ± 0,288	2,973 ± 0,929	15,739 ± 0,200	14,533 ± 3,108	7,558 ± 6,227	4,814 ± 1,241	2,950 ± 0,778	9,130 ± 0,848	2,858	7,075 ± 0,031
1-(2-thienyl)-1,2-propanedione	1,105 ± 0,092	1,832 ± 0,091	3,664 ± 0,167	2,622 ± 0,465	1,486 ± 0,106	2,182 ± 0,071	1,807 ± 0,043	2,879 ± 0,153	1,759	2,133 ± 0,016
1,3-octanediol	75,24 ± 17,05	14,09 ± 2,07	11,31 ± 0,44	10,82 ± 0,76	29,42 ± 2,00	4,56 ± 1,56	6,48 ± 2,15	41,42 ± 0,27	27,38	38,97 ± 12,05
arosol	6,02 ± 0,76	8,10 ± 0,08	32,85 ± 1,29	12,63 ± 0,64	28,63 ± 3,14	9,17 ± 4,21	61,52 ± 0,17	64,04 ± 1,36	5,91	96,10 ± 2,85
eugenol	7,15 ± 2,60	43,22 ± 3,38	7,61 ± 0,87	6,55 ± 0,24	8,30 ± 0,04	3,23 ± 0,23	2,24 ± 0,01	6,70 ± 0,07	10,35	4,25 ± 0,19
p-vinylguaiacol	45,45 ± 7,70	28,63 ± 0,33	54,70 ± 3,74	80,41 ± 6,79	53,94 ± 4,58	54,56 ± 4,77	32,48 ± 0,27	55,55 ± 0,72	9,69	27,99 ± 0,68
hemineurine	5,15 ± 0,25	10,46 ± 1,70	12,16 ± 4,10	15,22 ± 5,28	0,47 ± 0,25	10,53 ± 1,09	1,26 ± 0,01	8,12 ± 1,30	4,31	5,28 ± 3,43

Anexo A4: Concentración media \pm desviación ($\mu\text{g/L}$) de los compuestos de las variedades de manzana autóctonas.

Name	UPNA 163	UPNA 200	UPNA 095	UPNA 110	MA 221	MA 143	MA 215	UPNA 073	MA 242	MA 299	UPNA 114	UPNA 291	UPNA 255	UPNA 026
E-2-butenal	6,94 \pm 2,95	10,14 \pm 1,91	8,24 \pm 0,47	8,91 \pm 0,39	12,69 \pm 1,80	5,67 \pm 0,62	4,42 \pm 0,68	3,83 \pm 0,52	35,56 \pm 11,00	11,44 \pm 4,43	8,36 \pm 0,13	4,38 \pm 0,41	10,18 \pm 0,71	4,90 \pm 0,08
2,3-pentanedione	102,84 \pm 10,57	112,54 \pm 8,58	114,49 \pm 9,83	114,98 \pm 2,87	89,59 \pm 15,24	83,77 \pm 20,81	106,97 \pm 4,68	86,69 \pm 6,74	70,82 \pm 13,58	57,74 \pm 14,22	76,91 \pm 6,04	79,05 \pm 11,56	65,64 \pm 0,73	68,97 \pm 12,25
Hexanal	12,30 \pm 4,48	7,65 \pm 0,47	4,88 \pm 0,14	7,42 \pm 0,53	11,63 \pm 0,27	8,65 \pm 1,27	7,88 \pm 0,56	13,25 \pm 1,13	9,54 \pm 1,74	10,92 \pm 1,40	6,61 \pm 0,90	11,13 \pm 2,31	9,93 \pm 0,76	11,72 \pm 3,14
1-butanol	160,73 \pm 114,08	115,22 \pm 59,47	101,65 \pm 122,30	169,58 \pm 4,34	80,98 \pm 52,39	106,28 \pm 134,85	92,20 \pm 8,17	123,92 \pm 151,76	95,84 \pm 43,04	48,53 \pm 22,07	125,89 \pm 94,36	226,19 \pm 276,30	83,75 \pm 10,02	185,02 \pm 196,05
D-limonene	6,59 \pm 2,95	5,94 \pm 1,60	4,66 \pm 0,43	4,90 \pm 0,08	9,26 \pm 1,24	10,83 \pm 1,11	9,57 \pm 4,34	13,59 \pm 1,77	31,22 \pm 19,06	28,62 \pm 14,48	14,95 \pm 0,67	15,57 \pm 0,17	14,43 \pm 0,19	13,35 \pm 2,96
2-methyl-1-butanol	9,97 \pm 5,52	17,17 \pm 1,92	2,95 \pm 0,44	4,11 \pm 0,15	16,11 \pm 1,08	3,48 \pm 0,15	6,45 \pm 0,48	2,58 \pm 0,36	2,27 \pm 0,01	12,53 \pm 0,45	10,64 \pm 0,35	10,27 \pm 0,30	4,89 \pm 0,03	5,93 \pm 0,11
t-2-hexenal	45,34 \pm 12,80	46,78 \pm 8,41	12,76 \pm 2,17	29,99 \pm 0,15	80,63 \pm 5,59	21,86 \pm 7,57	50,40 \pm 0,78	44,78 \pm 13,12	74,34 \pm 2,82	9,89 \pm 0,68	13,03 \pm 3,11	16,89 \pm 3,92	21,83 \pm 0,47	7,83 \pm 2,68
dihydro-2-methyl-3-furanone	72,09 \pm 29,29	63,28 \pm 6,08	85,55 \pm 22,86	67,51 \pm 0,24	64,57 \pm 31,83	63,05 \pm 27,31	89,88 \pm 13,85	76,34 \pm 12,48	76,34 \pm 22,84	75,13 \pm 25,96	59,84 \pm 4,49	73,98 \pm 23,36	56,96 \pm 2,56	56,33 \pm 14,53
furfuryl ethyl ether	0,117 \pm 0,048	0,154 \pm 0,031	0,218 \pm 0,102	0,157 \pm 0,009	0,146 \pm 0,097	0,141 \pm 0,095	0,162 \pm 0,026	0,086 \pm 0,033	0,109 \pm 0,002	0,040 \pm 0,000	0,074 \pm 0,024	0,107 \pm 0,072	0,055 \pm 0,007	0,084 \pm 0,048
1-hepten-3-one	0,007 \pm 0,010	0,056 \pm 0,003	0,037 \pm 0,006	0,049 \pm 0,001	0,017 \pm 0,002	0,011 \pm 0,001	0,009 \pm 0,000	0,009 \pm 0,001	0,004 \pm 0,006	0,030 \pm 0,004	0,037 \pm 0,004	0,015 \pm 0,002	0,012 \pm 0,001	0,015 \pm 0,002
ethyl lactate	30,13 \pm 12,08	29,93 \pm 1,70	31,84 \pm 2,10	23,50 \pm 0,26	19,65 \pm 4,17	18,35 \pm 1,28	26,44 \pm 1,06	20,55 \pm 1,27	22,44 \pm 8,53	26,27 \pm 11,42	17,19 \pm 0,72	20,53 \pm 3,03	15,60 \pm 0,03	15,38 \pm 1,23
1-hexanol	13,90 \pm 5,47	79,76 \pm 3,99	10,60 \pm 0,12	25,21 \pm 1,55	13,57 \pm 0,57	4,66 \pm 0,01	7,13 \pm 0,35	8,01 \pm 0,78	3,83 \pm 0,97	19,67 \pm 1,23	19,69 \pm 1,97	13,48 \pm 1,69	13,02 \pm 0,02	16,53 \pm 2,53
nonanal	14,25 \pm 4,34	16,30 \pm 1,74	12,16 \pm 0,44	10,01 \pm 0,56	10,36 \pm 0,14	11,37 \pm 2,30	12,35 \pm 0,73	11,16 \pm 1,68	16,36 \pm 4,95	9,29 \pm 4,55	11,61 \pm 0,92	8,35 \pm 1,08	8,20 \pm 0,24	6,86 \pm 0,51
phenol	78,28 \pm 27,35	96,94 \pm 10,84	71,58 \pm 1,91	60,23 \pm 0,35	76,00 \pm 1,75	73,76 \pm 1,81	81,21 \pm 0,79	87,94 \pm 4,24	74,94 \pm 2,41	20,91 \pm 1,39	49,99 \pm 0,56	46,32 \pm 2,88	32,44 \pm 0,21	59,48 \pm 2,04
E-2-octenal	32,73 \pm 0,42	35,60 \pm 1,03	32,71 \pm 0,45	33,37 \pm 0,65	33,62 \pm 1,19	32,48 \pm 0,10	33,35 \pm 0,74	33,61 \pm 1,08	32,53 \pm 2,07	31,96 \pm 0,73	32,29 \pm 0,59	32,17 \pm 1,35	32,33 \pm 0,22	32,62 \pm 0,24
alpha-angelicalactone	6,74 \pm 2,26	8,11 \pm 0,46	7,43 \pm 0,36	6,29 \pm 0,10	6,43 \pm 0,51	6,83 \pm 0,11	6,44 \pm 0,09	7,92 \pm 0,38	4,77 \pm 0,25	6,23 \pm 0,54	7,22 \pm 0,02	6,99 \pm 0,61	5,64 \pm 0,07	7,38 \pm 0,56
methional	0	0	0	0	0,016 \pm 0,001	0	0	0	0,037 \pm 0,021	0,018 \pm 0,004	0	0	0	0
furfural	63.148 \pm 21.780	73.651 \pm 4.279	87.373 \pm 1.218	79.644 \pm 2.318	48.641 \pm 3.159	65.904 \pm 1.126	45.867 \pm 437	49.130 \pm 1.858	44.936 \pm 5.418	39.912 \pm 4.923	43.784 \pm 174	66.266 \pm 7.319	46.296 \pm 327	46.546 \pm 2.234
acetic acid	87,59 \pm 44,39	92,27 \pm 19,69	73,03 \pm 2,12	56,24 \pm 4,65	64,07 \pm 9,29	77,41 \pm 6,91	61,70 \pm 19,34	57,30 \pm 2,08	130,35 \pm 79,57	152,86 \pm 106,10	70,21 \pm 7,94	80,29 \pm 9,58	84,34 \pm 24,62	82,48 \pm 4,74
acetylfuran	52,24 \pm 17,31	44,45 \pm 8,42	68,90 \pm 46,35	51,98 \pm 0,14	53,63 \pm 25,29	65,06 \pm 31,78	49,57 \pm 1,49	34,15 \pm 12,20	37,68 \pm 1,25	14,19 \pm 0,39	21,42 \pm 4,04	30,99 \pm 14,17	16,41 \pm 0,41	19,87 \pm 11,50
ethyl 3-hydroxybutyrate	17,08 \pm 8,48	8,93 \pm 1,27	876,84 \pm 49,66	76,38	5,69 \pm 8,04	54,59 \pm 0,40	0	0	0	59,52 \pm 6,12	59,63 \pm 2,01	1.066,14 \pm 6,33	0	528,72 \pm 7,88
benzaldehyde	1,43 \pm 0,75	2,26 \pm 0,60	2,40 \pm 0,26	0,82 \pm 0,03	1,18 \pm 0,48	0,93 \pm 0,12	1,87 \pm 0,29	1,91 \pm 0,09	1,25 \pm 0,61	0,80 \pm 0,30	2,42 \pm 0,66	1,41 \pm 0,78	0,75 \pm 0,02	1,48 \pm 0,86
ethyl 3-hydroxy-2-methylbutyrate	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	102,71 \pm 5,42	0	34,79 \pm 2,02
methyl levulate	5,07 \pm 1,86	3,11 \pm 0,14	1,58 \pm 0,50	2,17 \pm 0,12	2,83 \pm 0,62	1,85 \pm 0,19	1,08 \pm 0,09	2,02 \pm 0,17	0,79 \pm 0,03	1,00 \pm 0,10	1,30 \pm 0,00	0,65 \pm 0,13	0,56 \pm 0,06	0,50 \pm 0,05
5-methylfurfural	279,05 \pm 99,29	339,85 \pm 20,75	380,21 \pm 78,55	296,56 \pm 3,25	451,63 \pm 37,55	496,48 \pm 30,40	493,55 \pm 5,12	280,77 \pm 23,96	365,28 \pm 17,99	174,16 \pm 10,56	153,00 \pm 13,38	189,13 \pm 30,82	140,37 \pm 0,45	135,23 \pm 24,10
isobutyric acid	13,58 \pm 6,03	6,46 \pm 0,91	11,04 \pm 1,28	16,57 \pm 0,74	14,91 \pm 2,71	8,21 \pm 1,23	17,30 \pm 0,30	24,27 \pm 0,91	13,55 \pm 3,20	30,97 \pm 10,82	11,37 \pm 0,21	6,86 \pm 1,64	9,11 \pm 0,30	9,74 \pm 0,96

Name	UPNA 163	UPNA 200	UPNA 095	UPNA 110	MA 221	MA 143	MA 215	UPNA 073	MA 242	MA 299	UPNA 114	UPNA 291	UPNA 255	UPNA 026
ethyl levulate	5,44 ± 1,51	6,89 ± 0,79	7,41 ± 3,55	4,17 ± 0,19	5,24 ± 1,43	6,66 ± 1,56	5,67 ± 0,36	3,98 ± 0,25	5,16 ± 0,05	3,33 ± 0,10	2,94 ± 0,28	4,48 ± 0,69	2,59 ± 0,01	3,10 ± 0,71
phenylacetaldehyde	15,30 ± 8,26	3,03 ± 0,17	4,31 ± 0,17	1,32 ± 0,01	63,92 ± 9,20	4,66 ± 0,15	80,21 ± 8,85	3,72 ± 0,13	4,53 ± 1,12	2,95 ± 0,73	1,41 ± 0,01	1,69 ± 0,01	1,99 ± 0,04	1,67 ± 0,02
butyric acid	30,55 ± 13,49	65,71 ± 5,03	31,22 ± 2,57	45,01 ± 2,37	41,05 ± 7,25	19,89 ± 2,16	40,29 ± 1,65	116,36 ± 1,29	21,10 ± 6,55	113,88 ± 30,69	127,04 ± 2,22	64,28 ± 4,87	35,39 ± 1,03	231,86 ± 2,21
furfurol	235,51 ± 109,49	219,70 ± 29,64	296,51 ± 54,28	230,49 ± 2,16	259,11 ± 165,54	236,78 ± 116,38	286,00 ± 16,01	178,87 ± 76,75	336,91 ± 76,51	157,86 ± 68,34	155,33 ± 31,19	208,11 ± 108,48	141,43 ± 2,21	165,81 ± 91,07
ethyl 3-hydroxyhexanoate	0	0	0,151 ± 0,003	0,362 ± 0,015	0	0	0	0	0	0	0,024 ± 0,003	0,146 ± 0,003	0,000 ± 0,000	0,121 ± 0,004
2-methylbutyric acid	160,66 ± 56,70	100,17 ± 2,99	59,94 ± 0,60	53,17 ± 1,49	78,89 ± 6,21	309,01 ± 7,82	102,33 ± 0,19	75,20 ± 8,09	53,22 ± 1,56	3.405,31 ± 316,57	95,10 ± 0,45	1.639,06 ± 19,05	47,64 ± 0,62	232,50 ± 25,39
4-hexanolide	3,72 ± 1,62	14,33 ± 0,43	11,01 ± 0,32	20,78 ± 0,28	2,82 ± 0,21	1,32 ± 0,39	2,14 ± 0,03	2,87 ± 0,23	0,85 ± 0,11	4,32 ± 0,27	9,77 ± 0,03	9,37 ± 0,41	3,61 ± 0,14	12,70 ± 0,10
butyl 3-hydroxybutyrate	52,94 ± 30,50	195,33 ± 4,66	69,76 ± 4,68	337,36 ± 16,95	22,12 ± 2,53	8,22 ± 6,07	16,78 ± 0,50	8,47 ± 0,27	19,18 ± 1,14	61,87 ± 0,36	213,66 ± 9,23	179,61 ± 11,38	63,83 ± 5,20	178,51 ± 2,41
methionol	0	0	0	0	0,024 ± 0,006	0	0	0,014 ± 0,004	0,021 ± 0,011	0,057 ± 0,030	0,063 ± 0,024	0,006 ± 0,002	0	0,002 ± 0,000
mephaneine	0,552 ± 0,171	0,161 ± 0,011	0,068 ± 0,007	0,073 ± 0,001	0,778 ± 0,032	0,145 ± 0,008	0,395 ± 0,007	0,465 ± 0,019	0	0,045 ± 0,063	0,141 ± 0,029	0	0,092 ± 0,011	0
methyl nicotinate	0,86 ± 0,28	0,24 ± 0,00	0,00 ± 0,00	0,40 ± 0,02	1,95 ± 0,02	4,66 ± 0,07	1,49 ± 0,03	4,46 ± 0,09	6,21 ± 0,02	5,27 ± 0,03	0,46 ± 0,01	1,70 ± 0,10	1,02 ± 0,03	2,52 ± 0,09
beta-damascenone	12,80 ± 3,89	13,90 ± 1,39	8,77 ± 1,72	4,63 ± 0,05	16,93 ± 0,92	6,21 ± 1,98	12,81 ± 0,16	6,62 ± 1,38	14,04 ± 1,12	6,38 ± 0,38	6,36 ± 1,52	11,53 ± 3,18	5,15 ± 0,04	3,47 ± 1,12
furaneol	0,517 ± 0,442	0,427 ± 0,265	1,818 ± 2,107	0,824 ± 0,034	2,518 ± 2,851	1,773 ± 1,985	2,392 ± 0,795	0,750 ± 0,788	1,308 ± 0,115	0,071 ± 0,012	0,652 ± 0,188	1,246 ± 1,345	0,759 ± 0,420	0,597 ± 0,706
component of texanol	0	0	0	0	0,409 ± 0,024	0,487 ± 0,040	0,401 ± 0,159	3,036 ± 0,364	1,352 ± 0,717	1,189 ± 0,477	1,195 ± 0,045	1,373 ± 0,018	1,155 ± 0,046	1,096 ± 0,294
hexanoic acid	15,37 ± 6,69	29,67 ± 2,62	15,46 ± 3,50	27,95 ± 1,40	17,81 ± 0,60	14,70 ± 1,45	17,83 ± 0,27	53,56 ± 1,60	11,29 ± 1,83	28,74 ± 0,44	52,07 ± 0,21	29,82 ± 0,87	11,53 ± 0,52	36,31 ± 1,85
ethyl hexanoate	0,124 ± 0,056	1,488 ± 0,001	0,909 ± 0,074	1,443 ± 0,037	0,503 ± 0,014	0,372 ± 0,007	0,271 ± 0,013	0,266 ± 0,014	0,159 ± 0,004	1,191 ± 0,004	0,932 ± 0,023	0,414 ± 0,022	0,373 ± 0,014	0,408 ± 0,006
b-phenylethanol	9,39 ± 3,67	8,40 ± 0,20	4,77 ± 0,14	4,53 ± 0,48	22,63 ± 0,02	4,20 ± 0,30	21,93 ± 0,17	12,75 ± 0,09	5,18 ± 1,35	8,78 ± 0,98	7,38 ± 0,18	9,59 ± 0,31	5,41 ± 0,03	8,29 ± 0,08
2-acetylpyrrole	2,281 ± 0,828	2,467 ± 0,443	3,731 ± 2,101	1,407 ± 0,019	5,119 ± 1,915	6,445 ± 1,936	4,350 ± 0,178	2,802 ± 0,443	3,984 ± 0,314	1,101 ± 0,112	0,474 ± 0,090	0,936 ± 0,412	0,509 ± 0,097	0,568 ± 0,377
1-(2-thienyl)-1,2-propanedione	2,418 ± 0,822	3,713 ± 0,151	4,049 ± 0,060	2,575 ± 0,157	1,922 ± 0,032	1,639 ± 0,029	2,332 ± 0,032	2,155 ± 0,018	1,081 ± 0,004	1,502 ± 0,044	1,868 ± 0,057	1,951 ± 0,030	1,334 ± 0,065	1,437 ± 0,122
1,3-octanediol	26,02 ± 9,01	167,48 ± 0,15	89,36 ± 8,09	82,20 ± 7,76	57,92 ± 0,47	54,05 ± 0,32	41,95 ± 2,73	14,47 ± 0,50	48,53 ± 0,32	135,67 ± 13,78	93,86 ± 0,39	52,34 ± 1,20	30,24 ± 0,08	27,35 ± 2,44
arosol	14,97 ± 6,28	25,30 ± 1,27	13,86 ± 2,38	6,59 ± 0,20	5,12 ± 1,35	10,11 ± 2,39	66,74 ± 2,64	8,96 ± 1,25	54,85 ± 1,97	43,55 ± 0,81	5,00 ± 1,26	17,46 ± 15,17	39,04 ± 0,27	31,75 ± 2,44
eugenol	7,43 ± 1,40	10,16 ± 0,12	4,61 ± 1,55	6,31 ± 2,53	8,78 ± 0,60	9,03 ± 0,91	7,07 ± 0,36	5,11 ± 0,60	3,71 ± 0,46	3,85 ± 0,20	6,93 ± 2,27	35,59 ± 16,22	4,65 ± 0,83	67,06 ± 2,95
p-vinylguaiaicol	44,13 ± 19,51	59,22 ± 1,62	144,92 ± 3,00	68,97 ± 6,24	26,90 ± 1,19	30,62 ± 1,29	19,71 ± 0,03	60,16 ± 0,29	17,01 ± 0,59	11,56 ± 0,34	54,23 ± 0,70	7,25 ± 0,17	2,52 ± 0,16	4,93 ± 0,16
hemineurine	6,08 ± 0,88	20,08 ± 1,47	4,05 ± 1,64	4,90 ± 0,30	15,36 ± 0,38	19,45 ± 0,28	13,09 ± 4,75	9,28 ± 0,20	5,21 ± 0,77	5,92 ± 3,58	4,19 ± 0,22	9,54 ± 2,14	4,16 ± 0,48	1,71 ± 0,09

Anexo A5: CAJ de las variedades con atributos que caracterizan cada muestra y/o grupo

Dendrograma

