

## De Aceites De Origen Vegetal

Pablo R. Duchowicz<sup>1</sup>, Mariano G. Mandelbaum<sup>1</sup> y Alicia B. Pomilio<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), CONICET, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), Diag. 113 y 64, C.C. 16, Sucursal 4, 1900 La Plata, Argentina. marianomandel@gmail.com; pabloducho@gmail.com

<sup>2</sup> Departamento de Bioquímica Clínica, Área Hematología, Hospital de Clínicas "José de San Martín", Universidad de Buenos Aires, CONICET, Av. Córdoba 2351, C1120AAF Buenos Aires, Argentina. abpomilio@sinectis.com.ar; pomilio@ffyb.uba.ar

### INTRODUCCIÓN

La importancia dietaria de los ácidos grasos (AG) reside en el aporte energético (30-35% de la energía total) para la actividad cotidiana del ser humano, adecuadamente repartidos en ácidos grasos saturados, monoinsaturados y poliinsaturados. Este grado de insaturación es un factor dietario relevante y contribuye a los efectos beneficiosos para la salud [1]. Es sabido que las grasas saturadas mejoran considerablemente la palatabilidad de los alimentos, pero, desde el punto de vista nutricional, sus propiedades son negativas para la salud (se asocian a obesidad y

enfermedades cardiovasculares, entre otras) debido a la dificultad metabólica para procesarlas.

La Teoría de las Relaciones Cuantitativas Estructura-Propiedad (QSPR) permite predecir, en base a la estructura molecular, las propiedades que confieren a los alimentos los AG y los aceites naturales que los contienen, desde el punto de vista organoléptico y nutricional [2]. El trabajo actual establece modelos QSPR que tipifican 144 aceites de origen vegetal extraídos de la literatura, compuestos por algunos de los 8 AG indicados en la Fig. 1.

### METODOLOGÍA

La estrategia más directa para establecer un estudio QSPR es el análisis de Regresión Lineal Multivariable (MLR), donde los descriptores moleculares se seleccionan con el Método de Reemplazo (RM) [3]. Se calcularon con programas de libre acceso PaDEL [4], Mold2 [5], Fragmentor [6] y LOVIs [7] 63.709 descriptores de la naturaleza constitucional y topológica de los 8 AG componentes. Los descriptores de cada mezcla ( $d^{mezcla}$ ) se calculan como una

combinación lineal de los descriptores de los AG ponderados por sus respectivas composiciones. Se establecieron conjuntos de calibración (cal) y de validación (val y pred) con los objetivos respectivos de seleccionar los mejores descriptores de la MLR y de determinar la capacidad predictiva del modelo obtenido, con algoritmos programados en OCTAVE [8].

### RESULTADOS

El mejor modelo QSPR establecido involucra 3 descriptores que tipifican los aceites vegetales al predecir el cociente entre los índices de saponificación ( $p_1$ ) y de yodo ( $p_2$ ) de cada aceite:

$$\log_{10}(p_1/p_2) = -0.018 d_1^{mezcla} + 0.101 d_2^{mezcla} + 0.267 d_3^{mezcla} + 0.43$$

$$N_{cal} = 48, R_{cal}^2 = 0.68, RMSE_{cal} = 0.24$$

$$N_{val} = 48, R_{val}^2 = 0.91, RMSE_{val} = 0.09$$

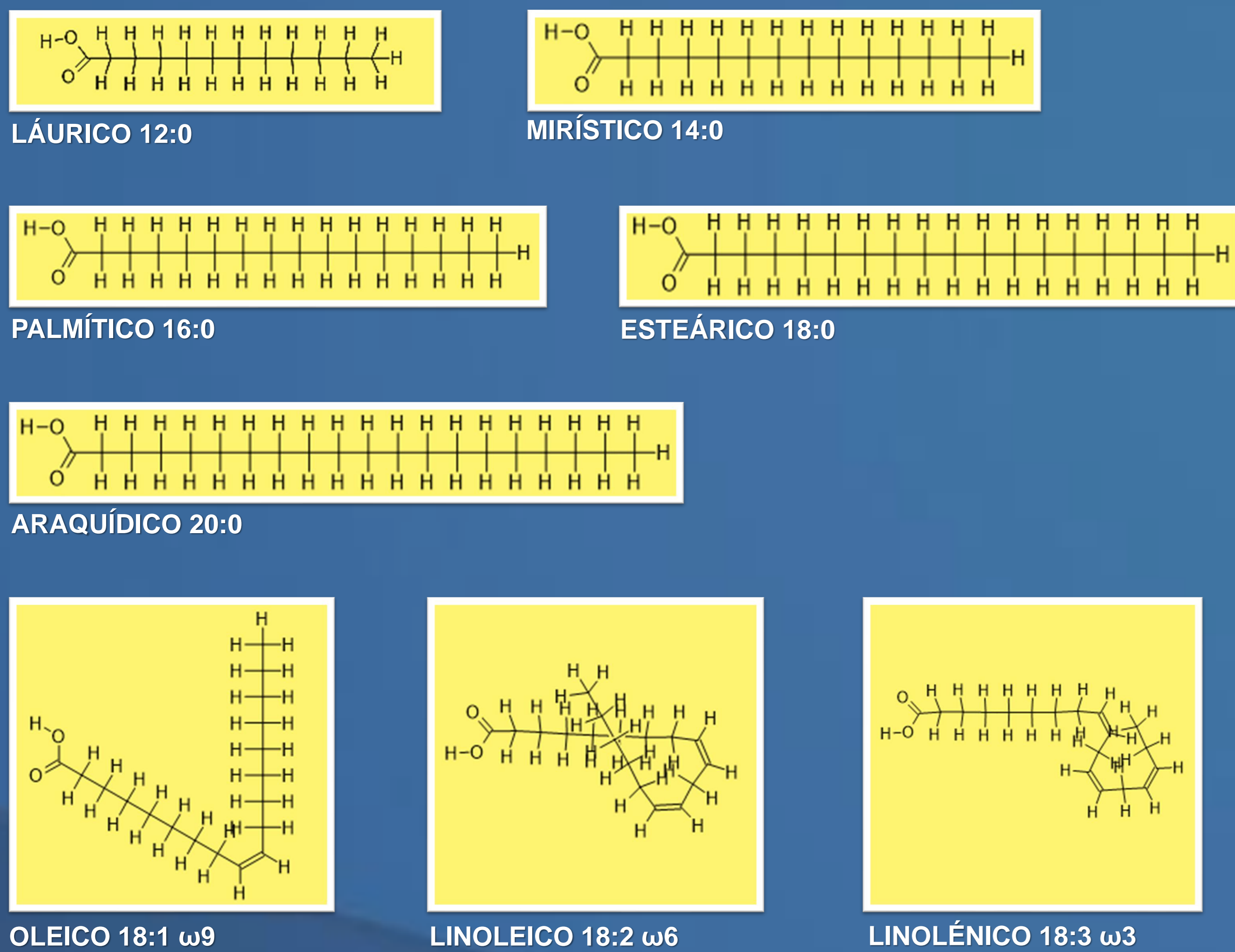
$$N_{pred} = 48, R_{pred}^2 = 0.89, RMSE_{pred} = 0.13$$

donde  $R^2$  es el coeficiente de determinación y  $RMSE$  es la raíz cuadrada del error cuadrático medio.

La importancia del modelo QSPR establecido radica en que, si se tiene un aceite vegetal sin dato experimental del cociente  $p_1/p_2$ , es posible predecir este dato a través de sus descriptores de mezcla y tipificar de esta manera el aceite.

Los 3 descriptores no-conformacionales son topológicos: a)  $d_1$  está asociado a la distancia más larga del AG, y  $d_2$  y  $d_3$  son descriptores algebraicos de LOVIs

Fig. 1 Los 8 ácidos grasos componentes de 144 aceites vegetales.



DISEÑO: ACD/ChemSketch

### CONCLUSIONES

EL ESTUDIO QSPR DE 144 ACEITES VEGETALES PROVENIENTES DE DIFERENTES FUENTES (DIVERSAS PLANTAS), ESTABLECE UN MODELO PREDICTIVO PARA SU DISTINCIÓN Y TIPIFICACIÓN, CON UTILIDAD PROSPECTIVA EN EL ESTUDIO DE SUS CARACTERÍSTICAS NUTRICIONALES Y/O IDENTIFICACIÓN DE ÁCIDOS GRASOS QUE CONTRIBUYEN A MEJORAR LA SALUD HUMANA.

**Agradecimientos:** A CONICET, UNLP y UBA por subsidios e infraestructura. ABP y PD son investigadores de CONICET.

**Referencias:** 1) Lupano, Modificaciones de componentes de los alimentos: cambios químicos y bioquímicos por procesamiento y almacenamiento. FCE, UNLP. Editorial de la UNLP, 2013. 2) Duchowicz *et al* Food Chem. 2013, 140, 210. 3) Duchowicz y col. MATCH 2006, 55, 179. 4) PaDEL 2.20. <http://www.yapcsoft.com>, 5) Hong *et al* (2008) Mold2, molecular descriptors from 2D structures for chemoinformatics and toxicoinformatics. J Chem Inf Model 48:1337. 6) ISIDA/Fragmentor <http://complex-matter.unistra.fr/equipes-de-recherche/laboratoire-de-chemoinformatique/home>, 7) Martínez-López *et al* (2020) When global and local molecular descriptors are more than the sum of its parts: Simple, But Not Simpler? Mol Divers 24:913, 8) OCTAVE 5.2.0, <https://www.gnu.org/software/octave>