

# PERFILAMIENTO DE LÍPIDOS CON POTENCIAL BIOACTIVO EN LA FERMENTACIÓN DE CACAO FINO DE AROMA

Fabio Herrera-Rocha<sup>1\*</sup>, Mónica P. Cala<sup>2</sup>, Jenny Lorena Aguirre Mejía<sup>3</sup>, Claudia M. Rodríguez-López<sup>3</sup>, Sergio Leonardo Florez<sup>3</sup>, María José Chica<sup>3</sup>, Héctor Hugo Olarte<sup>3</sup>, Jorge Duitama<sup>4</sup>, Andrés Fernando González Barrios<sup>1</sup>, Miguel Fernández-Niño<sup>1,5</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Diseño de Productos y Procesos (GDPP), Departamento de Ingeniería Química y de Alimentos, Universidad de los Andes, Bogotá 111711, Colombia.

<sup>2</sup>MetCore - Core Facility de Metabolómica. Vicerrectoría de Investigación y Creación. Universidad de los Andes. Bogotá, Colombia.

<sup>3</sup>CasaLuker S.A. Colombia.

<sup>4</sup>Departamento de Ingeniería de Sistemas y Computación, Universidad de Los Andes, Bogotá 111711, Colombia.

<sup>5</sup>Leibniz-Institute of Plant Biochemistry, Department of Bioorganic Chemistry, Weinberg 3, D-06120 Halle, Germany.

\*Autor presentador

Fabio Herrera-Rocha (email:f.herrera@uniandes.edu.co)

## RESUMEN

Los lípidos son un componente clave del chocolate y otros productos de cacao, y representan más de la mitad del peso seco de los granos de cacao. Aunque el efecto de los lípidos del cacao sobre el perfil de sabor aún no está claro, se ha documentado ampliamente el papel esencial de los lípidos en la calidad de los productos del cacao, principalmente el chocolate. El contenido en lípidos del cacao influye en parámetros de calidad como la textura, el punto de fusión y cristalización del chocolate. Sin embargo, sólo unos pocos estudios han investigado el perfil lipídico del cacao, centrándose en la composición de triglicéridos y ácidos grasos en el cacao y el chocolate negro. Además, se cuenta con poca información sobre la potencial actividad biológica de estos lípidos. En el presente estudio se analizó el lipidoma de la fermentación de cacao fino de aroma utilizando cromatografía acoplada a masas (LC-MS-QTOF) en modo positivo y negativo. Para esto se montaron dos cajones de fermentación, cada uno con 400 kg de masa de cacao. Se utilizó una mezcla de los clones LUKER40, FSV41, FSA13 y TSH565, en las proporciones previamente estandarizadas por la compañía CasaLuker. Se tomaron muestras de 10 granos colectados en distintos puntos en la superficie y el fondo del cajón, al comienzo de la fermentación y luego cada 24 horas por un periodo de 8 días. Un total de tres réplicas fueron colectadas: dos del primer cajón y una del segundo cajón. Todas las muestras se sometieron a un proceso de extracción con n-hexano para obtener la fracción de lípidos la cual se analizó por LC-MS-QTOF. Nuestros resultados revelaron que el lipidoma del cacao está compuesto principalmente por ácidos grasos, glicerofosfolípidos y otros pequeños grupos de lípidos como glicerolípidos, esteroides, esfingolípidos y prenoles. No se observaron variaciones significativas en estos grupos de lípidos durante las fermentaciones de cacao fino de aroma. Además, se exploró la potencial actividad biológica de los lípidos identificados mediante un enfoque de aprendizaje automático, utilizando 8 algoritmos con

arquitecturas diferentes incluyendo Naive Bayes, Árboles de Decisión, Máquinas de Soporte Vectorial y K-Nearest KNeighbors. Se entrenaron todos estos algoritmos utilizando un conjunto de datos con 493 compuestos bioactivos y no bioactivos. Después de optimizar y probar todos los algoritmos, se encontró que K-Nearest KNeighbors tenía el mejor rendimiento. Por lo tanto, se utilizó este modelo para clasificar los lípidos identificados por LC-MS-QTOF en ambos modos. Se logró clasificar un grupo considerable de moléculas como potenciales lípidos bioactivos basándonos en sus descriptores moleculares. Hasta ahora, ninguno de estos compuestos tenía informes previos de actividad biológica. Estos resultados son importantes porque ofrecen un primer filtro para elucidar la actividad biológica de los lípidos presentes en la fermentación de cacao fino de aroma.