



“Enzymatic obtainment of pectin and pectic oligosaccharides from artichoke by-products. Structural characterization and functional evaluation through machine learning”

Autor: **Carlos Sabater Sánchez**

Directoras: Nieves Corzo Sánchez y Antonia Montilla Corredera

Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación, CIAL (CSIC-UAM). Grupo de química y funcionalidad de carbohidratos y derivados.

Universidad Autónoma de Madrid, 22 de noviembre de 2019

Resumen:

Esta Tesis Doctoral tuvo por objetivo la extracción y la caracterización de pectina de alcachofa, así como el estudio de la despolimerización enzimática de la misma para obtener mezclas de oligosacáridos pécticos (POS). Además, se evaluó el posible uso de estos productos como ingredientes funcionales estudiando, tanto su comportamiento en una matriz láctea, como su actividad anti-inflamatoria *in vivo* en un modelo de ratones con colitis inducida por DSS. Con este fin, se optimizó la extracción de pectina de alcachofa utilizando un preparado de celulasa, Celluclast, dando lugar a altos rendimientos. Esta pectina podría ser utilizada como aditivo alimentario (E-440) por su elevado contenido en ácido galacturónico (> 65%). Otras características estructurales de la pectina de alcachofa extraída fueron su alto contenido en azúcares neutros, especialmente arabinosa, la distribución multimodal de masas moleculares y el bajo grado de metil-esterificación que presentó.

Se comparó la extracción enzimática con la extracción convencional mediante citrato sódico y ácido nítrico, y con la extracción asistida por ultrasonidos en combinación con una celulasa. Este último tratamiento podría ser utilizado para obtener pectina de alcachofa a tiempos más cortos, lográndose buenos rendimientos y sin una modificación estructural importante. Por otra parte, se estudió la obtención de POS a partir de pectina de alcachofa, empleando enzimas con diferentes actividades hidrolíticas, y se compararon los perfiles de POS con aquellos obtenidos a partir de pectinas de cítricos y manzana de alto grado de metil-esterificación. Las enzimas Celulasa de *Aspergillus niger* y Pectinex Ultra Olio dieron lugar a elevados rendimientos de POS.

Para elucidar los perfiles estructurales de las cadenas de pectinas y POS a partir de sus espectros de masas (GC-EI-MS), se desarrolló una nueva estrategia de análisis de datos basada en la combinación de algoritmos de aprendizaje automático y la fragmentación *in silico*. Este método computacional también se utilizó para caracterizar diversas estructuras de POS liberadas en pequeñas cantidades durante la elaboración de yogures funcionales con pectina y POS de cítricos y alcachofa. Por último, los estudios *in vivo* revelaron que la pectina de alcachofa redujo la expresión de citoquinas pro-inflamatorias, mostrando una bioactividad mejorada con respecto a la pectina de cítricos. Se establecieron perfiles de expresión mediante redes neuronales artificiales y se observó que el contenido en galactosa de la pectina resultó ser especialmente relevante para conservar su actividad anti-inflamatoria.