

<b>Acronyme</b>	<b>STABOXAL</b>	
<b>Titre</b>	<b>Amélioration de la stabilité oxydative des aliments par la modélisation multi-réactionnelle</b>	
<b>Coordinateur</b>	<b>UR QuaPA – Daudin J-D.</b>	<b>Email : <a href="mailto:jean-dominique.daudin@clermont.inra.fr">jean-dominique.daudin@clermont.inra.fr</a> Tél. : 04 73 87 52 97</b>
<b>Unités impliquées et référents (*)</b>	<b>UMR GeniAL – Cuvelier M-E</b>	<b>Email : <a href="mailto:marie-elisabeth.cuvelier@agroparistech.fr">marie-elisabeth.cuvelier@agroparistech.fr</a> Tél. : 01 69 93 50 03</b>
	<b>UR QuaPA – Gatellier P.</b>	<b>Email : <a href="mailto:philippe.gatellier@clermont.inra.fr">philippe.gatellier@clermont.inra.fr</a> Tél. : 04 73 62 41 98</b>

## RESUME

Comprendre, quantifier et modéliser les mécanismes oxydatifs au sein des aliments dans le but d'améliorer leur stabilité oxydative, c'est contribuer à préserver leurs qualités, technologiques, sensorielles et nutritionnelles, et à réduire le gaspillage en évitant les rebuts tout au long des circuits de distribution. Depuis longtemps, de nombreux travaux sont menés en vue de caractériser les systèmes oxydatifs au sein des aliments mais les efforts sont surtout concentrés sur les méthodes et techniques expérimentales. Ils apportent une compréhension de plus en plus fine des mécanismes impliqués. Toutefois, très peu de ces travaux sont dirigés vers la modélisation des schémas réactionnels alors que l'optimisation des conditions de conservation et de transformation des aliments requiert des modèles mathématiques et les outils de simulation correspondants.

Les deux unités partenaires ont déjà collaboré dans plusieurs projets pour construire des modèles mathématiques des réactions chimiques ayant lieu lors du chauffage des aliments. Elles proposent dans ce projet de développer et valoriser les acquis obtenus récemment et qui ont initié la création d'un simulateur des systèmes oxydatifs des lipides des huiles et des protéines myofibrillaires des viandes.

Les travaux seront guidés par une démarche 'aller-retour' entre, d'une part, des essais réalisés *in vitro* avec des modèles expérimentaux simplifiés mimant soit les huiles soit la viande, et d'autre part, des calculs de simulation, pour tester des hypothèses sur les mécanismes oxydatifs au sein des aliments et prédire leur fonctionnement en fonction du type de milieu réactionnel, de la force ionique, de la teneur en fer, de la teneur en oxygène, du pH et de la température.

Deux objectifs sont visés:

- (1) améliorer notre compréhension des mécanismes oxydatifs pour les modéliser,
- (2) construire un outil mathématique unique de simulation des réactions d'oxydation des aliments qui permettra de capitaliser les connaissances acquises en chimie organique fondamentale et en biochimie des aliments par le biais de la création d'une base de données répertoriant les caractéristiques de chacune des réactions, en particulier leurs constantes de réaction.

Quatre des 6 WP permettront de construire des modèles de complexité croissante en enrichissant progressivement la base de données réactionnelle avec les données manquantes : phase d'initiation des oxydations pour laquelle les teneurs en oxygène et en ions  $Fe^{2+}/Fe^{3+}$  jouent un rôle capital (WP1), phases de propagation des lipides (WP2) et des protéines (WP3) et action des antioxydants, endogènes ou exogènes (WP5). Le WP4 permettra d'évaluer la faisabilité d'une estimation non invasive de plusieurs cinétiques réactionnelles en parallèle par Spectrométrie RMN 2D – Ultra rapide. Le WP 6 permettra de valider le simulateur, pour des conditions différentes de celles ayant permis d'estimer les constantes réactionnelles dans les WP précédents, puis de prospecter par calculs des scénarios d'améliorations pour des produits réels.

La même démarche sera menée dans un projet 'miroir' relatif à la dégradation des lignines. Il sera structuré de la même façon et partagera 3 des 6 WPs (1, 5 et 6). Il sera déposé en parallèle en réponse à l'appel d'offre 'ressourcement' du Carnot 3BCAR.

La version finale du simulateur pourra être exploitée quel que soit le système oxydatif choisi et utilisée facilement par des scientifiques et ingénieurs non familiers des techniques de programmation. La base de données réactionnelles sera ouverte à la communauté scientifique de façon à être enrichie pendant et après la réalisation de ce projet.