

Planteamiento de un modelo matemático de características macroscópicas de bioceras de interés comercial producidas a partir del aceite de palma

Cristian Jahir Murillo-Méndez^{1,a} ; Andrés Fernando Ramírez-Quintero¹ 
Luis Javier López-Giraldo¹ ; Maribel Castañeda-Rodas² 

¹Grupo de Investigación en Ciencia y Tecnología de Alimentos - CICTA. Universidad Industrial de Santander (UIS).
Calle 27 Cra 9. Bucaramanga, Colombia.

²Centro de Innovación y Tecnología- ICP- ECOPEPETROL S.A. Bucaramanga, Colombia.

^acristian.murillo2@correo.uis.edu.co

Fecha recepción: abril 26 de 2022

Fecha aceptación: noviembre 02 de 2022

Resumen

Las bioceras obtenidas por hidrotreamiento de aceites vegetales se utilizan en la elaboración de productos cosméticos. Existen diversos trabajos sobre la composición química de las bioceras; sin embargo, no se encuentran reportes de cómo sus propiedades macroscópicas cambian dependiendo de su composición química. Por lo tanto, este trabajo consistió en implementar modelos matemáticos predictivos para seleccionar bioceras con características deseables para aplicación en la industria cosmética. Se determinaron las propiedades macroscópicas (punto de fusión e índices de acidez, saponificación, yodo) y la composición química (ésteres cerosos, alcoholes grasos, ácidos grasos, acilglicéridos y parafinas) a 34 muestras de bioceras. Se desarrolló un análisis estadístico descriptivo que permitió organizar las bioceras según sus propiedades macroscópicas, asignando una calificación relacionada con la calidad de la muestra; en una escala sobre 4, las calificaciones variaron entre 1,5 y 3,25. También se plantearon modelos matemáticos predictivos para cada propiedad macroscópica de las bioceras en función de su composición química. Se seleccionaron cinco bioceras con mayor puntaje y se calcularon los parámetros fisicoquímicos a través de los modelos obtenidos, observándose un error del modelo menor que 6 % en el punto de fusión e índice de acidez. Estas bioceras seleccionadas podrían ser empleadas en la formulación de cosméticos de interés comercial.

Palabras clave: *Aceite de palma hidrogenado; Estadística descriptiva; Hidrotreamiento; Modelo matemático; Química analítica.*

Cita: Murillo-Méndez CJ, Ramírez-Quintero AF, López-Giraldo LJ, Castañeda-Rodas M. Planteamiento de un modelo matemático de características macroscópicas de bioceras de interés comercial producidas a partir del aceite de palma. rev. ion. 2022;35(2):59-69. doi:[10.18273/revion.v35n2-2022005](https://doi.org/10.18273/revion.v35n2-2022005)

Approach of a mathematical model of macroscopic characteristics of biowaxes of commercial interest produced from palm oil

Abstract

Biowax obtained by hydrotreatment of vegetable oils are used in the manufacture of cosmetic products. There are various works on the chemical composition of biowax. However, there are no reports of how its macroscopic properties change depending on the chemical composition. Therefore, this work consisted in implementing mathematical models to select biowaxes and predict their desirable characteristics for application in the cosmetic industry. Macroscopic properties (melting point and acidity, saponification, iodine indices) and chemical composition (waxy esters, fatty alcohols, fatty acids, acylglycerides and paraffins) were determined for 34 biowax samples. A descriptive statistical analysis was developed that allowed to organize the biowaxes according to their macroscopic properties, assigning a score related to the quality of the sample; on a scale out of 4, the scores varied between 1.5 and 3.25. Mathematical models were also proposed for each macroscopic property of biowaxes based on their chemical composition. Five biowaxes with the highest score were selected and the physicochemical parameters were calculated through the obtained models, observing a model error of less than 6 % in the melting point and acidity index. These selected biowaxes could be used in the formulation of cosmetics of commercial interest.

Keywords: *Analytical Chemistry; Descriptive statistics; Hydrogenated palm oil; Hydrotreatment, Mathematical model.*

Abordagem de um modelo matemático de características macroscópicas de bioceras produzidas a partir de óleo de palma com interesse comercial

Resumo

A biocera obtida por hidrotreatamento de óleos vegetais é utilizada na fabricação de produtos cosméticos. Existem vários trabalhos sobre a composição química da biocera. No entanto, não há relatos de como suas propriedades macroscópicas mudam dependendo da composição química. Portanto, este trabalho consistiu na implementação de modelos matemáticos para selecionar bioceras e prever suas características desejáveis para aplicação na indústria cosmética. Propriedades macroscópicas (ponto de fusão e acidez, saponificação, índices de iodo) e composição química (ésteres cerosos, álcoois graxos, ácidos graxos, acilglicerídeos e parafinas) foram determinados para 34 amostras de biocera. Foi desenvolvida uma análise estatística descritiva que permitiu organizar as bioceras de acordo com suas propriedades macroscópicas, atribuindo uma pontuação relacionada à qualidade da amostra; em uma escala de 4, os escores variaram entre 1,5 e 3,25. Modelos matemáticos também foram propostos para cada propriedade macroscópica das bioceras com base em sua composição química. Cinco bioceras com maior pontuação foram selecionadas e os parâmetros físico-químicos foram calculados através dos modelos obtidos, observando-se um erro de modelo menor que 6 % no ponto de fusão e índice de acidez. Essas bioceras selecionadas poderão ser utilizadas na formulação de cosméticos de interesse comercial.

Palavras-chave: *Estatística descritiva; Hidrotreatamento; Modelo matemático; Óleo de palma hidrogenado; Química Analítica.*

Introducción

La cera obtenida de aceites vegetales (biocera), se utiliza como materia base para la elaboración de productos de uso cosmético, farmacéutico y de alimentos [1–5]. Actualmente, el uso de materias primas renovables es una tendencia en el desarrollo de nuevos productos en la industria de cosméticos [6–8]. En efecto, los consumidores están cambiando sus hábitos de consumo, exigiendo productos que usen materias primas renovables que generen un bajo o ningún impacto negativo en el medio ambiente [9,10].

Mediante procesos como el hidrotatamiento, los cuales son susceptibles de ser manipulados para sintonizar los parámetros de la reacción y la naturaleza del catalizador, pueden obtenerse bioceras de distinta composición química que posean propiedades macroscópicas de interés comercial, que van desde productos cerosos y/o cremosos hasta pastas rígidas [3,11,12]. Estos productos pueden ser potencialmente utilizados como base en la formulación de nuevos productos cosméticos, impactando positivamente en el desarrollo del mercado a nivel departamental y nacional.

Algunos autores declaran que el aceite de palma (*Elaeis guineensis*) puede ser usado como materia prima para la producción de bioceras [2]. Esta materia prima es promisoría porque la palma de aceite puede producir de 6 a 8 veces más aceite que otras oleaginosas, lo que la convierte en la más productiva del planeta por hectárea sembrada [13]. Además, en Colombia hay 478 045 hectáreas de cultivo de palma sostenible y que tienen sello Roundtable for Sustainable Palm Oil (RSPO), distribuidas en 161 municipios, lo que confirma el interés de evaluar esta materia prima para la producción de bioceras de origen natural y sustentables [14].

Diversos trabajos de investigación abordan la caracterización de las bioceras obtenidas tanto en su composición química, como en sus propiedades macroscópicas [15–17]. Esta caracterización resulta determinante puesto que las propiedades macroscópicas de las bioceras (como punto de fusión, acidez, grado de saponificación e índice de yodo) permiten identificar su grado de deterioro, su estabilidad, sus características físicas y el manejo apropiado para el desarrollo de nuevos productos cosméticos [18–20].

Otros trabajos también contemplan la mejora de propiedades físicas de bioceras producidas a

partir de aceites hidrogenados; en este caso el objetivo es manipular las variables del proceso de hidrotatamiento con el fin de obtener ceras con características fisicoquímicas similares a las de las ceras naturales, como por ejemplo las de abejas o carnauba; todo esto se logra porque con la manipulación de las variables de proceso se obtienen modificaciones en el perfil químico de las ceras producidas [21,22]. Sin embargo, a la fecha no hay trabajos que relacionen la composición química con las propiedades macroscópicas de la biocera obtenida.

Es importante destacar que, a través de los valores de sus propiedades macroscópicas, las bioceras se pueden evaluar y organizar de acuerdo con su estabilidad, dureza y manejo [23–25]. La estadística descriptiva es una herramienta eficaz y sencilla para la evaluación de muestras con valores definidos asignados para cumplir con criterios de calidad [26,27].

Dado lo anterior, el objetivo de este trabajo de investigación fue implementar modelos matemáticos que permitan predecir propiedades macroscópicas de bioceras (punto de fusión, índices de acidez, saponificación y yodo) obtenidas del hidrotatamiento del aceite de palma, a distintas condiciones de operación, a partir de su composición química. Esto con el fin de priorizar las bioceras por medio de la evaluación de sus propiedades macroscópicas, tanto experimentales como predichas por los modelos, a fin de obtener productos con alta estabilidad, dureza y manejo, características deseables para la industria cosmética.

Parte experimental

Reactivos

Para la determinación de las propiedades macroscópicas de las bioceras (punto de fusión, índices de acidez, saponificación y yodo), se utilizaron como soluciones estandarizadas $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 0,1 N, HCl 0,5 N, reactivo de Wijs, NaOH 0,1 N. Como reactivos se utilizaron yoduro de potasio, ácido acético, cloroformo y hexano, todos en grado reactivo analítico.

Caracterización fisicoquímica

A cada una de las muestras de bioceras obtenidas por el hidrotatamiento del aceite refinado de palma (ARP) se les determinó su composición química realizando dilución (98:2) en disulfuro de carbono y utilizando un cromatógrafo de gases acoplado con

dos detectores: un detector de masas y un detector de ionización en llama (GC-MS-FID) con puerto de inyección programable para alta temperatura. Para la separación de los componentes se utilizó una columna Agilent DB-HT operando en un rango entre 40 y 400 °C. La composición se expresó en g/100g muestra (%) según las familias de compuestos: parafinas, ácidos grasos, alcoholes grasos, ésteres cerosos y acilglicéridos.

Se determinaron los parámetros fisicoquímicos de punto de fusión, índice de acidez, saponificación y yodo a cada una de las bioceras obtenidas del hidrotreamiento del ARP a distintas condiciones. En todos los casos, la determinación se realizó según lo descrito en la norma NTC 1466 para ceras naturales y sintéticas.

Para la determinación del punto de fusión, se utilizó un fusiómetro con cámara interna y se depositó la muestra en un capilar de vidrio de 1 mm de diámetro. Se observó el cambio de estado de la muestra y se registró la temperatura, en °C, a la cual ocurrió el cambio de fase.

Para la determinación del índice de acidez, se tituló la muestra, disuelta en etanol caliente, con NaOH hasta el punto de equivalencia; el resultado se expresó en mg KOH/g muestra. En la determinación de índice de saponificación, se tituló la muestra, saponificada en KOH etanólico, con HCl; en este caso, el resultado se expresó en mg KOH/g muestra. El índice de yodo se determinó por medio de titulación de la muestra, disuelta en cloroformo y reactivo de Wijs, con Na₂S₂O₃ hasta punto de equivalencia, el resultado se expresó en g I₂/100 g muestra. Los reactivos y las concentraciones se utilizan según la NTC 1466:1998.

Análisis estadístico descriptivo

Una vez determinados los parámetros fisicoquímicos de las bioceras, los valores obtenidos se agruparon por cada parámetro y se desarrolló un análisis estadístico descriptivo usando una aproximación de diagrama de cajas y bigotes. Esto con el fin de obtener los valores de los cuartiles y asignar un puntaje a cada uno.

La calidad de las bioceras está relacionada con altos puntos de fusión y bajos valores de índice de acidez, saponificación y yodo. Por ende, para los puntajes de los cuartiles se establecieron una escala de 1 a 4, siendo 1 y 4 las valoraciones para la menor y mayor deseabilidad, respectivamente, puntajes relacionados con la calidad de las bioceras a través de sus parámetros fisicoquímicos. Por último, se seleccionaron las cinco bioceras con mayores puntajes.

Correlación de parámetros fisicoquímicos con la composición química

Para determinar la correlación de cada parámetro fisicoquímico de las bioceras con su composición química, se realizó un análisis de varianza a los resultados obtenidos. También, se evaluó por medio de la correlación de datos predichos con los datos experimentales.

Se realizó un ajuste a una ecuación con interacciones lineales y cuadráticas que describe cada parámetro fisicoquímico en función de las composiciones de las familias químicas que fueron significativas en el análisis de varianza (ecuación 1).

$$\text{Parámetro fisicoquímico} = A_0 + \sum B_i x_i + \sum C_i x_i^2 \quad (1)$$

Donde A, B y C son parámetros ajustables del modelo y x_i es la composición másica de familias químicas.

Con los modelos obtenidos de cada parámetro, se procedió a calcular la composición química de las bioceras que conduzca al valor máximo del punto de fusión y valores mínimos para los índices de acidez, saponificación y yodo.

Finalmente, se realizó una comparación de los resultados obtenidos del análisis estadístico con los obtenidos a través de la implementación del modelo matemático. El análisis de varianza y el ajuste de los datos a un modelo matemático se

realizó utilizando el software TIBCO Statistica software 13.5 versión de escritorio.

Resultados

Se obtuvieron 34 muestras de bioceras por hidrotreamiento del ARP a diferentes condiciones de reacción. Estas muestras se analizaron por cromatografía de gases para obtener su composición química, agrupando la composición por familias como ésteres cerosos, alcoholes grasos, ácidos grasos, glicéridos y parafinas. Se pueden observar un resumen de los resultados

obtenidos de la composición química de las bioceras en la **Tabla 1** (En el **anexo A** se muestran todos los resultados obtenidos).

Tabla 1. Valor máximo y mínimo de los resultados de la composición química de las bioceras obtenidas.

Composición química	Proporción másica %	
	Mínimo	Máximo
Ésteres cerosos	1,89	35,64
Alcoholes grasos	0,00	8,65
Ácidos grasos	0,00	16,68
Glicéridos	19,90	96,09
Parafinas	2,01	41,10

Se determinaron los parámetros fisicoquímicos punto de fusión, índice de acidez, índice de saponificación e índice de yodo para las muestras de bioceras obtenidas. Se pueden observar un resumen de los resultados obtenidos de los parámetros fisicoquímicos de las bioceras y de la materia prima implementada en la reacción (carga ARP) en la **Tabla 2** (en el **anexo A** se muestran todos los resultados obtenidos).

Tabla 2. Valor máximo y mínimo de los resultados de los parámetros fisicoquímicos de las bioceras obtenidas y resultados de valores fisicoquímicos de ARP.

Parámetro fisicoquímico	Valor		ARP
	Mínimo	Máximo	
Punto de fusión, °C	23,9	51,6	< 21
Índice de acidez, mg KOH/g	1,79	28,77	0,11
Índice de yodo, g I ₂ /100 g	1,05	51,77	49,72
Índice de saponificación, mg KOH/g	122,85	191,83	195,26

Se desarrolló el análisis estadístico descriptivo a todos los datos de los parámetros fisicoquímicos de las bioceras y se elaboró un diagrama de cajas y bigotes para cada parámetro (**Figura 1**). Se identificaron los valores que delimitan los cuartiles para cada parámetro fisicoquímico y se asignó un puntaje para cada cuartil con el que se pudo clasificar las bioceras según su calidad. Los puntajes se establecieron de 1 a 4, donde 1 es de menor calidad y 4 es de mayor calidad (**Tabla 3**).

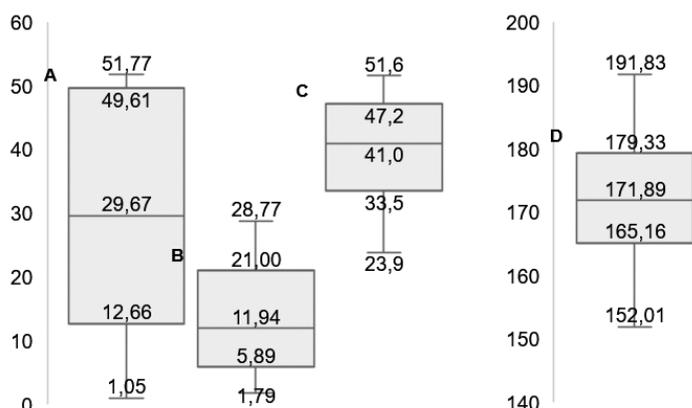


Figura 1. Diagramas de cajas y bigotes donde se establecen los cuartiles de cada parámetro: A: punto de fusión (°C), B: índice de acidez (mg KOH/g muestra), C: índice de yodo (g I₂/100 g muestra) y D: índice de saponificación (mg KOH/g muestra).

Tabla 3. Asignación de puntajes a los parámetros fisicoquímicos evaluados para la calificación de las bioceras.

Índice de yodo, g I ₂ /100 g	Índice de acidez, mg KOH/g muestra	Índice de saponificación, mg KOH/g muestra	Punto de fusión, °C	Puntaje asignado
< 12,66	< 5,89	< 165,16	> 47,2	4
12,66 – 29,67	5,89 – 11,94	165,16 – 171,89	41,0 – 47,2	3
29,67 – 49,61	11,94 – 21,00	171,89 – 179,33	33,5 – 41,0	2
> 49,61	> 21,00	> 179,33	< 33,5	1

Una vez obtenidos los valores que delimitan los cuartiles, se asignó el puntaje de cada parámetro para cada biocera de acuerdo con el valor obtenido y se obtuvo un puntaje promedio (asignando cada

parámetro con el mismo peso). Las bioceras obtenidas tuvieron puntajes desde 1,5 hasta 3,25 (**Anexo A**). Se seleccionaron cinco muestras de bioceras que tuviesen el mayor puntaje (**Tabla 4**).

Tabla 4. Bioceras con mayor puntaje asignado mediante estadística descriptiva (método de cajas y bigotes).

Biocera	Valores obtenidos experimentalmente				Puntajes asignados				Puntaje promedio
	Rango de fusión, °C	Índice de acidez, mg KOH/g	Índice de yodo, g I ₂ /100 g	Índice de saponificación, mg KOH/g	Rango de fusión	Índice de acidez	Índice de yodo	Índice de saponificación	
BPC1-03	47,9	26,25	1,05	143,55	4	1	4	4	3,25
BPC1-07	44,9	22,36	9,71	153,67	3	1	4	4	3,00
BPC5-01	42,7	10,87	23,70	152,01	3	3	3	4	3,25
BPC5-03	40,2	8,32	21,16	122,85	2	3	3	4	3,00
BPC7-03	43,3	10,47	18,78	132,37	3	3	3	4	3,25

Seguidamente, cada parámetro fisicoquímico se ajustó a un modelo matemático que calcula y predice el valor usando la composición química de cada familia presente en las bioceras (**Tabla 5**). Se determinaron los modelos matemáticos y el

porcentaje de correlación para los modelos de cada parámetro fisicoquímico: punto de fusión, índice de acidez, índice de saponificación e índice de yodo (**Tabla 6**).

Tabla 5. Resultados de composición química de las bioceras seleccionadas.

Biocera	Composición %				
	Parafinas	Ácidos grasos	Alcoholes grasos	Ésteres cerosos	Acilglicéridos
BPC1-03	31,3	15,3	5,8	25,4	22,2
BPC1-07	15,2	13,8	5,5	35,6	30,0
BPC5-01	28,4	8,8	2,1	23,7	37,1
BPC5-03	40,0	11,1	2,3	26,7	19,9
BPC7-03	13,3	14,5	13,5	34,5	24,2

Tabla 6. Modelos matemáticos de las características fisicoquímicas de las bioceras analizadas.

Parámetro fisicoquímico	Modelo matemático	R ² del modelo, %
Rango de fusión, °C	$= -1246 + 13,4p + 15,5f + 12,3a + 12,6e + 12,4g - 0,0143p^2 - 0,08f^2 + 0,105a^2 - 0,0031e^2 + 0,0036g^2$	40,08
Índice de acidez, mg KOH/g	$= -246 + 3,5p + 2,3f + 0,3a + 4,1e + 2,0g - 0,0279p^2 + 0,059f^2 + 0,188a^2 - 0,0326e^2 + 0,00446g^2$	69,30
Índice de yodo, g I ₂ /100 g	$= -503 + 1,8p + 0,8f + 7,3a + 2,0e + 8,5g + 0,0831p^2 + 0,138f^2 + 0,216a^2 + 0,0833e^2 - 0,0293g^2$	67,70
Índice de saponificación, mg KOH/g	$= 82 + 0,8p - 2,5f + 0,5a - 0,1e + 2,2g - 0,0148p^2 + 0,1685f^2 + 0,07a^2 + 0,0081e^2 - 0,01189g^2$	93,23

Los modelos matemáticos están en función de la concentración (% másico) de parafinas (p), ácidos grasos (f), alcoholes grasos (a), ésteres cerosos (e) y acilglicéridos (g).

Se calcularon los valores fisicoquímicos a partir de la composición química de las cinco bioceras seleccionadas con el mayor puntaje establecido en el análisis estadístico descriptivo (Tabla 4) utilizando los modelos matemáticos. Al calcular el valor teórico de cada parámetro fisicoquímico en función de la composición química de una

biocera en particular, esta misma composición se utiliza para determinar los demás parámetros de esa biocera. Seguidamente, se compararon los valores experimentales con los valores calculados (Tabla 7). También se determinó el error asociado de cada parámetro para cada biocera analizada (Tabla 8).

Tabla 7. Parámetros fisicoquímicos experimentales y calculados por medio de los modelos matemáticos de las bioceras con mayor puntaje en el análisis estadístico descriptivo.

Biocera	Valores obtenidos experimentalmente				Valores calculados			
	Rango de fusión, °C	Índice de acidez, mg KOH/g	Índice de yodo, g I ₂ /100 g	Índice de saponificación, mg KOH/g	Rango de fusión, °C	Índice de acidez, mg KOH/g	Índice de yodo, g I ₂ /100 g	Índice de saponificación, mg KOH/g
BPC1-03	47,9	26,25	1,05	143,55	47,80	23,03	7,62	144,67
BPC1-07	44,9	22,36	9,71	153,67	42,64	19,45	32,46	155,05
BPC5-01	42,7	10,87	23,70	152,01	41,40	16,36	18,36	152,62
BPC5-03	40,2	8,32	21,16	122,85	40,55	11,64	16,11	127,03
BPC7-03	43,3	10,47	18,78	132,37	56,01	33,34	70,86	161,17

Tabla 8. Porcentaje de error de los valores calculados de los modelos matemáticos con respecto a los valores experimentales obtenidos.

Biocera	Error asociado al modelo matemático, %			
	Rango de fusión	Índice de acidez	Índice de yodo	Índice de saponificación
BPC1-03	0,20	12,26	625,62	0,78
BPC1-07	5,03	13,03	234,31	0,90
BPC5-01	3,05	50,53	22,51	0,40
BPC5-03	0,88	39,90	23,88	3,40
BPC7-03	29,34	218,46	277,31	21,76

Discusión

Las bioceras analizadas presentan valores de punto de fusión por debajo de la norma estipulada de ceras sintéticas para productos cosméticos (NTC 1466:1998) entre 61 - 66 °C. Sin embargo, se observó que los puntos de fusión de las muestras de bioceras son mucho más altos que el de la carga ARP, infiriendo que poseen mayor proporción de grasas y ésteres saturados que la carga ARP. También se pudo observar que 28 muestras de bioceras poseen valores de acidez por debajo del límite establecido por la normativa NTC 1466 (26 mg KOH/g). A valores de índice de acidez altos, se presenta una mayor degradación de la biocera por presencia de ácidos y cambios en las formas de emulsión.

Solo 7 muestras de bioceras analizadas poseen valores de índice de yodo por debajo de lo establecido por la normativa NTC 1466 (10 g I₂/100g). Para índice de saponificación, solo una muestra presentó valores por debajo de lo establecido por la normativa NTC 1466 (130 mg KOH/ g). A pesar de que los valores de índice de yodo son mayores que los establecidos en la normativa, se observó que esas muestras poseen una cantidad de acilglicéridos y lípidos insaturados menores a los de la carga ARP y, por ende, se obtienen ceras con puntos de fusión mayores a los de la carga ARP.

De las cinco muestras de bioceras con mayor puntaje asignado por el análisis estadístico descriptivo (Tabla 4), dos de ellas poseen índices de yodo menor a 10 g I₂/100 g y cuatro de ellas

poseen valores de índice de acidez menores que 25 mg KOH/g, lo que sugiere una mayor estabilidad o resistencia a la oxidación y degradación en el producto final, además de que facilitaría su uso en sistemas emulsionados.

Todas las bioceras seleccionadas poseen puntos de fusión por encima de 40 °C, mayores que el valor de la carga ARP, y valores de índice de saponificación por debajo de 155 mg KOH/g, menores que el de la carga ARP. De lo anterior, se puede inferir que la cantidad de acilglicéridos insaturados presentes en estas muestras es menor que en el ARP, y que hay una buena conversión de acilglicéridos a ésteres cerosos en el hidrotreamiento del ARP, con el fin de obtener bioceras apropiadas para manejo de formas cosméticas más consistentes y duraderas.

Se determinó el porcentaje de correlación de los modelos matemáticos, cada uno por separado, teniendo un ajuste de 93,23 % para el parámetro de índice de saponificación. Esto se debe a que el índice de saponificación, si se modela de manera independiente a los otros parámetros fisicoquímicos, cambia de manera proporcional conforme a la composición química, especialmente los ácidos grasos y los acilglicéridos. Aunque no se han encontrado trabajos con el modelamiento de estas propiedades fisicoquímicas en aceites, grasas y ceras; algunos modelos matemáticos para la predicción de propiedades en matrices provenientes de aceites son de primer orden con interacciones lineales, obteniéndose porcentajes de correlación menores que 5 % [28].

Para el índice de acidez, se determinó un porcentaje de correlación del 69,30 %, indicando que los valores poseen un ajuste regular con las composiciones químicas de las muestras de bioceras. Lo anterior sugiere que algunos ácidos grasos y acilglicéridos que se hidrolizan pueden aportar a la acidez de la muestra en magnitudes diferentes conforme cambian sus estructuras químicas.

El parámetro de índice de yodo mostró un ajuste del 67,70 %, indicando también que algunas moléculas poseen grados de insaturación de diferente magnitud respecto a las estructuras químicas caracterizadas de manera general en familias. El punto de fusión tuvo el menor porcentaje de correlación en el modelo, de 40,08 %, debido a que sus resultados no siguen una concordancia con respecto a la cantidad de las familias de composición química de las bioceras.

Cuando se comparan los valores experimentales

con los predichos por los modelos ajustados en conjunto, se puede observar que, en 4 de las 5 muestras, los parámetros de punto de fusión e índice de saponificación poseen errores menores que 6 %. También se observó que los parámetros de índice de acidez y de yodo poseen un error muy alto asociado al modelo obtenido. Al utilizar una sola composición química para calcular todos los valores de los parámetros fisicoquímicos, se observó que los valores se ajustan mejor para los parámetros de punto de fusión e índice de saponificación y se perdió ajuste para los parámetros de índice de acidez y yodo e índice de saponificación.

Lo anterior puede estar relacionado a un aporte indirecto, de manera sinérgica y antagónica, de los demás parámetros en la biocera analizada. La concentración de varias familias de compuestos puede afectar el valor de un parámetro fisicoquímico. Moléculas como acilglicéridos, ácidos grasos, grasas insaturadas, olefinas y acilglicéridos insaturados pueden modificar, de manera antagónica, los valores de acidez e índice de yodo de la muestra en diferentes magnitudes; por ende, es difícil modelar matemáticamente estos parámetros si no se define específicamente el aporte de cada compuesto.

Según los resultados de los parámetros de punto de fusión e índice de saponificación, varios tipos de moléculas modifican, de manera sinérgica, el punto de fusión y el índice de saponificación de la muestra. Dado lo anterior, los modelos matemáticos para estos parámetros se ajustan mucho mejor a los valores experimentales cuando se utilizan en conjunto con la composición química de la muestra de biocera.

Es posible que el tamaño y el grado de insaturación de las diferentes familias caracterizadas (ácidos grasos, ésteres y alcoholes cerosos, parafinas y acilglicéridos) tengan diferentes aportes en el valor global de la característica evaluada; lo cual no fue posible de determinar en este trabajo debido a que no se realizó una caracterización individual de los compuestos. Por lo tanto, una caracterización por compuestos individuales podría ayudar a mejorar las ecuaciones de ajuste que predicen las propiedades macroscópicas de las bioceras.

Conclusiones

Se determinaron las características fisicoquímicas de cada una de las bioceras obtenidas por hidrotreamiento del aceite refinado de palma

usando las metodologías descritas en la NTC 1466 para ceras naturales y sintéticas; también se realizó la caracterización química con la ayuda de un equipo especializado por cromatografía de gases alta temperatura GC-MS-FID. A través del análisis estadístico descriptivo, se obtuvieron las cinco mejores muestras con mayor valor de rango de fusión y menores valores de índice de acidez, índice de yodo e índice de saponificación.

Los modelos matemáticos que predicen los parámetros fisicoquímicos macroscópicos, utilizando la composición química de las bioceras, tuvieron una buena correlación en dos de los cuatro parámetros. Se correlacionó los datos obtenidos de las mejores bioceras, tanto con los modelos matemáticos en conjunto como con los datos experimentales, donde se observó que en dos parámetros fisicoquímicos, rango de fusión e índice de saponificación, hay una buena similitud de resultados.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Industrial de Santander y al proyecto del SGR *Desarrollo de una tecnología para la producción de bioceras que fomente el biocomercio en el departamento de Santander* por el apoyo financiero en el desarrollo de las metodologías descritas en este documento.

Referencias

- [1] Shalini T, Martin A. Identification, isolation, and heterologous expression of Sunflower wax synthase for the synthesis of tailored wax esters. *J Food Biochem* [en línea]. 2020;44(10). doi.org/10.1111/jfbc.13433
- [2] Fei T, Wang T. A review of recent development of sustainable waxes derived from vegetable oils. *Current Opinion in Food Science*. 2017;16:7-14. doi.org/10.1016/j.cofs.2017.06.006
- [3] Aliasl khiabani A, Tabibiazar M, Roufegarinejad L, Hamishehkar H, Alizadeh A. Preparation and characterization of carnauba wax/adipic acid oleogel: A new reinforced oleogel for application in cake and beef burger. *Food Chemistry*. 2020;333:127446. doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.127446
- [4] Liu C, Zheng Z, Meng Z, Chai X, Cao C, Liu Y. Beeswax and carnauba wax modulate the crystallization behavior of palm kernel stearin. *LWT*. 2019;115:108446. doi.org/10.1016/j.lwt.2019.108446
- [5] de Freitas CAS, de Sousa PHM, Soares DJ, da Silva JYG, Benjamin SR, Guedes MIF. Carnauba wax uses in food – A review. *Food Chemistry*. 2019;291:38-48. doi: 10.1016/j.foodchem.2019.03.133
- [6] Aboje AA, Kovo AA, Agbo AA, Adeniyi OD. Optimal Process Conditions for Enhanced Co-Solvent Based Transesterification of Tigernut Oil. *Nigerian Journal of Engineering and Applied Sciences*. 2019;6(1):11-21.
- [7] Shimizu MS, Nomura Y, Bui HS. Effect of Cosmetic Oils on Lipstick Structure and Its Deposit. En: *Surface Science and Adhesion in Cosmetics*. Mittal KL, Bui HS, editores: Wiley; 2021. p. 35-71. doi.org/10.1002/9781119654926.ch2
- [8] Oliver-Tomas B, Renz M, Corma A. High Quality Biowaxes from Fatty Acids and Fatty Esters: Catalyst and Reaction Mechanism for Accompanying Reactions. *Ind Eng Chem Res*. 2017;56(45):12870-7. doi.org/10.1021/acs.iecr.7b01794
- [9] Soleimani Y, Goli SAH, Shirvani A, Elmizadeh A, Marangoni AG. Wax-based delivery systems: Preparation, characterization, and food applications. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*. 2020;19(6):2994-3030. doi.org/10.1111/1541-4337.12614
- [10] Wettlaufer T, Hetzer B, Flöter E. Characterization of Oleogels Based on Waxes and Their Hydrolyzates. *Eur J Lipid Sci Technol*. 2021;123(7):2000345. doi.org/10.1002/ejlt.202000345
- [11] Zhang Z, Ye J, Fei T, Ma X, Xie X, Huang H, et al. Interesterification of rice bran wax and palm olein catalyzed by lipase: Crystallization behaviours and characterization. *Food Chemistry*. 2019;286:29-37. doi: 10.1016/j.foodchem.2019.01.192
- [12] Caputo D, Casiello M, Laurenza AG, Fracassi F, Fusco C, Nacci A, et al. Preparation of Biowax Esters in Continuous Flow Conditions. *ACS Omega*. 2019;4(7):12286-92. doi: 10.1021/acsomega.9b00861
- [13] Mosquera Montoya M, Valderrama Villabona M, Ruíz Álvarez E, López Alfonso D, Castro Zamudio LE, Fontanilla CA, et al. Costos de producción para el fruto de palma de aceite y el aceite de palma en 2015: estimación en un grupo de productores colombianos. *Revista Palmas*. 2017;38(2):10-26. https://publicaciones.fedepalma.org/index.php/palmas/article/view/12122

- [14] Lugo Arias ER, Sáenz Zapata JA, Lugo Arias JL. La productividad como determinante de la competitividad de las exportaciones de aceite de palma del departamento del Magdalena Colombia, 2007-2015. *Saber Cienc Lib.* 2018;13(1):145-63. doi: [10.18041/2382-3240/saber.2018v13n1.2088](https://doi.org/10.18041/2382-3240/saber.2018v13n1.2088)
- [15] Diarte C, Romero A, Romero MP, Graell J, Lara I. Chemical and Sensory Characterization of Nine Spanish Monovarietal Olive Oils: An Emphasis on Wax Esters. *Agriculture.* 2021;11(2):170. doi: [10.3390/agriculture11020170](https://doi.org/10.3390/agriculture11020170)
- [16] Huynh A, Maktabi B, Reddy CM, O'Neil GW, Chandler M, Baki G. Evaluation of alkenones, a renewably sourced, plant-derived wax as a structuring agent for lipsticks. *Int J Cosmet Sci.* 2020;42(2):146-55. doi: [10.1111/ics.12597](https://doi.org/10.1111/ics.12597)
- [17] Kanya T, Rao L, Sastry M. Characterization of wax esters, free fatty alcohols and free fatty acids of crude wax from sunflower seed oil refineries☆. *Food Chemistry.* 2007;101(4):1552-7. doi: [10.1016/j.foodchem.2006.04.008](https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2006.04.008)
- [18] Flöter E, Wettlaufer T, Conty V, Scharfe M. Oleogels—Their Applicability and Methods of Characterization. *Molecules.* 2021;26(6):1673. doi: [10.3390/molecules26061673](https://doi.org/10.3390/molecules26061673)
- [19] Papadaki A, Kopsahelis N, Freire DMG, Mandala I, Koutinas AA. Olive Oil Oleogel Formulation Using Wax Esters Derived from Soybean Fatty Acid Distillate. *Biomolecules.* 2020;10(1):106. doi: [10.3390/biom10010106](https://doi.org/10.3390/biom10010106)
- [20] Bharathwaaj R, Nagarajan PK, Kabeel AE, Madhu B, Mageshbabu D, Sathyamurthy R. Formation, characterization and theoretical evaluation of combustion of biodiesel obtained from wax esters of *A. Mellifera*. *Alexandria Engineering Journal.* 2018;57(3):1205-15. doi: [10.1016/j.aej.2017.03.021](https://doi.org/10.1016/j.aej.2017.03.021)
- [21] Yao L, Lio J, Wang T, Jarboe DH. Synthesis and Characterization of Acetylated and Stearylized Soy Wax. *J Am Oil Chem Soc.* 2013;90(7):1063-71. doi: [10.1007/s11746-013-2239-7](https://doi.org/10.1007/s11746-013-2239-7)
- [22] Nasri NS, Ahmed MM, Mohd Noor N, Mohammed J, Hamza UD, Mohd Zain H. Hydrophobicity Characterization of Bio-Wax Derived from Taro Leaf for Surface Coating Applications. *AMR.* 2014;1043:184-8. doi: [10.4028/www.scientific.net/AMR.1043.184](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.1043.184)
- [23] Wang P, Qian X, Shen J. Superhydrophobic Coatings with Edible Biowaxes for Reducing or Eliminating Liquid Residues of Foods and Drinks in Containers. *BioRes.* 2017;13(1):1-2. doi: [10.15376/biores.13.1.1-2](https://doi.org/10.15376/biores.13.1.1-2)
- [24] Chuberre B, Araviiskaia E, Bieber T, Barbaud A. Mineral oils and waxes in cosmetics: an overview mainly based on the current European regulations and the safety profile of these compounds. *J Eur Acad Dermatol Venereol.* 2019;33(S7):5-14. doi: [10.1111/jdv.15946](https://doi.org/10.1111/jdv.15946)
- [25] Merchán Sandoval J, Carelli A, Palla C, Baümler E. Preparation and characterization of oleogel emulsions: A comparative study between the use of recovered and commercial sunflower waxes as structuring agent. *Journal of Food Science.* 2020;85(9):2866-78. doi: [10.1111/1750-3841.15361](https://doi.org/10.1111/1750-3841.15361)
- [26] Kaliyadan F, Kulkarni V. Types of Variables, Descriptive Statistics, and Sample Size. *Indian Dermatology Online Journal.* 2019;10(1):82-6. doi: [10.4103/idoj.IDOJ_468_18](https://doi.org/10.4103/idoj.IDOJ_468_18)
- [27] Mishra P, Pandey C, Singh U, Gupta A, Sahu C, Keshri A. Descriptive statistics and normality tests for statistical data. *Ann Card Anaesth.* 2019;22(1):67. doi: [10.4103/aca.ACA_157_18](https://doi.org/10.4103/aca.ACA_157_18)
- [28] Li J, Liu J, Sun X, Liu Y. The mathematical prediction model for the oxidative stability of vegetable oils by the main fatty acids composition and thermogravimetric analysis. *LWT.* 2018;96:51-7. doi: [10.1016/j.lwt.2018.05.003](https://doi.org/10.1016/j.lwt.2018.05.003)

ANEXO

Anexo A. Resultados de los parámetros fisicoquímicos y composición química de las bioceritas obtenidas.

Muestra	Parámetros fisicoquímicos				Composición química %				
	Índice de yodo, g I/100 g	Índice de acidez, mg KOH/g muestra	Índice de saponificación, mg KOH/g muestra	P. fusión, °C	Parafinas	Ácidos grasos	Alcoholes grasos	Esteres Cerosos	Acilglicéridos
2010190003	13,47	20,55	171,76	48,9	17,38	9,47	2,12	10,14	60,89
2010190004	10,24	26,26	172,02	42,3	18,58	16,68	6,83	21,16	36,75
2010190005	1,05	26,25	143,55	47,9	31,32	15,33	5,79	25,39	22,17
2010190006	4,36	18,39	166,30	48,5	17,63	13,27	8,65	25,41	35,05
2010190007	6,30	14,64	174,10	44,9	15,17	7,66	3,78	20,80	52,57
2010260017	13,47	20,40	170,50	48,2	15,90	12,73	6,13	23,13	42,10
2010260018	9,71	22,36	153,67	44,9	15,18	13,76	5,45	35,64	29,99
2010280053	16,61	18,34	179,15	49,3	17,67	7,49	2,84	15,59	56,42
2011300057	48,83	3,08	180,61	44,2	3,87	5,64	1,11	2,83	86,56
2011300059	48,64	4,06	187,39	49,0	8,85	14,58	6,19	6,07	64,32
2012030011	50,67	1,79	191,83	34,0	2,01	0,00	0,00	1,89	96,09
2012030012	51,77	3,07	186,48	30,4	5,89	2,36	1,21	7,16	83,38
2012110056	50,42	3,02	187,73	24,1	7,04	2,10	0,83	4,82	85,21
2012110057	50,45	4,91	176,64	23,9	8,58	3,81	1,72	9,46	76,43
2012110058	49,82	3,63	179,68	35,7	19,55	4,77	2,51	13,94	59,25
2012150004	49,64	6,71	162,90	28,5	13,61	7,11	5,25	25,40	48,64
2012150005	49,60	5,54	171,07	31,9	4,33	6,00	2,73	21,16	65,78
2011300058	49,02	6,09	179,80	45,4	9,13	6,89	3,52	16,91	63,56
2102120214	48,84	11,21	179,21	27,5	7,08	4,38	2,70	14,28	71,56
2102160015	49,19	12,67	177,62	27,5	13,21	7,66	5,22	16,69	57,22
2102230032	51,55	16,05	178,20	25,8	7,44	10,89	1,63	26,74	53,30
2102250037	51,66	6,01	191,66	40,9	2,28	1,26	1,92	3,80	90,73
2103150007	1,79	27,88	171,04	51,6	13,70	11,90	2,40	22,70	49,30
2103240030	8,72	26,54	171,38	49,8	11,20	14,50	0,20	18,00	56,10
2103290002	7,86	28,77	153,78	47,0	21,00	11,60	0,30	28,90	38,10
2104150059	23,70	10,87	152,01	42,7	28,40	8,80	2,10	23,70	37,10
2104190002	22,02	9,46	140,40	41,1	41,10	9,90	2,50	20,50	26,00
2104190003	21,16	8,32	122,85	40,2	40,00	11,10	2,30	26,70	19,90
2105070034	32,85	18,80	178,30	40,7	7,40	4,30	5,90	16,70	65,70
2105070036	33,89	22,44	175,70	39,8	10,10	4,70	7,10	21,50	56,70
2105100030	30,34	27,75	166,20	38,4	19,10	12,40	0,30	29,40	38,80
2106280015	27,24	9,50	169,43	38,5	6,90	9,10	4,60	18,30	61,10
2106280016	29,00	13,28	165,91	38,1	15,30	9,20	6,00	26,00	43,50
2107080002	18,78	10,47	132,37	43,3	13,30	14,50	13,50	34,50	24,20