

Desarrollo de correlaciones entre propiedades térmicas y químicas para la elaboración de biomateriales de cambio de fase a partir de grasas y aceites de origen agroindustrial

María Paula Carvajal Arciniegas

Trabajo de Investigación para Optar al Título de Magíster en Ingeniería Química

Director

Dr. Sc. Viatcheslav V. Kafarov

Doctor en Ciencia Técnicas

Codirector

Dr. Víctor Alexis Lizcano González

Doctor en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Maestría en Ingeniería Química

Bucaramanga

2026

Dedicatoria

A Dios, por ser luz y guía de mi vida y mis pensamientos, por darme la serenidad en momentos de incertidumbre, perseverancia para superar cada desafío y tomar las decisiones acertadas durante todo este proyecto.

A mis padres, Dionisio Carvajal Ruiz y Yasmina Arciniegas Buitrago, por su amor incondicional, por brindarme siempre la confianza para seguir mis sueños y por acompañarme con paciencia, apoyo y fortaleza en cada etapa de este proceso.

A mi pareja, Luis Angel, cómplice de esta travesía, por su apoyo, confianza y por ser mi refugio en los días difíciles. Gracias por caminar a mi lado, por tu fe en mí y por compartir este sueño.

A mi compañera y amiga, Daniela, por su apoyo incondicional, por hacer este camino más ligero, divertido y lleno de momentos inolvidables. Formamos un gran equipo y hoy celebramos juntas la meta cumplida. ¡Lo logramos amiga!

Agradecimientos

En primer lugar, expreso un especial agradecimiento al profesor Dr. Sc. Viatcheslav Kafarov, director de esta tesis de maestría, por su orientación y acompañamiento durante esta etapa fundamental de mi formación profesional.

Al Dr. Víctor Alexis Lizcano González, por su apoyo, disposición y orientación a lo largo de todo el proceso de investigación.

A la Universidad Industrial de Santander, por abrirme las puertas de su alma máter; a la Escuela de Ingeniería Química, por brindarme la oportunidad de desarrollar esta etapa investigativa; al Centro de Investigación para el Desarrollo Sostenible en Industria y Energía (CIDES), por permitirme ser parte de esta investigación; y al Laboratorio de Biomasa, por facilitar los espacios y recursos necesarios para la realización de este trabajo.

Al Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación de Colombia (MinCiencias), por el apoyo económico otorgado durante la etapa final de mi formación de maestría, a través del proyecto CD 82605 CT ICETEX 2022-0644.

Finalmente, expreso mi más sincero agradecimiento a todas aquellas personas que, de una u otra manera, contribuyeron y me acompañaron para culminar de forma satisfactoria esta importante etapa académica y profesional.

Tabla de Contenido

	Pág.
Introducción	14
1. Marco Teórico y Estado del Arte.....	16
1.1 Materiales de cambio de fase (PCM).....	17
1.2 Sistemas de almacenamiento térmico	23
1.3 Propiedades fisicoquímicas de los PCM.....	24
1.4 Modificación de grasas y aceites vegetales	29
1.4.1 Transesterificación.....	29
1.5 Estimación y predicción de propiedades fisicoquímicas	31
2. Hipótesis	37
3. Objetivos.....	38
3.1 Objetivo General.....	38
3.2 Objetivos Específicos.....	38
4. Metodología Experimental.....	39
4.1 Fase I: Modificar químicamente las propiedades de la estearina de palma hidrogenada mediante la técnica de transesterificación	39
4.1.1 Actividad 1: Caracterización de propiedades fisicoquímicas y térmicas de la estearina de palma hidrogenada	39
4.1.1.1 Determinación del índice de yodo.	40
4.1.1.2 Determinación del índice de acidez.	41
4.1.1.3 Condiciones de operación para calorimetría diferencial de barrido (DSC).....	42
4.1.1.4 Condiciones de operación para capacidad calorífica (Cp).....	42

4.1.2 Actividad 2: Modificación de las propiedades térmicas de la estearina de palma hidrogenada mediante el proceso de transesterificación	42
4.1.2.1 Reacción de transesterificación de la estearina de palma hidrogenada (EPH).	42
4.2 Fase II: Analizar la influencia de la composición química sobre la temperatura y entalpía de fusión de la estearina de palma hidrogenada transesterificada mediante mezclas eutécticas.....	44
4.2.1 Actividad 1: Establecimiento de las proporciones de mezcla para la estearina de palma hidrogenada.....	44
4.2.2 Actividad 2: Caracterización de propiedades fisicoquímicas y térmicas de las mezclas	45
4.3 Fase III: Establecer modelos matemáticos que correlacionen las propiedades térmicas de los materiales de cambio de fase orgánicos con sus propiedades químicas	45
4.3.1 Actividad 1: Análisis bibliográfico y selección de parámetros predictivos para el desarrollo del modelo matemático	45
4.3.2. Actividad 2: Desarrollo de modelos matemáticos predictivos para la temperatura y la entalpía de fusión	47
5. Resultados	49
5.1 Modificación química de la estearina de palma hidrogenada mediante transesterificación ...	49
5.1.1 Caracterización fisicoquímica y térmica de la estearina de palma hidrogenada (EPH)	49
5.1.1.1 Propiedades fisicoquímicas.....	49
5.1.1.2 Propiedades térmicas.	50
5.1.2 Reacción de transesterificación.....	52
5.1.3 Caracterización fisicoquímica y térmica de la estearina de palma hidrogenada transesterificada (EPHT).....	53
5.1.3.1 Propiedades fisicoquímicas.....	53

5.1.3.2 Propiedades térmicas.	54
5.2 Análisis de la influencia de la proporción de mezcla entre EPH y EPHT sobre las propiedades fisicoquímicas y térmicas.....	58
5.2.1 Caracterización de propiedades fisicoquímicas.....	58
5.2.1.1 Índice de yodo.....	58
5.2.1.2 Índice de acidez.....	60
5.2.2 Caracterización de propiedades térmicas.....	62
5.2.2.1 Análisis de la temperatura de fusión.	62
5.2.2.2 Análisis de la entalpía de fusión.	64
5.2.2.3 Cálculo de la capacidad calorífica.	65
5.2.3 Influencia de la proporción de mezcla sobre las propiedades térmicas.....	66
5.3 Establecimiento de modelos matemáticos para correlacionar las propiedades térmicas y químicas de PCM orgánicos.....	68
5.3.1 Análisis bibliográfico y selección de parámetros predictivos para el desarrollo del modelo matemático.....	68
5.3.1.1 Revisión bibliográfica de modelos y variables reportadas en la literatura.	68
5.3.1.2 Selección de parámetros químicos para el desarrollo del modelo matemático.	71
5.3.2 Desarrollo de modelos matemáticos predictivos de propiedades térmicas.....	75
5.3.2.1 Comportamiento de las propiedades térmicas en función de las variables químicas.	75
5.3.2.2 Modelo T_m para materiales de baja temperatura de fusión.....	76
5.3.2.3 Modelo T_m para materiales de alta temperatura de fusión.....	80
5.3.2.4 Modelo ΔH_m para materiales de baja temperatura de fusión.....	84
5.3.2.5 Modelo ΔH_m para materiales de alta temperatura de fusión.....	88

6. Conclusiones	92
7. Recomendaciones	94
Referencias Bibliográficas	95
Apéndices.....	110

Lista de Tablas

	Pág.
Tabla 1. <i>Clasificación de PCM utilizados en TESS.</i>	18
Tabla 2. <i>PCM orgánicos de origen animal o vegetal investigados para uso en TESS.</i>	21
Tabla 3. <i>Temperatura de fusión de ácidos grasos saturados e insaturados presentes en fuentes naturales de origen animal y vegetal.</i>	26
Tabla 4. <i>Variación del punto de fusión e índice de yodo en aceites vegetales y animales sometidos a hidrogenación.</i>	27
Tabla 5. <i>Técnicas de caracterización titulométricas.</i>	40
Tabla 6. <i>Técnicas de caracterización para determinar propiedades térmicas.</i>	41
Tabla 7. <i>Proporciones de mezclas entre la EPH y EPHT.</i>	45
Tabla 8. <i>Propiedades fisicoquímicas de la EPH.</i>	49
Tabla 9. <i>Propiedades térmicas de la EPH.</i>	51
Tabla 10. <i>Propiedades fisicoquímicas de la EPHT.</i>	54
Tabla 11. <i>Propiedades térmicas de la EPHT.</i>	56
Tabla 12. <i>Energía térmica almacenada estimada para la EPH y la EPHT.</i>	57
Tabla 13. <i>Índice de yodo de las mezclas binarias EPH/EPHT.</i>	58
Tabla 14. <i>Índice de acidez de las mezclas binarias EPH/EPHT.</i>	60
Tabla 15. <i>Temperaturas de fusión de las mezclas binarias EPH/EPHT.</i>	63
Tabla 16. <i>Entalpías de fusión de las mezclas binarias EPH/EPHT.</i>	64
Tabla 17. <i>Capacidad calorífica específica (Cp) en estado sólido y líquido de las mezclas binarias EPH/EPHT.</i>	65

Tabla 18. <i>Modelos matemáticos y variables predictoras asociados a la estimación de propiedades térmicas de materiales orgánicos.</i>	69
Tabla 19. <i>Propiedades químicas y térmicas de los compuestos orgánicos empleados en la construcción del modelo matemático.</i>	73
Tabla 20. <i>Estadísticas globales del modelo de regresión para $T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$.</i>	76
Tabla 21. <i>Coeficientes de regresión para $T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$.</i>	77
Tabla 22. <i>Porcentaje de error entre T_m estimada y experimental ($T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	78
Tabla 23. <i>Estadísticas globales del modelo de regresión para $T_m \geq 30\text{ }^\circ\text{C}$.</i>	80
Tabla 24. <i>Coeficientes de regresión para $T_m \geq 30\text{ }^\circ\text{C}$.</i>	81
Tabla 25. <i>Porcentaje de error entre T_m estimada y experimental ($T_m \geq 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	82
Tabla 26. <i>Estadísticas globales del modelo de regresión para ΔH_m ($T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	84
Tabla 27. <i>Coeficientes de regresión para ΔH_m ($T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	85
Tabla 28. <i>Porcentaje de error entre ΔH_m estimada y experimental ($T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	86
Tabla 29. <i>Estadísticas globales del modelo de regresión para ΔH_m ($T_m \geq 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	88
Tabla 30. <i>Coeficientes de regresión para ΔH_m ($T_m \geq 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	89
Tabla 31. <i>Porcentaje de error entre ΔH_m estimada y experimental ($T_m \geq 30\text{ }^\circ\text{C}$).</i>	91

Lista de Figuras

	Pág.
Figura 1. <i>Curva DSC de la estearina de palma hidrogenada (EPH).</i>	50
Figura 3. <i>Separación de fases obtenida durante el proceso de transesterificación de la EPH.</i> ...	52
Figura 4. <i>Aspecto físico de la EPHT tras los lavados y el secado.</i>	53
Figura 5. <i>Curvas DSC de la EPH y EPHT durante un ciclo de fusión–solidificación.</i>	55
Figura 6. <i>Variación del índice de yodo en función del contenido de EPH en las mezclas binarias EPH/EPHT.</i>	59
Figura 7. <i>Variación del índice de acidez en función del contenido de EPH en las mezclas binarias EPH/EPHT.</i>	61
Figura 8. <i>Curvas de fusión por DSC de EPH, EPHT y mezclas binarias.</i>	62
Figura 9. <i>Diagrama de composición vs. temperatura y entalpía de fusión del sistema binario EPH/EPHT.</i>	67
Figura 10. <i>Comparación entre T_m experimental y estimada para materiales con $T_m < 30$ °C.</i> .	77
Figura 11. <i>Comparación entre T_m experimental y estimada para materiales con $T_m \geq 30$ °C.</i> ..	81
Figura 12. <i>Comparación entre ΔH_m experimental y estimada para materiales con $T_m < 30$ °C.</i>	86
Figura 13. <i>Comparación entre ΔH_m experimental y estimada para materiales con $T_m \geq 30$ °C.</i>	90

Lista de Apéndices

	Pág.
Apéndice A. Esquema general de la reacción de transesterificación.....	110
Apéndice B. Fuentes bibliográficas de la base de datos.	112
Apéndice C. Ajuste de los modelos matemáticos en Microsoft Excel	115
Apéndice D. Curvas DSC generadas mediante TRIOS para EPH, EPHT y sus mezclas eutécticas.	117

Resumen

Título: Desarrollo de correlaciones entre propiedades térmicas y químicas para la elaboración de biomateriales de cambio de fase a partir de grasas y aceites de origen agroindustrial*

Autor: María Paula Carvajal Arciniegas**

Palabras Clave: Almacenamiento de energía térmica, Estearina de palma hidrogenada, Ésteres cetílicos, Material de cambio de fase, Modelos matemáticos predictivos, Propiedades térmicas, Transesterificación.

Descripción: El almacenamiento de energía solar térmica (TESS) ofrece un alto potencial de ahorro energético mediante el uso de materiales de cambio de fase (PCM). Los ácidos grasos, empleados como PCM orgánicos, han suscitado un interés creciente en los últimos años debido a su pequeña variación de volumen durante el cambio de fase, su alto calor latente de fusión, buena estabilidad química y bajo coste, lo que los convierte en candidatos atractivos para sistemas de almacenamiento térmico. El objetivo de este proyecto fue establecer la relación entre las propiedades químicas de PCM obtenidos a partir de estearina de palma hidrogenada (EPH) y otros compuestos orgánicos, y su comportamiento térmico. El estudio se desarrolló en tres etapas: (i) modificación de la EPH mediante transesterificación y elaboración de mezclas eutécticas; (ii) caracterización química y térmica mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC), junto con la determinación del índice de yodo y acidez según normas técnicas colombianas (NTC); y (iii) desarrollo de modelos de regresión lineal para predecir la temperatura de fusión (T_m) y entalpía de fusión (ΔH_m) a partir de las propiedades químicas de grasas y aceites. Los resultados obtenidos para el producto modificado (EPHT) mostraron que el índice de yodo se mantuvo estable (5,63 g I₂/100 g), mientras que la acidez disminuyó significativamente de 4,81 a 0,9 mg KOH/g. La temperatura de fusión se redujo de 57,64 °C a 49,71 °C y la entalpía de fusión aumentó de 150,54 a 155,79 J/g, lo que evidencia una mayor capacidad de almacenamiento de energía. Las capacidades caloríficas también mejoraron tanto en estado sólido (2,09 a 2,27 J/g·°C) como en estado líquido (2,67 a 2,82 J/g·°C). En el desarrollo de las mezclas, se identificó un comportamiento eutéctico en la proporción 30:70 (EPH/EPHT-4), que presentó la temperatura de fusión más baja del sistema (43,51 °C). A partir de estos resultados y de datos de literatura, los modelos desarrollados constituyen una herramienta preliminar para estimar la temperatura de fusión de PCM a bajo costo analítico, contribuyendo al diseño de nuevos biomateriales para aplicaciones TESS.

* Tesis de Maestría

** Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Maestría en Ingeniería Química. Director: Dr. Sc. Viatcheslav Kafarov. Codirector: Dr. Víctor Alexis Lizcano González

Abstract

Title: Development of correlations between thermal and chemical properties for the production of phase change biomaterials from agro-industrial fats and oils*

Author: María Paula Carvajal Arciniegas**

Key Words: Thermal energy storage, Hydrogenated palm stearin, Cetyl esters, Phase change materials, Predictive mathematical models, Thermal properties, Transesterification.

Description: Thermal solar energy storage (TESS) offers high energy saving potential through the use of phase change materials (PCM). Fatty acids, used as organic PCMs, have attracted growing interest in recent years due to their small volume change during phase change, high latent heat of fusion, good chemical stability, and low cost, making them attractive candidates for thermal storage systems. The objective of this project was to establish the relationship between the chemical properties of PCMs obtained from hydrogenated palm stearin (HPS) and other organic compounds, and their thermal behavior. The study was carried out in three stages: (i) modification of HPS through transesterification and preparation of eutectic mixtures; (ii) chemical and thermal characterization using differential scanning calorimetry (DSC), together with the determination of the iodine value and acidity according to Colombian technical standards (NTC); and (iii) development of linear regression models to predict the melting temperature (T_m) and melting enthalpy (ΔH_m) based on the chemical properties of fats and oils. The results obtained for the modified product (EPHT) showed that the iodine value remained stable (5,63 g I₂/100 g), while the acidity significantly decreased from 4,81 to 0,9 mg KOH/g. The melting temperature decreased from 57,64 °C to 49,71 °C, and the enthalpy of fusion increased from 150,54 to 155,79 J/g, demonstrating a greater energy storage capacity. Heat capacities also improved in both the solid (2,09 to 2,27 J/g·°C) and the liquid states (2,67 to 2,82 J/g·°C). During the development of the mixtures, eutectic behavior was identified in the 30:70 (EPH/EPHT-4) ratio, which exhibited the lowest melting temperature of the system (43,51 °C). Based on these results and literature data, the developed models constitute a preliminary tool for estimating the melting temperature of PCMs at low analytical cost, contributing to the design of new biomaterials for TESS applications.

* Master's Thesis

** Faculty of Physicochemical Engineering. School of Chemical Engineering. Master's degree in Chemical Engineering. Director: Ph.D. Viatcheslav V. Kafarov. Codirector: Ph.D. Víctor Alexis Lizcano González

Introducción

El uso de fuentes de energía no renovables como el carbón, el petróleo y el gas natural continúa contribuyendo al cambio climático, al incremento de las emisiones de CO₂ y al calentamiento global (UNFCCC, 2022). En respuesta a la crisis energética y ambiental actual, se ha impulsado el desarrollo e implementación de energías renovables, entre ellas la energía solar térmica, utilizada comúnmente para el abastecimiento de agua caliente y calefacción, especialmente en aplicaciones residenciales (Agencia Internacional de la Energía, 2022).

En este contexto, los sistemas de almacenamiento térmico mediante calor latente o LHTES (*Latent Heat Thermal Energy Storage*, por sus siglas en inglés) han adquirido gran interés debido a su capacidad para almacenar y liberar energía de manera eficiente empleando materiales de cambio de fase o PCM (*Phase Change Material*, por sus siglas en inglés) (Hathal et al., 2023).

Actualmente, existe un creciente interés en el desarrollo de PCM orgánicos de origen renovable, tales como ácidos grasos, ceras y subproductos agroindustriales, como alternativa a los materiales de origen petroquímico (Ansu et al., 2021). En Colombia, la disponibilidad de recursos agroindustriales representa una oportunidad para el aprovechamiento de biomateriales como la estearina de palma, la cera de soya y otros derivados lipídicos. Sin embargo, estos materiales presentan limitaciones relacionadas con propiedades térmicas específicas, como baja conductividad térmica o puntos de fusión inadecuados para determinadas aplicaciones.

Con el fin de mejorar su desempeño, es posible modificar sus propiedades mediante procesos químicos como hidrogenación, esterificación y transesterificación, con base en la naturaleza del material. No obstante, el desarrollo de nuevos PCM requiere una caracterización integral de sus propiedades térmicas y químicas, así como herramientas de modelado que permitan

predecir el comportamiento de materiales modificados y seleccionar materias primas adecuadas para aplicaciones de almacenamiento térmico (Aridi & Yehya, 2022).

Por lo tanto, este trabajo propone establecer correlaciones entre las propiedades térmicas y químicas de materiales orgánicos derivados de grasas y aceites de origen vegetal y animal, incluyendo materias primas naturales y subproductos agroindustriales sometidos a modificación química, con miras al desarrollo de biomateriales de cambio de fase para aplicaciones de almacenamiento térmico. Adicionalmente, se plantea la síntesis y evaluación de mezclas eutécticas basadas en estearina de palma hidrogenada (EPH) y transesterificada (EPHT), con el fin de analizar su viabilidad como PCM.

1. Marco Teórico y Estado del Arte

Las necesidades energéticas seguirán incrementándose en los próximos años debido al progreso económico, la rápida industrialización y el crecimiento poblacional, de modo que la búsqueda de recursos energéticos económicos y de baja huella de carbono para la producción de energía es una alternativa que permite suplir la creciente demanda de energía a nivel mundial (Hathal et al., 2023).

Por consiguiente, se ha intensificado el uso de las energías renovables debido a su viabilidad económica y medioambiental. Dentro de estas energías, se encuentran la energía eólica, geotérmica, hidráulica, solar, entre otras. El aprovechamiento de la energía solar comprende la energía solar fotovoltaica y la energía solar térmica, y su implementación produjo un 5,5 % (1 631 TWh) de electricidad a nivel mundial para el año 2023 (Wiatros-Motyka et al., 2024). Sin embargo, a pesar de que la energía solar térmica aumentó un 3% para el año 2023 con una producción anual de 456 TWh (Weiss & Spörk-Dür, 2024), cabe resaltar que la disponibilidad de radiación solar es intermitente. Por lo que es necesario emplear un método de almacenamiento térmico para mantener el equilibrio entre la oferta y la demanda energética (Wu et al., 2023).

Un sistema para el aprovechamiento de la energía solar térmica capta la radiación solar y la transfiere a un fluido en forma de calor, el cual se transporta a un sistema de almacenamiento de energía térmica o TESS (*Thermal Energy Storage System*, por sus siglas en inglés) para luego ser aprovechada (Hameed et al., 2022). Posteriormente, se extrae y se utiliza en diferentes aplicaciones, por ejemplo, calentamiento de agua y espacios domésticos, calefacción industrial, secado y cocción (Ansu et al., 2021).

Los sistemas solares térmicos emplean sistemas de almacenamiento termoquímico, de calor sensible o de calor latente. Este último utiliza materiales de cambio de fase o PCM (*Phase Change Material*, por sus siglas en inglés) brindando una alta capacidad para almacenar y liberar energía térmica a una temperatura casi constante (Liu et al., 2021). El almacenamiento de energía por calor latente se aplica ampliamente en varios sistemas de energías renovables como, por ejemplo, en edificios para la regulación térmica, la reducción del consumo energético y la disminución de las oscilaciones térmicas interiores (Hameed et al., 2022).

1.1 Materiales de cambio de fase (PCM)

Los PCM son materiales que almacenan y liberan grandes cantidades de energía a una temperatura casi constante durante las transiciones de fase. Estas transiciones pueden ocurrir entre sólido y líquido, líquido y gas, o sólido y gas; no obstante, la transición sólido y líquido es la más relevante, ya que presenta una mayor densidad energética, un amplio rango de temperaturas de operación y un menor cambio en volumen (Saeed et al., 2017).

Para una adecuada selección y un óptimo almacenamiento del material en TESS, los PCM deben cumplir algunas propiedades como: (1) Temperatura de cambio de fase adecuada; (2) Alta capacidad de almacenamiento de calor; (3) Pequeño cambio de volumen y bajo grado de sobreenfriamiento; (4) Propiedades químicas y térmicas estables; (5) No tóxico, no corrosivo y respetuoso con el medio ambiente; (6) Bajo coste y fácil disponibilidad; (7) Alta conductividad térmica (Wu et al., 2023).

Los PCM se pueden clasificar en orgánico e inorgánico o una mezcla de éstos de acuerdo con sus características químicas. Los PCM orgánicos destacan por un alto calor latente de fusión, buenas propiedades de autonucleación, estabilidad térmica y química y bajo sobreenfriamiento. Sin embargo, las principales desventajas de estos materiales son su variabilidad en composiciones,

baja conductividad térmica, notable variación de volumen y un elevado costo (da Cunha & de Aguiar, 2020). Por ende, estos materiales pueden ser modificados químicamente mediante procesos como la hidrogenación, esterificación, transesterificación, entre otros, con el propósito de ajustar y optimizar sus propiedades fisicoquímicas y térmicas, permitiendo su adecuación a los requerimientos específicos de cada aplicación.

El PCM inorgánico presenta ventajas asociadas a sus características térmicas y un bajo coste, pero también presentan desventajas como un alto grado de sobre enfriamiento y separación de fases (da Cunha & de Aguiar, 2020). Por su parte, los PCM eutécticos se obtienen a partir de la mezcla de dos o más materiales de cambio de fase con diferentes puntos de fusión, dando lugar a un sistema con una temperatura de fusión inferior a la de sus componentes puros. Además, la composición de estas mezclas puede ajustarse para obtener propiedades térmicas específicas, lo que favorece su aplicación en TESS (Ma et al., 2019).

La Tabla 1 muestra algunos ejemplos de PCM reportados recientemente para el desarrollo de diversos TESS, de acuerdo con su clasificación.

Tabla 1.

Clasificación de PCM utilizados en TESS.

Tipo de PCM	Material	Aplicación	Referencia
Orgánico	Cera de carnauba	Almacenamiento de energía térmica	(Xia et al., 2016)
	Aceite de coco	Control de temperatura en edificios	(Wonorahardjo et al., 2018)
	Cera de abejas	Almacenamiento de energía térmica	(Putra et al., 2019)
	Ácido mirístico	Regulación térmica en materiales de construcción	(Vandana & Ramadoss, 2023)

	Ácido láurico	Almacenamiento de energía térmica	(Yusuf et al., 2025)
Inorgánico	Tetrahidrato de fluoruro de potasio (KF·4H ₂ O)	Regulación térmica en edificios	(Xie et al., 2017)
	Sulfato de sodio decahidratado (Na ₂ SO ₄ ·10H ₂ O)		(Kumar et al., 2019)
	Nitrato Sódico (NaNO ₃)	Almacenamiento de energía térmica	(Orozco et al., 2021)
	Cloruro de Aluminio (AlCl ₃)		(Liu et al., 2023)
Mezcla Eutéctica	Palmitato de metilo/Ácido láurico	Regulación térmica en edificaciones	(Saeed et al., 2017)
	Ácido esteárico/Hexanamida	Almacenamiento de energía térmica de baja temperatura	(Ma et al., 2019)
	Ácidos grasos libres de aceite de coco/Ácido linoleico	Almacenamiento de energía térmica	(Nazari et al., 2021)
	Cera de parafina/Aceite de soja	Mejorar rendimiento térmico de las infraestructuras	(Kalombe et al., 2023)
	Ácido láurico/Ácido palmítico	Almacenamiento de energía térmica	(Yang & Wang, 2025)

Nota. Existen diversos criterios para la clasificación de los materiales de cambio de fase (PCM), entre ellos el tipo de transición de fase y el intervalo de temperatura de aplicación.

Putra et al. (2019), evaluaron el desempeño de un PCM para TESS en aplicaciones de regulación térmica en edificios e invernaderos. En este estudio se utilizó cera de abejas como PCM debido a su alto calor latente. Considerando la baja conductividad térmica característica de muchos PCM orgánicos, los autores incorporaron nanotubos de carbono multipared como material de soporte para mejorar la transferencia de calor del sistema. No obstante, concluyeron que la selección del material depende en gran medida de las condiciones climáticas del sitio de aplicación.

Kalombe et al. (2023), estudiaron la aplicación de mezclas eutécticas con proporciones del 50% en peso de aceite de coco y aceite de soja (COSO), y como de cera de parafina y aceite de soja (PWSO), como PCM orgánico-orgánico. Los resultados mostraron un alto potencial para aplicaciones de baja temperatura, evidenciado por un elevado calor latente de fusión y adecuados puntos de fusión para mejorar el rendimiento térmico de infraestructuras en distintas zonas climáticas.

Ahora bien, los PCM orgánicos se clasifican en parafinas y no parafinas. Las parafinas han sido ampliamente estudiadas; sin embargo, su uso en el ahorro energético de edificios es limitado debido a su alto costo (Aridi & Yehya, 2022). Los PCM no parafínicos, como los ácidos grasos, ésteres y alcoholes grasos, presentan ventajas tales como buena estabilidad durante los ciclos térmicos, bajo sobreenfriamiento, menor variación de volumen, bajo costo y baja toxicidad. Además, suelen ser biodegradables y no corrosivos. Sin embargo, estos materiales presentan limitaciones, entre ellas una baja conductividad térmica y temperaturas de fusión específicas, lo que puede restringir su aplicación directa en sistemas solares térmicos (Liu et al., 2023).

Por lo tanto, la exploración de residuos y subproductos asequibles y disponibles, que en su mayoría sean de origen autóctono como PCM alternativos, representa una estrategia prometedora para diversas aplicaciones en sectores con alto consumo energético. Este enfoque podría contribuir al ahorro de energía a bajo costo, favoreciendo al mismo tiempo el aprovechamiento de recursos locales (Boussaba et al., 2019).

En la Tabla 2 se presentan algunos ejemplos de PCM orgánicos de origen animal y vegetal, evaluados con miras a su implementación en TESS de acuerdo con su aplicación.

Tabla 2.

PCM orgánicos de origen animal o vegetal investigados para uso en TESS.

Material	Aplicación	Temperatura de fusión (°C)	Entalpía de fusión (J/g)	Referencia
Cera de carnauba	Calentamiento	88	168,3	(Xia et al., 2016)
Grasa vegetal de palmiste hidrogenada	Enfriamiento	26,53	74,35	(Boussaba et al., 2019)
Cera de abejas	Calentamiento	62,28	141,49	(Amin et al., 2017)
Cera de soja	Enfriamiento	45,06	100,9	(Jeon et al., 2019)
Estearina de palma hidrogenada	Calentamiento	55,17	227,5	(Lizcano-González, 2025)

Nota. Se presentan ejemplos de PCM orgánicos utilizados en almacenamiento de energía térmica para aplicaciones de enfriamiento y calentamiento.

Los ejemplos presentados en la Tabla 2 evidencian el interés en el uso de grasas y ceras de origen vegetal como alternativas renovables a los PCM tradicionales. Materiales derivados de aceites vegetales, como palma, soja o coco, representan una alternativa prometedora frente a PCM de origen petroquímico, tales como la parafina y la vaselina.

Boussaba et al. (2019) emplearon la grasa vegetal de palmiste hidrogenada como alternativa a la parafina, PCM comúnmente utilizado en aplicaciones de almacenamiento de energía térmica en edificios. Esta grasa vegetal está compuesta por ácidos grasos, principalmente por C₁₂ (ácido láurico), C₁₄ (ácido mirístico) y C_{18:1} (ácido oleico), en proporciones de 48 %, 16 % y 15 %, respectivamente. Debido a su elevado contenido de ácido láurico, su composición presenta características similares a las de otros aceites, como el aceite de coco, lo que le confiere una mayor rigidez a temperatura ambiente y un punto de fusión entre 25 °C y 30 °C (Pantzaris & Jaaffar,

2002). Por lo tanto, esta grasa vegetal presenta características adecuadas para aplicaciones de almacenamiento de energía térmica en el sector de la construcción.

De manera similar, Jeon et al. (2019) evaluaron la cera de soja (SW), aceite de palma (PO), aceite de coco (CO) y cera de palma (PW), para el desarrollo de un biocompuesto de almacenamiento de calor latente. Con el fin de mejorar la estabilidad y el desempeño térmico del PCM, se incorporó biocarbón derivado de cáscara de arroz como material de soporte. El biocompuesto obtenido mostró resultados prometedores como material de almacenamiento de calor latente, con potencial para su uso en materiales de construcción ecológicos.

En este contexto, la estearina de palma representa una alternativa particularmente atractiva debido a su alta disponibilidad, bajo costo y origen renovable. Este material se obtiene mediante el fraccionamiento del aceite de palma, proceso en el cual se separa una fracción sólida rica en ácidos grasos saturados (estearina) y una fracción líquida rica en compuestos insaturados (oleína). La estearina está compuesta principalmente por triglicéridos de ácido palmítico y ácido oleico, con contenidos aproximados de 54,3 % y 32,5 %, respectivamente (Yılmaz & Ağagündüz, 2021), lo que le confiere propiedades térmicas favorables para aplicaciones de almacenamiento de energía térmica.

Adicionalmente, la industria de palma constituye uno de los sectores agroindustriales más importantes en Colombia, asegurando un acceso continuo y sostenible a este subproducto. Diversos estudios han demostrado que la modificación química de la estearina de palma, especialmente mediante procesos de hidrogenación y transesterificación, permite mejorar propiedades fisicoquímicas relevantes como la estabilidad térmica, el calor latente de fusión y el comportamiento durante los ciclos térmicos, favoreciendo su aplicación como material de cambio de fase. En este sentido, Lizcano-González (2025) reportó el uso de estearina de palma

hidrogenada como base para el desarrollo del primer sistema de almacenamiento térmico latente (LHTES) implementado en Colombia, destinado al suministro de calefacción y agua caliente en zonas de alta montaña.

Considerando estos antecedentes, en el presente estudio se seleccionó la estearina de palma hidrogenada (EPH) como materia prima base para la obtención y evaluación de nuevos PCM orgánicos, debido a su elevada disponibilidad, bajo costo y alto contenido de triglicéridos saturados, características que favorecen temperaturas de fusión adecuadas para aplicaciones de almacenamiento de energía térmica orientadas a calefacción y suministro de agua caliente.

1.2 Sistemas de almacenamiento térmico

En el contexto de la eficiencia energética en edificaciones, los sistemas que incorporan PCMs se dividen en dos tipos: sistemas pasivos y sistemas activos. Los sistemas pasivos no requieren de una fuente de energía externa para su funcionamiento, ya que emplean la convección natural para almacenar y liberar calor de manera eficiente (Aridi & Yehya, 2022). Las aplicaciones y PCM mencionados en la Tabla 2 corresponden a esta categoría. Por otro lado, los sistemas activos dependen de una fuente de energía externa y suelen emplear convección forzada y, en algunos casos, transferencia de masa para gestionar el flujo térmico (Navarro et al., 2016a)

Rizal et al. (2021) utilizaron como PCM la cera de abejas (INS No. 901) o cera de abejas amarilla (CAS No. 8006-40-4) para un sistema de calentamiento de agua. Este PCM contiene principalmente ésteres de ácidos grasos (12-14 %) de cadena larga de ($C_{24} - C_{32}$), alcoholes grasos con una longitud de cadena de $C_{28} - C_{35}$, monoésteres lineales de cera y monoésteres hidroxilados ($C_{40} - C_{48}$), cadenas rectas de hidrocarburos dominantes de $C_{27} - C_{33}$. El sistema incluyó un colector de artesa cilíndrica, dos contenedores de agua, uno equipado con el PCM para mantener la temperatura del agua el mayor tiempo posible y el segundo contenedor sin PCM, una bomba y

un depósito adicional. Con la implementación de la cera de abejas, la temperatura del agua se mantuvo entre 40 y 60 °C durante aproximadamente 5 horas, aumentando la eficiencia de la energía solar térmica. Finalmente, el estudio concluyó que este sistema presenta un gran potencial para su replicación y desarrollo a escala industrial.

Navarro et al. (2016b) evaluaron la incorporación de un PCM tipo parafina (RT – 21) en una losa prefabricada de hormigón para aplicaciones de almacenamiento de energía térmica en edificaciones. El PCM presentó una temperatura de fusión entre 21 y 22 °C y alta entalpía de fusión (134 kJ/kg), propiedades adecuadas para el almacenamiento y liberación de calor en condiciones de confort térmico. El sistema fue integrado con tecnologías de calefacción y energía solar para analizar su desempeño energético. Los resultados mostraron que la incorporación del PCM permitió reducir significativamente el consumo energético en comparación con sistemas de calefacción convencionales.

Teniendo en cuenta lo anterior, los sistemas activos con PCM en edificaciones requieren un control adecuado y una inversión inicial considerable para maximizar sus beneficios y prevenir problemas como el sobrecalentamiento (Navarro et al., 2016b). No obstante, una implementación eficiente de TESS puede reducir significativamente la energía consumida en sistemas de calefacción, ventilación y aire acondicionado. Además, estos sistemas permiten sustituir parcial o totalmente los materiales convencionales por recursos renovables, potenciando la sostenibilidad de las edificaciones (Navarro et al., 2016a).

1.3 Propiedades fisicoquímicas de los PCM

Los aceites y grasas vegetales o animales, utilizados como PCM orgánicos, están compuestos principalmente por triglicéridos, que son triésteres de ácidos grasos unidos a una molécula de glicerol (Alviso et al., 2023). A temperatura ambiente (~20 °C), los aceites se

encuentran en estado líquido, mientras que las grasas bajo la misma condición de temperatura permanecen sólidas. Los ácidos grasos, componentes clave de estos materiales, son ácidos carboxílicos con cadenas hidrocarbonadas de longitud variable ($C_4 - C_{36}$) y pueden clasificarse como saturados o insaturados según la presencia de dobles enlaces carbono-carbono. Por lo tanto, los ácidos grasos determinan en gran medida las propiedades fisicoquímicas de una grasa o de un aceite (González Díaz et al., 2022).

Una de las propiedades más relevantes en los PCM orgánicos es el punto de fusión, el cual depende del grado de insaturación de los ácidos grasos. En los ácidos grasos saturados, el punto de fusión aumenta con el número de carbonos, ya que las cadenas lineales permiten interacciones de Van der Waals más eficientes entre moléculas. En los insaturados, incluso con igual cantidad de carbonos, presentan puntos de fusión más bajos debido a la presencia de dobles enlaces que generan “codos” en la cadena, lo cual dificulta estas interacciones (Ros et al., 2015). Cabe destacar que los PCM deben presentar una temperatura de transición de fase compatible con la temperatura de operación del sistema térmico. Asimismo, es deseable que posean una elevada entalpía de fusión, debido a que esta propiedad define la capacidad de almacenamiento de energía térmica durante los procesos de fusión y solidificación (Sarcinella et al., 2025).

La Tabla 3 presenta algunos ejemplos de los puntos de fusión de distintos ácidos grasos saturados e insaturados, así como las principales fuentes naturales en las que estos compuestos están presentes.

Tabla 3.

Temperatura de fusión de ácidos grasos saturados e insaturados presentes en fuentes naturales de origen animal y vegetal.

Nombre Común	Formula Molecular	Punto de Fusión (°C)	Fuente Principal
Saturados			
Cáprico (10:0)	C ₉ H ₁₉ COOH	31,1	Grasa láctea, aceite de coco.
Láurico (12:0)	C ₁₁ H ₂₃ COOH	43,6	Aceite de coco y palmiste.
Mirístico (14:0)	C ₁₃ H ₂₇ COOH	53,7	Aceite de coco y palmiste.
Palmítico (16:0)	C ₁₅ H ₃₁ COOH	62,6	Aceite de palma.
Estearico (18:0)	C ₁₇ H ₃₅ COOH	69,3	Sebo animal y manteca de cacao.
Insaturados			
Palmitoleico (16:1)	C ₁₅ H ₂₉ COOH	1	Aceites de origen marino, aceite de macadamia y algunas grasas animales.
Oleico (18:1)	C ₁₇ H ₃₃ COOH	13,5	Todos los aceites y grasas, especialmente el aceite de oliva, el aceite de canola, los aceites de girasol.
Linoleico (18:2)	C ₁₇ H ₃₁ COOH	-5	La mayoría de los aceites vegetales como girasol y maíz.

Nota. (10:0) notación abreviada para referirse a los ácidos grasos, donde el primer número representa el número de átomos de carbono y el segundo, el número de dobles enlaces en la cadena de carbono. Adaptado de Ros et al. (2015).

Una forma común de cuantificar el grado de insaturación en grasas y aceites es mediante el índice de yodo o IV (*Iodine Value*, por sus siglas en inglés), una prueba titulométrica que mide los gramos de yodo absorbidos por 100 gramos de muestra (ICONTEC, 2019). Este parámetro se relaciona directamente con la cantidad de dobles enlaces presentes en los ácidos grasos; por tanto, a mayor IV, mayor grado de insaturación.

El índice de yodo constituye una propiedad fisicoquímica importante para caracterizar grasas y aceites, debido a su relación con propiedades como el punto de fusión, la estabilidad oxidativa y el comportamiento térmico del material. En el caso de las bioceras, parámetros como el IV, el punto de fusión, la acidez y el grado de saponificación permiten evaluar el grado de deterioro, estabilidad y viabilidad para aplicaciones cosméticas (Murillo-Méndez et al., 2022).

El punto de fusión de grasas y aceites también puede modificarse mediante procesos químicos como la hidrogenación, esterificación o transesterificación, que alteran su estructura molecular y pueden provocar variaciones significativas, en algunos casos mínimas o incluso inversas, en su comportamiento térmico (Willnecker & Pramparo, 2008).

La Tabla 4 presenta ejemplos de grasas y aceites de origen animal y vegetal sometidos a hidrogenación, con el fin de evidenciar las variaciones del índice de yodo y del punto de fusión asociadas a este proceso.

Tabla 4.

Variación del punto de fusión e índice de yodo en aceites vegetales y animales sometidos a hidrogenación.

Producto	Tf (°C) Sin hidrogenar	IV Sin hidrogenar	Tf (°C) Hidrogenado	IV Hidrogenado
Manteca de cerdo	31 - 37	63 - 71	58	1
Sebo de vacuno	40 - 48	33 - 58	58	2
Aceite de coco	25	7 - 11	32	1
Aceite de palmiste	26	18	36	1
Aceite de soja	28	81	68	2

Nota. Tf: Temperatura de fusión (°C). IV: Índice de yodo (g I₂/100 g). Adaptado de Patterson (1994).

La información presentada en la Tabla 4 permite observar que la hidrogenación produce cambios significativos en el punto de fusión y en el índice de yodo de aceites y grasas, aunque la magnitud de estas variaciones depende de la composición inicial de cada material.

Aceites como el de coco y el de palmiste presentan puntos de fusión relativamente altos incluso antes de la hidrogenación, debido a su elevado contenido de ácidos grasos saturados de cadena media, especialmente ácido láurico (Kalombe et al., 2023). Por el contrario, aceites con mayor grado de insaturación, como el de soja (53 % ácido linoleico, 8 % ácido linolénico), presentan puntos de fusión más bajos y requieren procesos de hidrogenación para incrementar su estabilidad térmica y ajustar sus propiedades de cambio de fase (Pantzaris & Jaaffar, 2002).

Este comportamiento refuerza la relación general entre el grado de insaturación (IV) y el punto de fusión: a mayor insaturación, menor punto de fusión (Orozco Corredor, 2006). Sin embargo, esta correlación no siempre es lineal. Kalantari et al. (2010) reportaron que, tras la hidrogenación, algunas muestras alcanzaron mayores puntos de fusión aun conservando valores de IV elevados, lo que evidencia la influencia de factores estructurales adicionales, como la forma molecular, las interacciones intermoleculares y la masa molecular.

Otra propiedad importante es el índice de acidez o AV (*Acid Value*, por sus siglas en inglés), que indica la cantidad de ácidos grasos libres presentes en la muestra. Se expresa como mg de KOH necesarios para neutralizar 1 g de grasa o aceite (ICONTEC, 2011). Un AV elevado puede reflejar degradación, como la hidrólisis de triglicéridos, afectando la estabilidad química del material y su vida útil como PCM. En consecuencia, aceites o grasas con un bajo AV son preferidos para aplicaciones térmicas, ya que presentan mejor estabilidad y menor propensión a la oxidación o formación de productos no deseados durante los ciclos térmicos (Yuan et al., 2013).

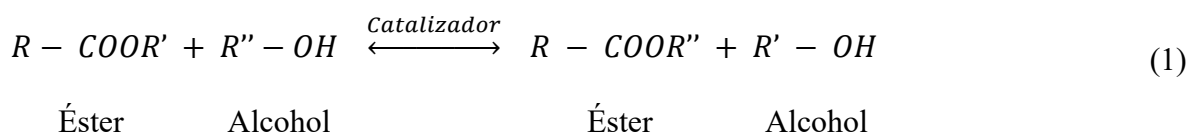
Por lo tanto, la selección de aceites y grasas como PCM debe basarse en una evaluación integral de sus propiedades fisicoquímicas, incluyendo punto de fusión, entalpía de fusión, índice de yodo y acidez. Estas propiedades determinan, no sólo la eficiencia térmica, sino también la estabilidad y desempeño a largo plazo del PCM en sistemas de almacenamiento de energía térmica (Aridi & Yehya, 2022).

1.4 Modificación de grasas y aceites vegetales

Incluso haciendo una selección adecuada del PCM, el material elegido no siempre cumple con todos los requisitos de temperatura y entalpía de fusión y estabilidad química. Uno de los problemas más frecuentes es el inadecuado punto de fusión y la variabilidad en la composición de triglicéridos (Ravotti et al., 2020). Por ello, se han desarrollado métodos para modificar la estructura de los triglicéridos en aceites y grasas, como la hidrogenación, esterificación y transesterificación, así como reacciones de alcohol éster en presencia de catalizadores químicos o enzimáticos; con el fin de mejorar sus propiedades fisicoquímicas y térmicas y obtener materiales con características prometedoras para su aplicación como PCM (Chaparro et al., 2023).

1.4.1 Transesterificación

La transesterificación, también conocida como alcoholólisis, es una reacción química en la que un éster intercambia su grupo alcoxi con un alcohol, dando lugar a la formación de alquilésteres y glicerol. El mecanismo de la reacción se muestra en la ecuación (1) (Meher et al., 2004).



Esta reacción se realiza generalmente bajo la acción de catalizadores ácidos, básicos o enzimáticos, que pueden ser homogéneos o heterogéneos según la fase de reacción. La mayoría de los procesos utilizan catalizadores básicos homogéneos como NaOH y KOH, ya que proporcionan una reacción más rápida y eficiente en condiciones menos exigentes que los catalizadores ácidos o enzimáticos (Meher et al., 2004).

Ahora bien, la temperatura y el tiempo de reacción son parámetros críticos en la transesterificación. El aumento de la temperatura acelera la reacción, pero valores demasiado altos pueden favorecer la saponificación y disminuir la pureza del producto final (Ahmad et al., 2022). Estequiométricamente, la reacción requiere una relación molar de 3:1 (alcohol:aceite), aunque el uso de un exceso de alcohol desplaza el equilibrio hacia los productos, mejorando la eficiencia del proceso (Castellar et al., 2014). En presencia de catalizadores homogéneos, los tiempos de reacción suelen oscilar entre 30 minutos y 2 horas, mientras que con catalizadores heterogéneos o enzimáticos pueden extenderse considerablemente, llegando hasta 24 - 48 horas (Ahmad et al., 2022).

En la transesterificación de un aceite o grasa vegetal, el triglicérido reacciona con un alcohol, generalmente de bajo peso molecular, para producir una mezcla de ésteres de ácidos grasos y glicerol. Los alcoholes más utilizados son metanol, etanol, butanol y 2-propanol, destacándose el metanol por su bajo costo y alto rendimiento (Pattnaik et al., 2025).

Este método de modificación no se limita únicamente al ámbito experimental, sino que también es ampliamente utilizado a nivel industrial para la producción de compuestos de alto valor agregado, como biodiesel y biolubricantes. Lozada Campo & Salgado Carabali (2022) estudiaron la síntesis de PCM mediante procesos de esterificación y transesterificación de subproductos del aceite de palma: estearina media (EM), super estearina (SE) y estearina hidrogenada (EH),

variando la naturaleza del catalizador (básico, NaOH, y ácido, H₂SO₄) y del alcohol (cetílico y butanol). Los resultados mostraron que las formulaciones basadas en EH con alcohol cetílico y catalizador ácido, así como EH con butanol y catalizador básico, presentan un alto potencial como PCM, al exhibir temperaturas y entalpías de fusión óptimas, junto con una elevada capacidad de almacenamiento de energía térmica, superior a 300 kJ.

Se destaca que el efecto sobre el punto de fusión depende tanto de las condiciones específicas de la reacción de esterificación y/o transesterificación como de la composición original de ácidos grasos de la materia prima (Castellar et al., 2014). En este contexto, la modificación química se presenta como una de las estrategias más prometedoras para mejorar la estabilidad química de los aceites y su desempeño térmico en un amplio rango de temperaturas.

No obstante, aún existe información limitada sobre aceites y grasas esterificadas o transesterificadas empleando alcoholes distintos a los de cadena corta convencionales, por lo que son escasos los estudios que analizan sistemáticamente el efecto de estas modificaciones sobre sus propiedades térmicas y fisicoquímicas (Ravotti et al., 2018). Por otro lado, estos procesos representan una alternativa prometedora para valorizar materias primas promisorias para su aplicación como PCM, debido a que las modificaciones en los grupos funcionales acilo (C=O), alcoxi (O-R) y en los dobles enlaces presentes en los aceites influyen directamente sobre las propiedades fisicoquímicas y térmicas finales del material (Joshi et al., 2023).

1.5 Estimación y predicción de propiedades fisicoquímicas

El estudio de los materiales de cambio de fase orgánicos requiere el conocimiento de diversas propiedades físicas, fisicoquímicas y térmicas de los compuestos empleados, tanto antes como después de la aplicación de procesos de modificación química. Sin embargo, la información experimental sobre estas propiedades no siempre se encuentra disponible en la literatura,

especialmente en el caso de subproductos y residuos agroindustriales, ni resulta práctico determinar experimentalmente cada parámetro cuando surge la necesidad. En este contexto, se hace indispensable el uso de métodos de estimación y predicción de propiedades fisicoquímicas (Wen & Qiang, 2004).

A continuación, se presentan diferentes estudios en los que se han desarrollado correlaciones entre propiedades fisicoquímicas y térmicas de diversos aceites y grasas vegetales. En general, estos modelos se basan en información composicional o estructural del material, como el perfil de ácidos grasos o la contribución de grupos funcionales. No obstante, dichas correlaciones han sido propuestas para sistemas específicos y, de acuerdo con la literatura, aún no se dispone de un modelo matemático generalizado que permita predecir las propiedades térmicas de cualquier tipo de aceite o grasa.

Patiño Becerra & Ortega (2011) emplearon métodos de estimación por contribución de grupos para el aceite de palma africana y el aceite de higuera. En su estudio, estimaron propiedades fisicoquímicas como la presión y temperatura crítica mediante el método de Nannoolal (2007), el volumen crítico con el método de Joback (1987), el factor acéntrico mediante el método de Constantinou–Gani–O’Connell (1995) y por último la capacidad calorífica a través del método de Ceriani-Gani-Meirelles (2009).

González Romero & Sarmiento González (2019) construyeron una base de datos amplia que incluía el perfil de ácidos grasos expresados en fracción molar y valores experimentales de la capacidad calorífica y la conductividad térmica en función de la temperatura de cada aceite. Esta información les permitió desarrollar correlaciones empíricas en Microsoft Excel, mediante la iteración de una función objetivo, facilitando la predicción de dichas propiedades en función de la temperatura.

Wen & Yang (2004) desarrollaron un nuevo método de contribución de grupos para la estimación de las propiedades como el punto de ebullición (Tb) y el punto de fusión (Tm), expresadas en Kelvin (K), a partir de la ecuación general que describe la propiedad física F, presentada en la ecuación (2).

$$F = a + \sum_k n_k \Delta_k^{(0)} + \sum_{ij} n_{ij} \Delta_{ij}^{(1)} \quad (2)$$

Donde:

a: constante de correlación.

k: representa los grupos que no contienen carbono.

ij: representa los pares de grupo i-átomo adyacente j.

n: número de las unidades estructurales relativas.

$\Delta^{(0)}$: parámetro de las unidades estructurales del grupo.

$\Delta^{(1)}$: parámetro de las unidades estructurales de pares de átomos adyacentes al grupo.

Emplearon como base el método GIC de Marrero-Morejón y Pardillo-Fontdevila (1999), incorporando pares de átomos adyacentes para mejorar la precisión del modelo. A partir de este enfoque, los autores propusieron correlaciones específicas para Tb y Tm, mediante la ecuación (3) y ecuación (4), respectivamente. No obstante, concluyeron que aún no se dispone de métodos completamente precisos para la estimación de los puntos de fusión y ebullición de compuestos orgánicos complejos.

$$T_b^2 \times 10^{-4} = 1,0213 + \sum_k n_k \Delta_k^{(0)}(T_b) + \sum_{ij} n_{ij} \Delta_{ij}^{(1)}(T_b) \quad (3)$$

$$T_m = 91,129 + \sum_k n_k \Delta_k^{(0)}(T_m) + \sum_{ij} n_{ij} \Delta_{ij}^{(1)}(T_m) \quad (4)$$

Boyaci et al. (2003) estimaron el punto de fusión por deslizamiento o SMP (*Slip Melting Point*, por sus siglas en inglés) de grasas y mezclas de aceites en función de su composición de ácidos grasos. Desarrollaron una correlación basada en cinco ácidos grasos: C_{16:0}, C_{18:0}, C_{18:1}, C_{18:2} y C_{18:3}, como se muestra en la ecuación (5).

$$\begin{aligned} SMP (^{\circ}C) = & C_{16:0}\% * Y_{C_{16:0}} + C_{18:0}\% * Y_{C_{18:0}} + C_{18:1}\% * Y_{C_{18:1}} \\ & + C_{18:2}\% * Y_{C_{18:2}} + C_{18:3}\% * Y_{C_{18:3}} \end{aligned} \quad (5)$$

Donde:

C_{n:m}%: porcentaje de ácido graso individual.

n: número de átomos de carbono.

m: número de dobles enlaces.

Y_{C_{n:m}}: constante específica del ácido graso.

Prepararon alrededor de 44 mezclas utilizando aceites de girasol, canola y algodón, así como estearina de palma y estearina de palma totalmente hidrogenada en diferentes proporciones. Determinaron las SMP de las mezclas antes y después de la interesterificación en función de la

composición de los ácidos grasos, los cuales se correlacionaron con los valores experimentales. Los resultados evidenciaron la influencia de la distribución de los ácidos grasos en el esqueleto del glicerol sobre la SMP. Asimismo, los autores destacaron la necesidad de incorporar términos asociados a la composición de triacilglicéridos para mejorar la precisión de los modelos predictivos.

Para concluir, se resalta la importancia de estimar parámetros térmicos clave, como la temperatura y la entalpía de fusión, debido a su relevancia en la implementación de sistemas TESS. Sin embargo, la predicción de estas propiedades sigue siendo limitada, ya que depende de características estructurales como la longitud de cadena carbonada, el grado de insaturación y la distribución de los ácidos grasos en el esqueleto del glicerol, las cuales influyen directamente en el comportamiento fisicoquímico y térmico de grasas y aceites (Boyaci et al., 2003).

En el mercado colombiano, existe una amplia disponibilidad de grasas y aceites de origen animal y vegetal, tanto en su forma natural como modificados químicamente, incluyendo materias primas convencionales y subproductos agroindustriales, que pueden considerarse alternativas promisorias para su aplicación como PCM. No obstante, para sistemas de almacenamiento de energía en forma de calor latente, se recomiendan materiales con temperaturas de fusión en el rango de 50 y 100 °C (Aridi & Yehya, 2022). En este sentido, procesos de modificación química como la hidrogenación, esterificación y transesterificación permiten ajustar las propiedades térmicas de aceites y grasas naturales, de manera que cumplan con este criterio operativo.

Finalmente, la caracterización experimental y el desarrollo de correlaciones matemáticas basadas en propiedades fisicoquímicas constituyen una herramienta fundamental para predecir el comportamiento térmico de materiales orgánicos basados en grasas y aceites, incluyendo aquellos de origen agroindustrial con potencial aplicación como materiales de cambio de fase (PCM). Si

bien dichas propiedades están influenciadas por la composición química y la estructura molecular del material, su medición permite integrar estos efectos de manera indirecta, facilitando la selección y el acondicionamiento de materiales con potencial aplicación en sistemas de almacenamiento de energía térmica. Además, el aprovechamiento de residuos agroindustriales contribuye a la gestión sostenible de los recursos, a la reducción de la huella de carbono y al fortalecimiento de las cadenas productivas, promoviendo soluciones energéticas más sostenibles y alineadas con la diversificación de la matriz energética del país.

2. Hipótesis

La aplicación de métodos de análisis y tratamiento de datos experimentales y bibliográficos de materiales de cambio de fase orgánicos, permitirá establecer correlaciones matemáticas entre propiedades térmicas (temperaturas y entalpías de fusión) y propiedades químicas como el peso molecular, el índice de yodo y el índice de acidez, para el desarrollo de biomateriales de cambio de fase a partir de grasas y aceites de origen agroindustrial.

3. Objetivos

3.1 Objetivo General

Desarrollar modelos matemáticos que describan la correlación de la temperatura de fusión y de la entalpía de fusión, a partir de las propiedades químicas de grasas y aceites de origen agroindustrial, para su uso como biomateriales de cambio de fase.

3.2 Objetivos Específicos

Modificar químicamente las propiedades de la estearina de palma hidrogenada mediante la técnica de transesterificación.

Analizar la influencia de la composición química sobre la temperatura y entalpía de fusión de la estearina de palma hidrogenada transesterificada mediante mezclas eutécticas.

Establecer modelos matemáticos que correlacionen las propiedades térmicas de biomateriales de cambio de fase orgánicos con sus propiedades químicas.

4. Metodología Experimental

La metodología del presente trabajo de investigación fue distribuida en 3 etapas. Inicialmente, se caracterizaron las propiedades fisicoquímicas y térmicas de la estearina de palma hidrogenada (EPH) mediante técnicas de calorimetría diferencial de barrido (DSC) y métodos titulométricos basados en la Norma Técnica Colombiana (NTC). En la segunda etapa, se llevó a cabo un proceso de transesterificación con el fin de modificar sus propiedades, tomando como referencia los resultados de la caracterización inicial. A partir del material modificado, se establecieron distintas proporciones de mezcla entre la estearina de palma hidrogenada y la modificada químicamente, las cuales fueron nuevamente caracterizadas para evaluar los cambios inducidos. Finalmente, a partir de los datos experimentales y obtenidos de literatura, se desarrollaron modelos matemáticos que permitieron correlacionar la temperatura y la entalpía de fusión de los materiales, mediante el ajuste de parámetros adecuados.

4.1 Fase I: Modificar químicamente las propiedades de la estearina de palma hidrogenada mediante la técnica de transesterificación

4.1.1 Actividad 1: Caracterización de propiedades fisicoquímicas y térmicas de la estearina de palma hidrogenada

La caracterización fisicoquímica y térmica de la estearina de palma hidrogenada (EPH) se realizó mediante diferentes técnicas analíticas. Las propiedades fisicoquímicas se determinaron mediante pruebas titulométricas conforme a las Normas Técnicas Colombianas (NTC), descritas en la Tabla 5, mientras que las propiedades térmicas se evaluaron mediante Calorimetría Diferencial de Barrido (DSC) bajo las condiciones presentadas en la Tabla 6.

Tabla 5.

Técnicas de caracterización titulométricas.

Tipo de análisis	Norma
Índice de yodo	NTC – 283:2019
Índice de acidez	NTC – 218:2011

Nota. Normas Técnicas Colombianas (NTC).

4.1.1.1 Determinación del índice de yodo. Se realizó según la Norma Técnica Colombiana NTC 283:2019, aplicando el método volumétrico de Wijs. Este método consiste en una titulación yodométrica que permite expresar el IV como la cantidad de gramos de yodo que reaccionan con 100 gramos de muestra.

Con el objetivo de ajustar la cantidad de muestra necesaria, se realizaron pruebas preliminares. La porción seleccionada se pesó con una precisión de 0,0001 g y se disolvió en un matraz de 500 ml con un volumen de solvente adecuado según las indicaciones de la norma. A continuación, se añadió el reactivo de Wijs y la mezcla se dejó reposar en la oscuridad durante 1 hora. Dependiendo del solvente empleado, se aplicó calor controlado para favorecer la disolución de la muestra, para solventes más volátiles no se recomienda el calentamiento.

Adicionalmente, se preparó un blanco con los mismos reactivos y solventes para calibrar el proceso. Una vez transcurrida la hora de reposo, tanto para la muestra como para el blanco, se añadieron 20 ml de yoduro de potasio y 150 ml de agua destilada. Posteriormente, se añadió una gota de solución de almidón como indicador. La titulación se realizó utilizando una solución normalizada de tiosulfato de sodio (0,1 mol/l) y el punto final se alcanzó cuando el color amarillo debido al yodo desapareció. De la misma manera, se realizó la determinación con el blanco, registrando los volúmenes de tiosulfato requeridos en cada titulación para calcular el índice de yodo de la muestra.

4.1.1.2 Determinación del índice de acidez. Se realizó según la Norma Técnica Colombiana NTC 218:2011, la cual especifica tres métodos para la determinación de la acidez en grasas y aceites animales y vegetales: dos basados en titulación y uno potenciométrico. En este estudio se empleó el método de etanol caliente con indicador, considerado como el método de referencia según la norma.

La cantidad de muestra necesaria se pesó con una precisión de 0,0001 g en un matraz de 500 ml. Posteriormente, la muestra se calentó a 10 °C por encima de su punto de fusión. De forma paralela, en un segundo matraz se calentaron 50 ml de etanol en presencia de 0,3 ml de la solución de fenolftaleína como indicador. Justo antes de su utilización, el etanol se neutralizó mediante la adición de una gota de solución de hidróxido de potasio (0,1 mol/l).

A continuación, se adicionó el etanol neutralizado a la porción de ensayo del primer matraz y se mezcló completamente. El contenido se llevó a ebullición y se tituló con la solución de hidróxido de potasio, agitando continuamente durante la titulación hasta alcanzar el punto final, indicado por un cambio de color persistente durante 15 s. El volumen de hidróxido de potasio utilizado para neutralizar los ácidos grasos libres permitió calcular el índice de acidez, expresado en miligramos de KOH por gramo de muestra.

Tabla 6.

Técnicas de caracterización para determinar propiedades térmicas.

Tipo de análisis	Técnica - Norma
Temperatura de fusión	DSC – ASTM E794-06 (2018)
Entalpía de fusión	DSC – ASTM E793-06 (2018)
Capacidad calorífica	DSC – ASTM E1269-11 (2018)

4.1.1.3 Condiciones de operación para calorimetría diferencial de barrido (DSC). Las condiciones de operación para la técnica DSC, establecen un calentamiento inicial a una tasa de 20 °C/min hasta alcanzar los 120 °C, temperatura seleccionada como límite superior para garantizar la completa fusión de la muestra. Esta temperatura se mantuvo durante 3 minutos. Posteriormente, la muestra fue sometida a un enfriamiento controlado a una tasa de 5 °C/min hasta alcanzar los -20 °C, manteniéndose a esta temperatura durante 3 minutos. Finalmente, se aplicó un segundo ciclo de calentamiento a una tasa de 5 °C/min hasta alcanzar nuevamente los 120 °C. Los datos obtenidos durante los ciclos térmicos fueron procesados mediante el software TRIOS (TA Instruments), a partir del cual se determinaron las temperaturas y entalpías de fusión y solidificación.

4.1.1.4 Condiciones de operación para capacidad calorífica (Cp). La determinación de la capacidad calorífica (Cp) mediante DSC se realizó siguiendo el método estándar establecido en la norma ASTM E1269-11. Las mediciones se llevaron a cabo en un rango de temperatura comprendido entre -30 °C y 130 °C, utilizando una velocidad de calentamiento constante de 3 °C/min. Para la calibración del sistema se empleó un patrón de zafiro con una masa de 25,2 mg.

4.1.2 Actividad 2: Modificación de las propiedades térmicas de la estearina de palma hidrogenada mediante el proceso de transesterificación

Este procedimiento tuvo como objetivo transformar los triglicéridos presentes en la estearina de palma hidrogenada en ésteres grasos, con el fin de mejorar sus características fisicoquímicas y térmicas para su uso como PCM.

4.1.2.1 Reacción de transesterificación de la estearina de palma hidrogenada (EPH).

La reacción se realizó a escala laboratorio, empleando alcohol cetílico (C₁₆H₃₃OH) e hidróxido de potasio (KOH) como catalizador.

Inicialmente, la estearina de palma hidrogenada (EPH) y el alcohol cetílico se colocaron por separado en un Erlenmeyer de 125 ml, en una relación molar 1:1. Posteriormente, cada recipiente se depositó en un matraz de 600 ml y se calentó a baño maría a una temperatura entre 60 y 65 °C hasta su completa fusión. Durante este proceso, se mantuvo una agitación constante mediante una barra magnética con el fin de asegurar la homogeneidad de las muestras.

Una vez fundidos, el alcohol cetílico se añadió al matraz que contenía la EPH, seguido de la incorporación de hidróxido de potasio (KOH), en una relación molar 5:1 (alcohol:catalizador). La reacción se llevó a cabo utilizando una relación molar 1:1 entre el alcohol cetílico y la EPH. La mezcla resultante se calentó a una temperatura entre 100 y 130 °C durante 3 horas, manteniendo la agitación constante para favorecer la reacción de transesterificación, mediante la cual los triglicéridos se convierten en ésteres.

Finalizado el tiempo de reacción, la mezcla se lavó con agua destilada previamente calentada a 60 °C, con el propósito de disolver el KOH residual y los subproductos hidrosolubles formados durante el proceso. La mezcla se agitó manualmente y se dejó decantar, observándose la separación de fases: la fase superior correspondió al éster graso (producto deseado), mientras que la fase inferior, de naturaleza acuosa, contuvo el KOH y otros residuos solubles. Este procedimiento de lavado se repitió en dos ocasiones adicionales, realizando la separación de fases después de cada lavado.

Tras la última decantación, el éster graso obtenido se separó y se sometió a secado en un horno a 105 °C con el fin de eliminar posibles trazas de agua residual. El producto final, una cera sólida o semisólida denominada estearina de palma hidrogenada transesterificada (EPHT), se dejó enfriar completamente antes de su análisis. La caracterización fisicoquímica y térmica de la EPHT se llevó a cabo utilizando las técnicas descritas en la Tabla 5 y Tabla 6, con el objetivo de evaluar

sus propiedades y confirmar las modificaciones obtenidas durante el proceso de transesterificación. El mecanismo de reacción por transesterificación básica se explica en el Apéndice A.

4.2 Fase II: Analizar la influencia de la composición química sobre la temperatura y entalpía de fusión de la estearina de palma hidrogenada transesterificada mediante mezclas eutécticas

4.2.1 Actividad 1: Establecimiento de las proporciones de mezcla para la estearina de palma hidrogenada

Una vez obtenido el material modificado mediante transesterificación (EPHT), se prepararon mezclas binarias de estearina de palma hidrogenada (EPH) y estearina de palma hidrogenada transesterificada (EPHT) en diferentes proporciones en peso. El objetivo de esta actividad fue evaluar la influencia de la composición de mezcla sobre las propiedades térmicas y fisicoquímicas de los materiales resultantes, mediante el desarrollo de mezclas con potencial para su uso como materiales de cambio de fase.

Las proporciones de mezcla se establecieron variando el contenido de EPH y EPHT en intervalos del 20 % en peso, obteniéndose un total de cinco (5) mezclas binarias. Adicionalmente, se incluyeron como referencia los materiales puros EPHT y EPH. La Tabla 7 presenta las proporciones evaluadas y la nomenclatura asignada a cada muestra.

Tabla 7.*Proporciones de mezclas entre la EPH y EPHT.*

Proporción de mezcla (% peso)	Componentes de mezcla
	EPH/EPHT
0:100	EPHT
10:90	EPH/EPHT - 2
30:70	EPH/EPHT - 4
50:50	EPH/EPHT - 6
70:30	EPH/EPHT - 8
90:10	EPH/EPHT - 10
100:0	EPH

4.2.2 Actividad 2: Caracterización de propiedades fisicoquímicas y térmicas de las mezclas

Las diferentes proporciones de mezcla de estearina de palma hidrogenada (EPH) y estearina de palma hidrogenada transesterificada (EPHT) fueron caracterizadas utilizando las mismas técnicas fisicoquímicas y térmicas descritas previamente en la metodología experimental. Esta caracterización se llevó a cabo con el fin de evaluar el efecto de la incorporación del material transesterificado y de la proporción de mezcla sobre las propiedades del material de cambio de fase resultante.

4.3 Fase III: Establecer modelos matemáticos que correlacionen las propiedades térmicas de los materiales de cambio de fase orgánicos con sus propiedades químicas**4.3.1 Actividad 1: Análisis bibliográfico y selección de parámetros predictivos para el desarrollo del modelo matemático**

En esta actividad se consolidó la información necesaria para el desarrollo del modelo matemático, a partir de datos experimentales y bibliográficos. Para ello se realizó una revisión bibliográfica enfocada en modelos previamente reportados para la estimación de propiedades

térmicas, tales como la temperatura y la entalpía de fusión, con énfasis en compuestos orgánicos. Esta revisión permitió identificar las variables químicas y estructurales que influyen en dichas propiedades, así como los enfoques matemáticos comúnmente empleados para describir estas relaciones.

De manera complementaria, se recopilaron datos experimentales y bibliográficos correspondientes a las propiedades químicas y térmicas de distintos compuestos orgánicos. Los datos experimentales se obtuvieron a partir de las mezclas binarias realizadas en la Fase II, mientras que la información adicional se extrajo de artículos científicos, bases de datos especializadas y reportes técnicos.

Una vez recopilada la información, se verificó la consistencia de los registros, se homogenizaron las unidades de medida y se descartaron valores incompletos o inconsistentes. Posteriormente, se consolidó una base de datos conformada por 25 materiales orgánicos de origen vegetal y animal, incluyendo aceites, grasas y ceras, con sus respectivas propiedades químicas y térmicas. Las referencias bibliográficas correspondientes a las propiedades químicas y térmicas recopiladas para cada material se presentan en el Apéndice B.

Con base en la revisión bibliográfica y la disponibilidad experimental de los datos, se seleccionaron como variables predictivas el índice de yodo (IV), el índice de acidez (AV) y el peso molecular promedio (MW), debido a su relación con el grado de insaturación, el contenido de ácidos grasos libres y la longitud promedio de cadena de los compuestos orgánicos.

Finalmente, la base de datos se organizó en función de rangos de temperatura de fusión, con el fin de facilitar el análisis comparativo e identificar tendencias preliminares en el comportamiento térmico de los materiales.

4.3.2. Actividad 2: Desarrollo de modelos matemáticos predictivos para la temperatura y la entalpía de fusión

A partir de la base de datos consolidada en la actividad anterior, se desarrollaron modelos matemáticos orientados a establecer la relación entre las propiedades químicas y térmicas de los materiales orgánicos evaluados. Para ello, se aplicó un análisis estadístico mediante regresión lineal múltiple, considerando como variables independientes el índice de yodo (IV), el índice de acidez (AV) y el peso molecular promedio (MW), y como variables dependientes la temperatura de fusión (T_m) y la entalpía de fusión (ΔH_m).

Inicialmente, se realizó un análisis exploratorio de los datos con el fin de identificar tendencias generales, dispersión y posibles diferencias de comportamiento entre los materiales evaluados. A partir de este análisis, se observó que la relación entre las variables químicas y las propiedades térmicas no presentaba un comportamiento lineal uniforme, debido a las diferencias estructurales y composicionales inherentes a los materiales analizados. En particular, se identificaron comportamientos diferenciados entre materiales con bajas y altas temperaturas de fusión, especialmente alrededor de 30 °C. Con base en ello, la base de datos fue segmentada en dos subgrupos:

- Rango 1: materiales con $T_m < 30$ °C
- Rango 2: materiales con $T_m \geq 30$ °C

Esta segmentación se implementó con el propósito de mejorar la representatividad y la capacidad predictiva de los modelos desarrollados, debido a la alta variabilidad estructural y composicional presente en el conjunto global de materiales. El mismo criterio se aplicó para desarrollar los modelos de entalpía de fusión.

Posteriormente, se evaluaron diferentes configuraciones de modelado, incluyendo regresión lineal múltiple, modelos polinomiales de segundo grado y transformaciones logarítmicas de las variables. Sin embargo, dado que las transformaciones evaluadas no mostraron mejoras significativas en el ajuste estadístico ni en la capacidad predictiva de los modelos, se seleccionó la regresión lineal múltiple como el enfoque principal para el desarrollo de las correlaciones.

El ajuste de los modelos y el cálculo de los parámetros estadísticos se realizaron utilizando Microsoft Excel. La evaluación del desempeño de las ecuaciones obtenidas se llevó a cabo mediante el coeficiente de determinación (R^2), el R^2 ajustado, el análisis de significancia estadística de los coeficientes (valor-p) y el porcentaje de error relativo entre los valores experimentales y estimados. El procedimiento general empleado para el ajuste de las correlaciones matemáticas mediante la herramienta de regresión lineal múltiple de Excel se presenta en el Apéndice C.

Para el análisis del error relativo, se adoptó un umbral de referencia del 20 %, considerando la diversidad estructural y composicional de los materiales orgánicos incluidos en la base de datos, así como la complejidad asociada a la estimación de propiedades térmicas a partir de variables químicas globales. Este criterio ha sido utilizado previamente en estudios de modelado y predicción de propiedades fisicoquímicas como parámetro orientativo para evaluar el desempeño general de modelos empíricos (Montgomery, Peck, & Vining, 2021).

A partir de este procedimiento se obtuvieron ecuaciones predictivas orientadas a estimar la temperatura de fusión y la entalpía de fusión de materiales orgánicos potencialmente utilizables como PCM en aplicaciones de almacenamiento de energía térmica.

5. Resultados

5.1 Modificación química de la estearina de palma hidrogenada mediante transesterificación

5.1.1 Caracterización fisicoquímica y térmica de la estearina de palma hidrogenada (EPH)

5.1.1.1 Propiedades fisicoquímicas. Los resultados de la caracterización fisicoquímica de la EPH se presentan en la Tabla 8. En dicha tabla se reportan dos parámetros clave determinados experimentalmente: el índice de yodo (IV) y el índice de acidez (AV), los cuales constituyen indicadores de referencia para evaluar, respectivamente, el grado de insaturación y la presencia de ácidos grasos libres en la muestra.

Tabla 8.

Propiedades fisicoquímicas de la EPH.

Propiedad	Valor Experimental
Índice de yodo	5,59
Índice de acidez	4,81

Nota. Índice de yodo (g I₂/100 g de muestra); Índice de acidez (mg KOH/g de muestra).

El valor del índice de yodo de la EPH fue de 5,59 g I₂/100 g de muestra, lo que confirma el bajo grado de insaturación de la muestra, coherente con la naturaleza hidrogenada de la grasa. La disminución del contenido de dobles enlaces evidencia un incremento en el grado de saturación de la grasa, condición que favorece una cristalización más ordenada y se asocia con un mayor punto de fusión, así como con una mayor estabilidad térmica y oxidativa, características deseables para aplicaciones como material de cambio de fase.

Por otra parte, el índice de acidez obtenido fue de 4,81 mg KOH/g de muestra, indicando la presencia de ácidos grasos libres en la muestra. Este resultado puede estar asociado a fenómenos

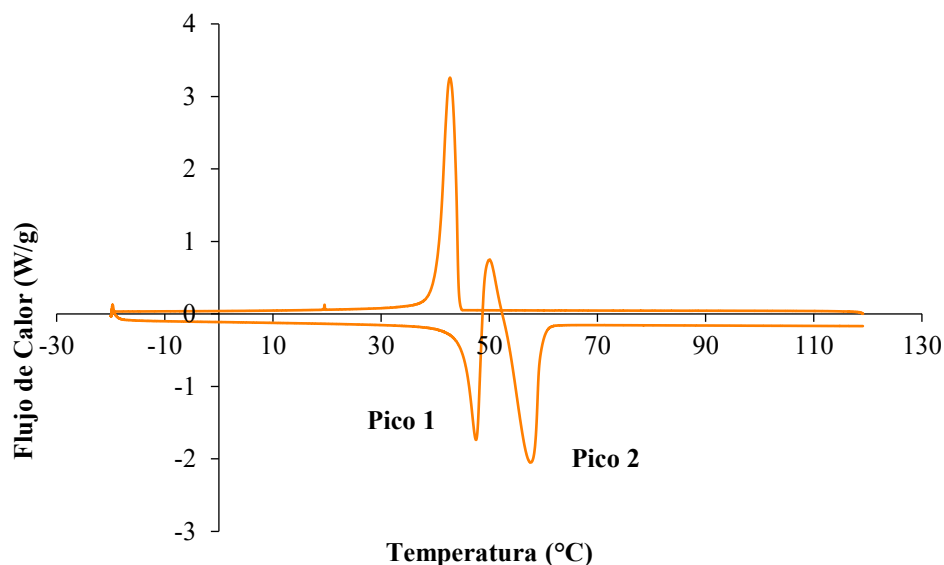
de hidrólisis parcial de triglicéridos durante el tratamiento térmico involucrado en el proceso de modificación química.

En conjunto, la caracterización fisicoquímica evidencia que la EPH presenta un bajo grado de insaturación y un índice de acidez moderado, parámetros que describen el estado químico inicial del material y permiten establecer una línea base para evaluar los cambios inducidos durante los procesos posteriores de modificación química y caracterización térmica.

5.1.1.2 Propiedades térmicas. La caracterización térmica de la EPH se realizó mediante calorimetría diferencial de barrido (DSC), siguiendo lo descrito en la sección 4.1.1.3 y 4.1.1.4. La Figura 1 presenta la curva DSC correspondiente al proceso de fusión y solidificación, en función del flujo de calor durante un ciclo térmico.

Figura 1.

Curva DSC de la estearina de palma hidrogenada (EPH).



Nota. El pico 1 corresponde a la fusión de fracciones minoritarias de triglicéridos, mientras que el pico 2 se asocia a la fusión de triglicéridos saturados de cadena larga, predominantes en la muestra.

En la Figura 1 se identifican dos picos endotérmicos de fusión, asociados a diferentes fracciones de triglicéridos presentes en la muestra. El primer pico corresponde a fracciones minoritarias con distinta longitud de cadena o grado de saturación, mientras que el segundo pico representa la fusión de triglicéridos saturados de cadenas largas, constituyendo la fracción predominante. Cabe destacar que, posterior al primer pico de fusión, la curva presenta una desviación hacia el eje exotérmico, posiblemente relacionada con una reorganización polimórfica de los cristales fundidos. Este fenómeno implica que, tras fundirse parcialmente, algunos triglicéridos se reorganizan espontáneamente en formas cristalinas más estables antes de completarse el proceso de fusión (Seilert et al., 2025).

Las propiedades térmicas se calcularon a partir de la curva obtenida por DSC mediante el software TRIOS de TA Instruments. Los resultados se presentan en la Tabla 9.

Tabla 9.

Propiedades térmicas de la EPH.

Propiedad	Valor Experimental
Temperatura de fusión (°C)	57,64
Entalpía de fusión (J/g)	150,54
Cp sólido (J/g·°C)	2,09 ± 0,26
Cp líquido (J/g·°C)	2,67 ± 0,03

Nota. Cp sólido: capacidad calorífica específica en fase sólida; Cp líquido: capacidad calorífica específica en fase líquida.

Para el análisis se consideró el pico 2, al representar de manera más significativa el comportamiento térmico de la muestra. Con base en ello, se determinó una temperatura de inicio de 53,19 °C, un pico de fusión a 57,64 °C y una temperatura final en 62,73 °C, junto con una

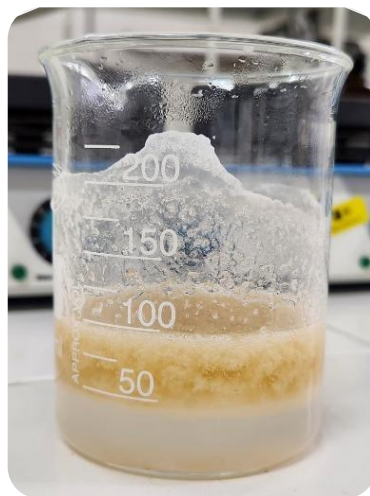
entalpía de fusión de 150,54 J/g. En comparación, la estearina de palma sin modificar presenta un rango de fusión de 45 a 52 °C y una entalpía de fusión de 85,5 J/g (Lizcano-González, 2025). Asimismo, los valores de capacidad calorífica obtenidos fueron de 2,09 J/g·°C en fase sólida y 2,67 J/g·°C en fase líquida, correspondientes a la capacidad del material para almacenar energía sensible antes y después del cambio de fase.

5.1.2 Reacción de transesterificación

Tras el proceso de transesterificación de la EPH se obtuvo como producto principal un éster cetílico (EPHT), acompañado de glicerina como subproducto. Durante la reacción se observó una separación clara de fases, como se muestra en la Figura 2. La fase superior corresponde a la EPHT, mientras que la fase inferior está compuesta por glicerina y subproductos. Esta separación permitió la recuperación del producto de interés.

Figura 2.

Separación de fases obtenida durante el proceso de transesterificación de la EPH.



Posteriormente, tras los lavados sucesivos y el secado, el producto final presentó una apariencia sólida y opaca, con una textura cristalina-granulosa y consistencia cerosa. El color varió entre tonos blanquecinos y beige claro, con algunas zonas más traslúcidas en la parte superior, como se observa en la Figura 3. Estos cambios en el estado físico confirman la transformación de los triglicéridos de la EPH en ésteres cetílicos.

Figura 3.

Aspecto físico de la EPHT tras los lavados y el secado.



5.1.3 Caracterización fisicoquímica y térmica de la estearina de palma hidrogenada transesterificada (EPHT)

5.1.3.1 Propiedades fisicoquímicas. La caracterización fisicoquímica de la EPHT se realizó siguiendo las metodologías descritas en la sección 4.1.1.1 y 4.1.1.2, correspondientes a la determinación del índice de yodo y del índice de acidez. Los resultados experimentales se presentan en la Tabla 10, comparados con los de la EPH.

Tabla 10.*Propiedades fisicoquímicas de la EPHT.*

Propiedad	Valor Experimental	Comparación con EPH
Índice de yodo	5,97	↑ leve respecto a EPH
Índice de acidez	0,9	↓ respecto a EPH

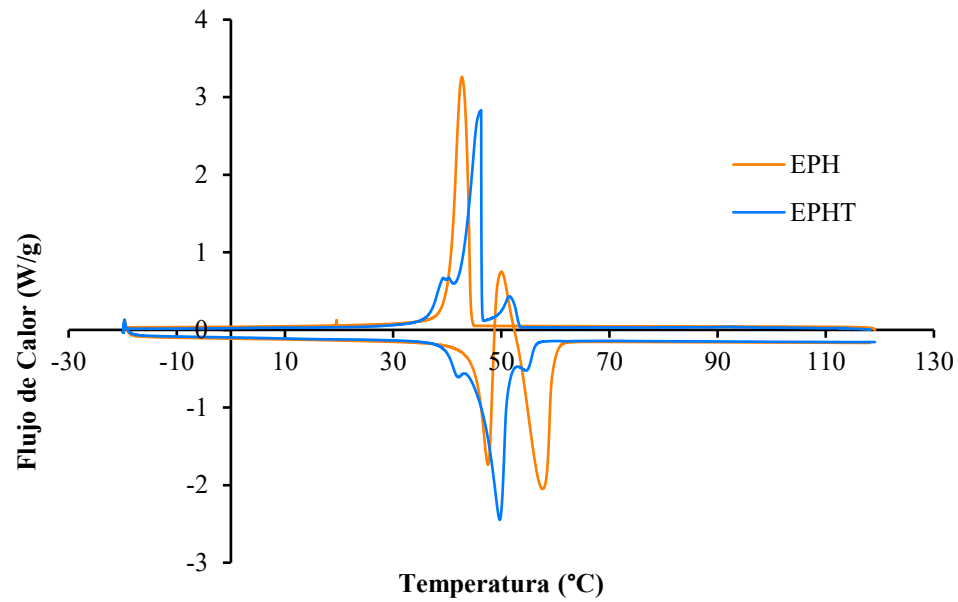
Nota. Índice de yodo (g I₂/100 g de muestra); Índice de acidez (mg KOH/g de muestra).

Se observa que el índice de yodo aumentó ligeramente, de 5,59 a 5,97 g I₂/100 g de muestra, lo que sugiere una variación mínima en la distribución de insaturaciones tras la reacción de transesterificación. En contraste, el índice de acidez disminuyó significativamente, de 4,81 a 0,9 mg KOH/g, es decir, aproximadamente 5,3 veces menor, lo que refleja un cambio notable en la composición de ácidos grasos libres del material.

5.1.3.2 Propiedades térmicas. Las curvas de fusión y solidificación de la EPH y EPHT se presentan en la Figura 4, permitiendo una comparación directa del comportamiento térmico de ambos materiales.

Figura 4.

Curvas DSC de la EPH y EPHT durante un ciclo de fusión–solidificación.



A partir del análisis de las curvas DSC, se evidencia que la EPHT mostró un pico endotérmico más definido y desplazado hacia temperaturas más bajas, mientras que la EPH presentó múltiples transiciones endotérmicas, lo que indicaría la presencia de una mezcla de triglicéridos con diferentes puntos de fusión y una menor uniformidad estructural.

Los valores de temperatura de fusión, entalpía de fusión y capacidad calorífica de la EPHT obtenidos, se presentan en la Tabla 11.

Tabla 11.*Propiedades térmicas de la EPHT.*

Propiedad	Valor Experimental
Temperatura de fusión (°C)	49,71
Entalpía de fusión (J/g)	155,79
Cp sólido (J/g·°C)	2,27 ± 0,16
Cp líquido (J/g·°C)	2,82 ± 0,03

Nota. Cp sólido: capacidad calorífica específica en fase sólida; Cp líquido: capacidad calorífica específica en fase líquida.

Estos resultados confirman que la temperatura de fusión de la EPHT disminuyó aproximadamente 7,93 °C respecto a la EPH, mientras que la entalpía de fusión aumentó de 150,54 J/g a 155,79 J/g. Asimismo, se observó un aumento en la capacidad calorífica en fase sólida (de 2,08 a 2,27 J/g·°C) y en líquida (de 2,67 a 2,87 J/g·°C) tras la transesterificación.

Con el fin de cuantificar las diferencias en el comportamiento térmico entre la EPH y el material transesterificado (EPHT), se estimó la energía térmica almacenada durante un ciclo de calentamiento, considerando el aporte del calor sensible y del calor latente asociado al cambio de fase, según la expresión reportada por Zhao et al. (2020) en la ecuación (6):

$$E = \int_{T_1}^{T_m} mCp_s dT + m\Delta Hm + \int_{T_m}^{T_2} mCp_l dT \quad (6)$$

Donde m (kg) es la masa de la muestra; Cp_s y Cp_l (kJ/kg·K) la capacidad calorífica específica del material en fase sólida y líquida, respectivamente; ΔHm (kJ/kg) es la entalpía de fusión; y E (kJ) corresponde a la energía térmica total almacenada durante el ciclo de

calentamiento. Los subíndices 1 y 2 indican el inicio y el final del proceso de transferencia de calor, respectivamente, mientras que T_m corresponde a la temperatura de fusión.

A partir de esta expresión y considerando como base de cálculo 1 kg para las muestras, se realizó una estimación comparativa de la energía almacenada por la EPH y la EPHT. Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 12.

Tabla 12.

Energía térmica almacenada estimada para la EPH y la EPHT.

Muestra	Energía Almacenada (kJ)
EPH	213,81
EPHT	237,15

Nota. Energía estimada considerando el aporte del calor sensible en fase sólida y líquida, así como un mismo intervalo de temperatura, con $T_1 = 25\text{ °C}$ y $T_2 = 80\text{ °C}$.

Los valores presentados en la Tabla 12 muestran que la EPHT almacena una mayor cantidad de energía térmica total en comparación con la EPH, alcanzando un valor de 237,15 kJ frente a 213,81 kJ. Este resultado corresponde a un incremento aproximado del 11 % en la energía térmica almacenada, lo que evidencia cuantitativamente el efecto de la transesterificación sobre el comportamiento térmico del material. Asimismo, esta diferencia refleja la contribución conjunta del ajuste en la temperatura de cambio de fase y del aumento en la entalpía de fusión del material modificado, permitiendo establecer una comparación directa entre la EPH y la EPHT en términos de su capacidad de almacenamiento de energía térmica bajo las mismas condiciones de cálculo.

5.2 Análisis de la influencia de la proporción de mezcla entre EPH y EPHT sobre las propiedades fisicoquímicas y térmicas

5.2.1 Caracterización de propiedades fisicoquímicas

5.2.1.1 Índice de yodo. En la Tabla 13 se presentan los valores del índice de yodo (IV) obtenidos para las diferentes mezclas binarias EPH/EPHT. Los resultados permiten analizar la influencia de la proporción de mezcla sobre el grado de insaturación de los materiales evaluados.

Tabla 13.

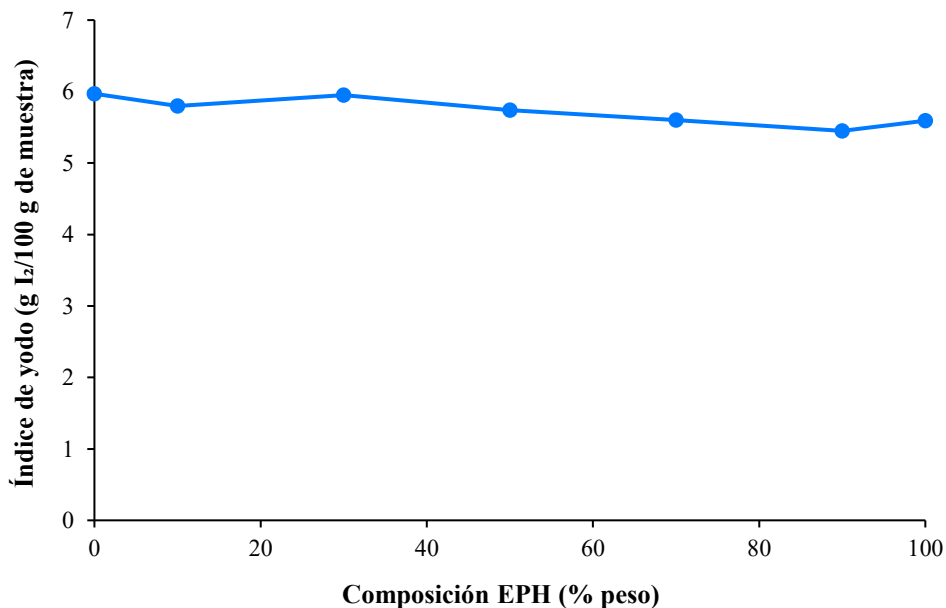
Índice de yodo de las mezclas binarias EPH/EPHT.

Muestra	Índice de yodo (g I ₂ /100 g muestra)
EPHT	5,97
EPH/EPHT – 2	5,8
EPH/EPHT – 4	5,95
EPH/EPHT – 6	5,74
EPH/EPHT – 8	5,6
EPH/EPHT – 10	5,45
EPH	5,59

Como se observa en la Tabla 13, los valores de IV de las mezclas se encuentran dentro del rango definido por los componentes puros EPHT y EPH. Además, se observa una tendencia decreciente del IV a medida que aumenta la proporción de la EPH, coherente con su mayor grado de saturación.

Figura 5.

Variación del índice de yodo en función del contenido de EPH en las mezclas binarias EPH/EPHT.



En la Figura 5, se identifica un ligero aumento del IV en la mezcla EPH/EPHT-4 (30:70) respecto a la tendencia general. Esta variación, aunque moderada, indica que el índice de yodo puede ajustarse de manera gradual mediante la proporción EPH/EPHT, lo cual resulta relevante para el control de la estabilidad química en el desarrollo y optimización de formulaciones destinadas a su aplicación como materiales de cambio de fase.

Aunque el índice de yodo no es un parámetro comúnmente reportado en estudios de PCM, su evaluación en sistemas lipídicos resulta importante debido a que permite estimar el grado de insaturación de la mezcla, propiedad estrechamente relacionada con la estabilidad oxidativa y el comportamiento térmico del material. En este sentido, los bajos valores de IV obtenidos para las mezclas EPH/EPHT sugieren una elevada proporción de cadenas saturadas, característica

favorable para aplicaciones TES que requieren estabilidad durante ciclos repetidos de calentamiento y enfriamiento.

5.2.1.2 Índice de acidez. En la Tabla 14 se presentan los valores obtenidos para las diferentes mezclas binarias EPH/EPHT, permitiendo evaluar el efecto de la proporción de cada componente sobre el contenido de ácidos grasos libres en la muestra.

Tabla 14.

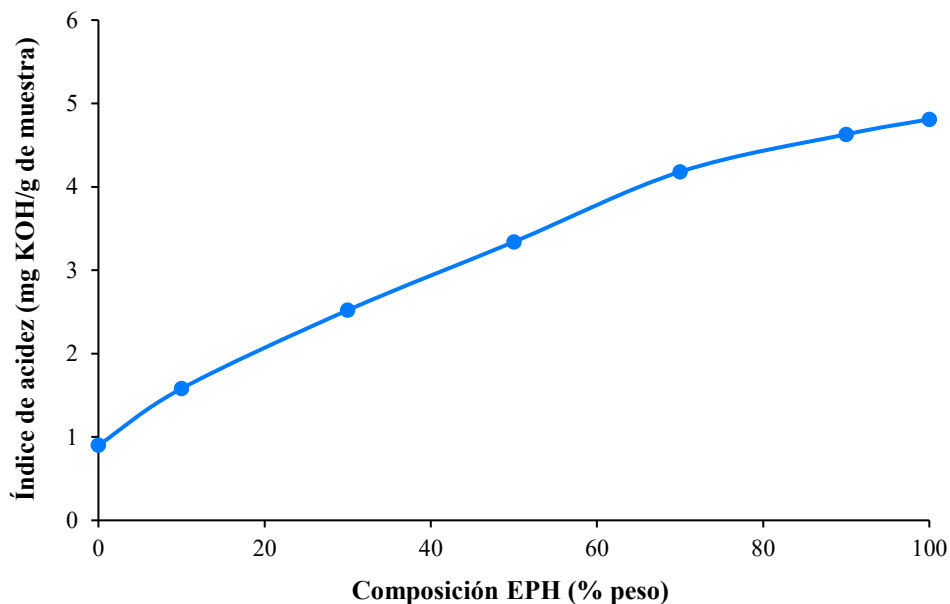
Índice de acidez de las mezclas binarias EPH/EPHT.

Muestra	Índice de acidez (mg KOH/g de muestra)
EPHT	0,9
EPH/EPHT – 2	1,58
EPH/EPHT – 4	2,52
EPH/EPHT – 6	3,34
EPH/EPHT – 8	4,18
EPH/EPHT – 10	4,63
EPH	4,81

Como se observa en la Tabla 14, el AV de las mezclas binarias EPH/EPHT presenta valores intermedios entre los componentes puros, mostrando un incremento progresivo a medida que aumenta el contenido de EPH.

Figura 6.

Variación del índice de acidez en función del contenido de EPH en las mezclas binarias EPH/EPHT.



En la Figura 6 se confirma que el incremento del índice de acidez está directamente asociado al aumento en la proporción de EPH en las mezclas binarias. Las formulaciones con mayor contenido de EPH presentan valores más elevados de acidez, mientras que la incorporación de EPHT conduce a una reducción progresiva de este parámetro. Estos resultados evidencian que el índice de acidez de las mezclas EPH/EPHT puede ajustarse de manera controlada mediante la composición de la formulación.

Aunque el índice de acidez no suele considerarse un parámetro de caracterización convencional en estudios de PCM, su evaluación proporciona información relevante sobre la presencia de ácidos grasos libres y el estado químico de los sistemas lipídicos. Valores elevados de acidez pueden asociarse a fenómenos de hidrólisis o degradación química, los cuales

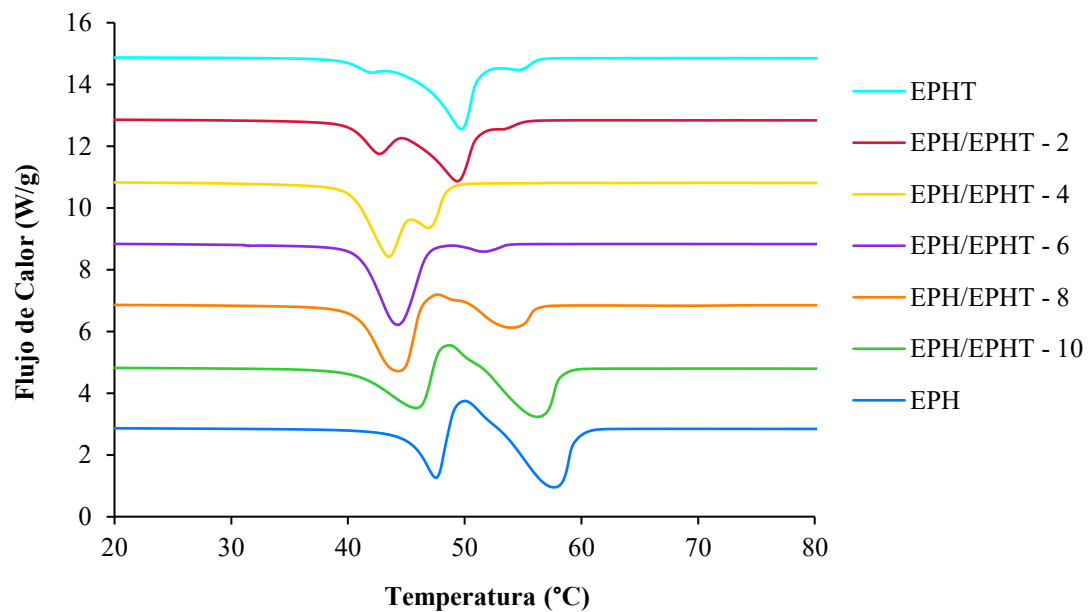
potencialmente podrían afectar la estabilidad del material durante ciclos térmicos repetidos. En este contexto, la disminución progresiva del AV con el incremento del contenido de EPHT sugiere una mejora en la estabilidad química de las mezclas, aspecto favorable para aplicaciones de almacenamiento de energía térmica.

5.2.2 Caracterización de propiedades térmicas

5.2.2.1 Análisis de la temperatura de fusión. En la Figura 7 se presentan las curvas de fusión obtenidas para las diferentes proporciones de mezcla, incluyendo los materiales puros como referencia.

Figura 7.

Curvas de fusión por DSC de EPH, EPHT y mezclas binarias.



En la Figura 7 se observa que tanto las mezclas como los materiales puros presentan uno o dos picos endotérmicos durante el proceso de fusión. En las mezclas, los picos de fusión muestran

un comportamiento intermedio: a medida que aumenta el contenido de EPH, los picos tienden a desplazarse hacia temperaturas mayores, alcanzando el valor mínimo en la mezcla EPH/EPHT-4 (30:70). Las mezclas EPH/EPHT-2, 4, 8 y 10 presentan dos picos endotérmicos, evidenciando la coexistencia de diferentes poblaciones de triglicéridos con distinta estabilidad cristalina. Por otro lado, la mezcla EPH/EPHT-6 (50:50) presenta un pico principal más definido, ubicado dentro del rango de los componentes puros. En todos los casos, el pico de fusión de mayor intensidad se considerado como valor representativo para el análisis comparativo.

Tabla 15.

Temperaturas de fusión de las mezclas binarias EPH/EPHT.

Muestra	Transición pico 1			Transición pico 2		
	To	Tmáx	Tf	To	Tmáx	Tf
EPH/EPHT - 2	41,29	42,72	46,06	46,06	49,38	51,08
EPH/EPHT - 4	41,67	43,51	45,74	45,74	46,87	47,53
EPH/EPHT - 6	40,97	44,26	49,65	49,65	51,66	54,34
EPH/EPHT - 8	40,69	44,33	46,44	50,67	53,97	59,36
EPH/EPHT - 10	40,57	45,83	47,31	51,67	56,22	60,05

Nota. To: temperatura inicial (°C); Tmáx: temperatura máxima (°C); Tf: temperatura final (°C). Se presentan hasta dos transiciones endotérmicas por muestra, cuando fueron detectadas en el análisis térmico.

La Tabla 15 presenta las temperaturas de fusión obtenidas por DSC para las mezclas binarias EPH/EPHT. Para cada muestra se reportan los valores de temperatura inicial (To), máxima (Tmáx) y final (Tf) de los picos endotérmicos identificados, registrándose hasta dos transiciones por muestra.

Se observa que la mezcla EPH/EPHT-4 (30:70) presentó la temperatura de fusión más baja, con un valor de 43,51 °C, aproximadamente 4,2 °C por debajo de la EPHT (49,71 °C) y 14,1

°C por debajo de la EPH (57,64 °C), lo que indica un comportamiento eutéctico en esta proporción. En contraste, la mezcla EPH/EPHT-10 (90:10) alcanzó la temperatura más elevada (56,22 °C), coherente con el mayor contenido de EPH, componente que, en su estado puro presenta la transición de fusión más elevada.

5.2.2.2 Análisis de la entalpía de fusión. Los valores de entalpía de fusión obtenidos para las mezclas binarias EPH/EPHT se muestran en la Tabla 16.

Tabla 16.

Entalpías de fusión de las mezclas binarias EPH/EPHT.

Muestra	ΔH_1	ΔH_2	ΔH_{total}
EPH/EPHT - 2	44,80	51,73	96,53
EPH/EPHT - 4	78,22	29,14	107,36
EPH/EPHT - 6	122,66	6,57	129,23
EPH/EPHT - 8	107,77	32,94	140,71
EPH/EPHT - 10	71,17	82,22	153,40

Nota. ΔH_1 y ΔH_2 : entalpía de fusión correspondiente a cada pico endotérmico (J/g); ΔH_{total} : entalpía total de fusión (J/g). Se presentan los resultados de entalpía de fusión obtenidos mediante análisis DSC.

En general, se observa que las mezclas presentan entre uno y dos picos de fusión, cuya contribución se refleja en la entalpía total de fusión. La mezcla EPH/EPHT-6 (50:50) alcanzó la mayor entalpía en un solo pico principal (122,66 J/g), mientras que en las mezclas EPH/EPHT-2, 4, 8 y 10 mostraron una distribución más equilibrada entre dos picos, indicando la participación de distintas fracciones de triglicéridos en el proceso de fusión.

Al analizar la entalpía total, se observa una tendencia creciente con el aumento del contenido de EPH en la mezcla, alcanzando el máximo valor en la composición EPH/EPHT-10

(153,40 J/g). Sin embargo, este comportamiento no implica necesariamente que la EPH pura presente la mayor entalpía del sistema, ya que la EPHT mostró experimentalmente un valor ligeramente superior. Lo anterior sugiere que la transesterificación modificó la distribución y organización de los triglicéridos, favoreciendo interacciones moleculares que incrementan la energía requerida para la transición de fase.

5.2.2.3 Cálculo de la capacidad calorífica. La capacidad calorífica específica (C_p) es un parámetro clave para cuantificar la energía que un material puede almacenar o liberar durante los procesos de calentamiento y enfriamiento. En este estudio se determinaron los valores de C_p en estado sólido y líquido para cada una de las mezclas binarias EPH/EPHT mediante DSC, según el procedimiento descrito en la sección de 4.1.1.4. La Tabla 17 presentan los resultados obtenidos.

Tabla 17.

Capacidad calorífica específica (C_p) en estado sólido y líquido de las mezclas binarias EPH/EPHT.

Muestra	C_p (J/g·°C)	
	Sólido	Líquido
EPHT	2,27 ± 0,16	2,82 ± 0,03
EPH/EPHT – 2	1,95 ± 0,10	2,37 ± 0,02
EPH/EPHT – 4	1,50 ± 0,18	2,16 ± 0,03
EPH/EPHT – 6	1,65 ± 0,15	2,28 ± 0,01
EPH/EPHT – 8	1,85 ± 0,22	2,41 ± 0,04
EPH/EPHT – 10	1,97 ± 0,21	2,55 ± 0,02
EPH	2,09 ± 0,26	2,67 ± 0,03

Nota. Los valores de C_p se reportan como promedios dentro del rango de temperatura correspondiente a cada fase. Se incluye la desviación estándar para cada valor.

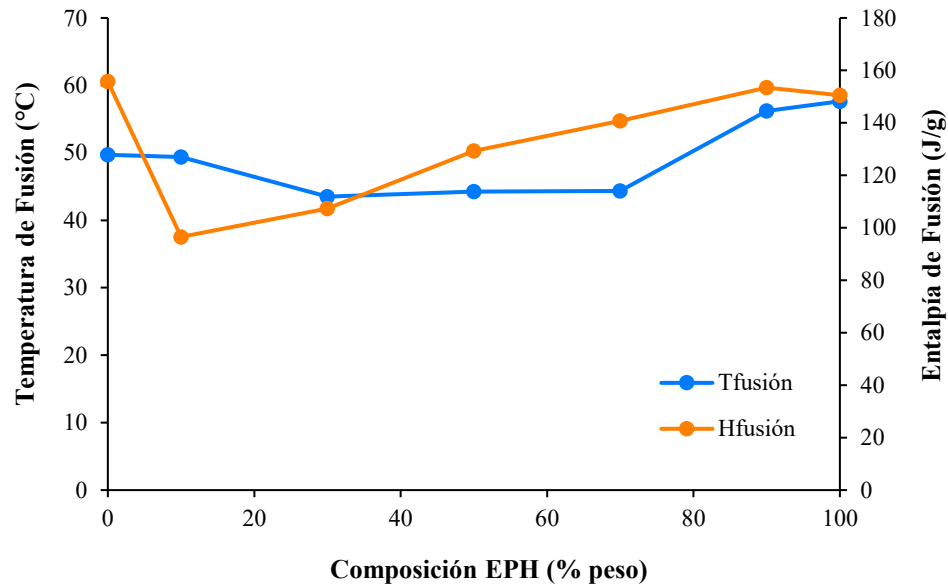
En general, los valores de capacidad calorífica en estado sólido varían entre 1,50 y 2,27 J/g·°C, mientras que en estado líquido se encuentran entre 2,16 y 2,82 J/g·°C, lo cual concuerda con los rangos típicos reportados para grasas y materiales orgánicos similares (Mehrizi et al., 2023). Se observa que las mezclas intermedias, especialmente EPH/EPHT-4, presenta el valor de Cp sólido más bajos, mientras que al aumentar la proporción de EPH, el Cp sólido se incrementa hasta alcanzar valores cercanos a los de los componentes puros. En estado líquido, los valores de Cp aumentan ligeramente con el contenido de EPH. Asimismo, las desviaciones estándar obtenidas fueron bajas, lo que indica una variabilidad reducida entre las mediciones realizadas.

5.2.3 Influencia de la proporción de mezcla sobre las propiedades térmicas

Con el fin de integrar los resultados térmicos obtenidos, en la Figura 8 se muestra la variación de la temperatura y la entalpía de fusión en función del porcentaje de EPH en las mezclas binarias EPH/EPHT.

Figura 8.

Diagrama de composición vs. temperatura y entalpía de fusión del sistema binario EPH/EPHT.



Se observa que las temperaturas de fusión de las mezclas no superan los valores registrados para los componentes puros. La temperatura mínima corresponde a la mezcla 30:70 (EPH/EPHT–4), indicando un comportamiento eutéctico. Por otro lado, la entalpía de fusión aumenta progresivamente con el contenido de EPH, lo que sugiere que, el aporte energético para la transición de fase requiere mayor energía para inducir la fusión. En conjunto, el diagrama muestra que ambos parámetros térmicos pueden ser modulados mediante la proporción de mezcla entre EPH y EPHT, permitiendo ajustar las propiedades del PCM de acuerdo con las necesidades de almacenamiento térmico.

5.3 Establecimiento de modelos matemáticos para correlacionar las propiedades térmicas y químicas de PCM orgánicos

A partir de la base de datos consolidada mediante información experimental y bibliográfica, se desarrollaron modelos matemáticos orientados a correlacionar las propiedades químicas de materiales orgánicos con sus propiedades térmicas, específicamente la temperatura de fusión (T_m) y la entalpía de fusión (ΔH_m). Los resultados obtenidos permiten analizar la influencia de variables como el índice de yodo (IV), el índice de acidez (AV) y el peso molecular promedio (MW) sobre el comportamiento térmico de los materiales evaluados.

5.3.1 Análisis bibliográfico y selección de parámetros predictivos para el desarrollo del modelo matemático

5.3.1.1 Revisión bibliográfica de modelos y variables reportadas en la literatura. La revisión bibliográfica permitió identificar los modelos empleados para la estimación de propiedades térmicas en compuestos orgánicos, con énfasis en grasas y aceites de origen vegetal y animal. Para ello, se consultaron artículos científicos, bases de datos especializadas y reportes técnicos que describen métodos de correlación de la temperatura y la entalpía de fusión con parámetros químicos y estructurales.

En la Tabla 18 se presenta un resumen de los principales modelos reportados en la literatura, indicando las propiedades térmicas estimadas, los parámetros empleados y el enfoque matemático utilizado en cada caso.

Tabla 18.

Modelos matemáticos y variables predictoras asociados a la estimación de propiedades térmicas de materiales orgánicos.

Material Estudiado	Propiedad térmica estimada	Variable utilizada	Tipo de modelo	Referencia
Triglicéridos saturados con número par de carbonos	Temperatura de fusión y entalpía de fusión	Contribución de grupos moleculares, posición del acil en el triglicérido (terminal / medio), clase de triglicérido	Modelo de contribución de grupos	(Zeberg-Mikkelsen & Stenby, 1999)
Mezclas de grasas antes y después de interesterificación	Punto de fusión – Slip Melting Point (SMP)	Composición de ácidos grasos	Modelo empírico de regresión lineal múltiple (método de mínimos cuadrados)	(Boyaci, Karabulut, & Turan, 2003)
Conjunto de compuestos orgánicos*	Temperatura de fusión y punto de ebullición	Parámetros de contribución estructural basados en pares de átomos adyacentes	Modelo de contribución de grupos (semi-empírico)	(Wen & Qiang, 2004)
Bioceras obtenidas por hidrotreamiento de ARP	Rango de fusión	Composición de ácidos grasos	Modelo empírico basado en regresión polinómica	(Murillo-Méndez et al., 2022)
Ésteres de ceras	Temperatura de fusión y entalpía de fusión	Número total de átomos de carbono (CN), posición del enlace éster dentro de la molécula (Δ CN)	Modelo de contribución de grupos	(Brykczynski, Seilert, & Flöter, 2025)

Nota. *Conjunto de compuestos orgánicos pertenecientes a seis clases estructurales (alifáticos, nafténicos, aromáticos, compuestos con O/S

y N, y compuestos halogenados). ARP: Aceite Refinado de Palma.

Los estudios revisados evidencian que la estimación de propiedades térmicas en materiales orgánicos se ha abordado principalmente mediante dos enfoques: modelos empíricos basados en correlaciones experimentales y modelos de contribución de grupos fundamentados en la estructura molecular de los compuestos (Jain & Yalkowsky, 2006).

Los modelos empíricos relacionan propiedades térmicas con variables químicas obtenidas experimentalmente, principalmente la composición de ácidos grasos. Boyaci et al. (2003), por ejemplo, emplearon regresión lineal múltiple para correlacionar el perfil de ácidos grasos con el punto de fusión (SMP) de mezclas lipídicas antes y después de la interesterificación, evidenciando la influencia del grado de saturación sobre el comportamiento térmico. De manera similar, Murillo-Méndez et al. (2022) desarrollaron modelos polinómicos para bioceras derivadas de aceites residuales de palma, demostrando que parámetros relacionados con la composición lipídica influyen significativamente sobre el rango de fusión y las propiedades fisicoquímicas de estos materiales.

Por otra parte, los modelos de contribución de grupos describen matemáticamente la influencia de la estructura molecular sobre las propiedades térmicas. Zeberg-Mikkelsen & Stenby (1999) estimaron la temperatura y la entalpía de fusión de triglicéridos saturados considerando la posición del acil y la clase de triglicérido. Posteriormente, Wen & Qiang (2004) desarrollaron un modelo semiempírico basado en pares de átomos adyacentes, ampliando su aplicabilidad a diferentes clases de compuestos orgánicos. Más recientemente, Brykczynski et al. (2025) propusieron correlaciones estructurales para ésteres de ceras, relacionando el número total de carbonos y la posición del enlace éster con la temperatura y la entalpía de fusión.

En conjunto, los modelos reportados en la literatura presentan alta capacidad predictiva; sin embargo, dependen principalmente de parámetros estructurales detallados, como la

composición específica de ácidos grasos o la distribución de enlaces moleculares. Aunque este tipo de información permite obtener estimaciones precisas, su determinación experimental suele requerir análisis experimentales complejos, costosos y poco accesibles en etapas preliminares de evaluación de nuevos materiales.

Considerando estas limitaciones, en el presente trabajo se planteó el desarrollo de modelos predictivos basados en parámetros químicos globales de fácil determinación experimental, como el índice de yodo (IV), el índice de acidez (AV) y el peso molecular promedio (MW). Estos parámetros presentan ventajas asociadas a su bajo costo analítico, amplia disponibilidad en la literatura y capacidad para representar características relevantes de los materiales orgánicos, como el grado de insaturación, la presencia de ácidos grasos libres y la longitud promedio de cadena. Bajo este enfoque, se busca desarrollar una herramienta de predicción de menor complejidad experimental para estimar propiedades térmicas especialmente en etapas iniciales de caracterización o diseño de materiales orgánicos, con alto potencial para su uso como PCM.

5.3.1.2 Selección de parámetros químicos para el desarrollo del modelo matemático.

A partir de la revisión bibliográfica realizada y del análisis de la información recopilada, se seleccionaron variables predictivas el índice de yodo (IV), el índice de acidez (AV) y el peso molecular promedio (MW), debido a su potencial para representar características químicas relacionadas con el comportamiento térmico de los materiales orgánicos.

El índice de yodo se asocia con el grado de insaturación de los compuestos lipídicos, mientras que el índice de acidez refleja el contenido de ácidos grasos libres presentes en el material. Por su parte, el peso molecular promedio aporta información relacionada con la longitud de cadena y la masa molecular promedio de los compuestos predominantes. En conjunto, estas variables

permiten describir características químicas con posible influencia sobre propiedades térmicas como la temperatura y la entalpía de fusión.

La Tabla 19 presenta la base de datos consolidada utilizada para el desarrollo de los modelos matemáticos. Esta incluyó 25 materiales orgánicos de distinta naturaleza, entre ellos aceites, grasas, ceras y materiales modificados químicamente mediante hidrogenación y transesterificación, integrando tanto datos experimentales obtenidos en este trabajo como información recopilada de la literatura especializada.

Tabla 19.

Propiedades químicas y térmicas de los compuestos orgánicos empleados en la construcción del modelo matemático.

Material	Propiedades fisicoquímicas y térmicas				
	IV (g I ₂ /100 g)	AV (mg KOH/g)	MW (g/mol)	T _m (°C)	ΔH _m (J/g)
Aceite de algodón	108	0,35	863,0	36	132,6
Aceite de canola	162	2,7	881,77	-13,56	72,2
Aceite de coco	9	0,3	638	25	102,97
Aceite de girasol	126,5	0,15	877,6	-11,03	68,67
Aceite de girasol alto oleico	90,5	0,8	885	-9,4	85,3
Aceite de oliva	83,5	0,4	884	1,43	72,91
Aceite de palma	55	4,8	847,78	36	117,28
Aceite de palmiste	18	0,83	710	26,53	74,35
Aceite de ricino	81,4	1,47	932	-8,58	18,25
Aceite de sésamo	115,6	1,34	876,492	-20,07	41,14
Aceite de soya	135,7	0,2	872,3	-26,34	42,5
Cera de abejas	10,5	19,5	282,40	62,28	141,5
Cera de candelilla	24,5	17	436,84	73	190,0
Cera de caña de azúcar	20	18,2	1122,7	78,8	183,6
Cera de carnauba	10,5	19,5	865,5	84	168,3
EPH/EPHT-10	5,45	4,63	864,2	56,22	153,40
EPH/EPHT-2	5,8	1,58	1385,6	49,38	96,53
EPH/EPHT-4	5,95	2,52	1204,0	43,51	107,36
EPH/EPHT-6	5,74	3,34	1064,5	44,26	129,23
EPH/EPHT-8	5,6	4,18	953,9	44,33	140,71
Estearina de palma	40,01	0,55	834	52,35	112,66
Estearina de palma hidrogenada	4,81	5,59	834	57,64	150,54
Estearina de palma hidrogenada transesterificada	0,9	5,97	1498,7	49,71	155,79
Oleína de palma	61,7	3,01	854,3	9,8	40,7
Sebo bovino	45,5	4,43	850,92	44	205,0

Nota. Los datos correspondientes a los materiales EPH/EPHT fueron obtenidos experimentalmente, mientras que el resto de la información se recopiló de la literatura especializada y reportes técnicos. Las referencias específicas asociadas a cada material se presentan en el Apéndice B. T_m : temperatura de fusión ($^{\circ}\text{C}$); ΔH_m : entalpía de fusión (J/g).

Los datos recopilados evidenciaron una amplia variabilidad en las propiedades químicas y térmicas de los materiales evaluados. Los valores de índice de yodo oscilaron entre 0,9 y 162 g $\text{I}/100\text{ g}$, reflejando diferencias importantes en el grado de insaturación entre aceites altamente insaturados y materiales más saturados, como ceras y grasas hidrogenadas. De manera similar, la temperatura de fusión presentó un amplio intervalo, desde valores negativos en aceites líquidos hasta temperaturas superiores a $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ en ceras naturales.

Asimismo, se observaron diferencias importantes en los valores de entalpía de fusión y peso molecular promedio, particularmente en materiales modificados químicamente, como las mezclas EPH/EPHT y la estearina de palma hidrogenada transesterificada. Estos resultados evidencian la diversidad estructural presente en la base de datos y justifican la necesidad de emplear estrategias de modelado capaces de representar distintos comportamientos térmicos dentro del conjunto de materiales analizados.

En conjunto, la selección de estas variables permitió establecer un equilibrio entre simplicidad experimental y capacidad descriptiva, facilitando el desarrollo de modelos predictivos aplicables a diferentes tipos de materiales orgánicos, tanto puros como modificados químicamente mediante transesterificación u otras rutas de síntesis.

5.3.2 Desarrollo de modelos matemáticos predictivos de propiedades térmicas

5.3.2.1 Comportamiento de las propiedades térmicas en función de las variables químicas. El análisis exploratorio de la base de datos evidenció que la relación entre las variables químicas seleccionadas (IV, AV y MW) y las propiedades térmicas no seguía una tendencia lineal uniforme para el conjunto global de materiales evaluados. Esta variabilidad estuvo asociada principalmente a las diferencias estructurales y composicionales entre aceites, grasas y ceras, así como a la presencia de materiales con temperaturas de fusión negativas.

En particular, se observó que los materiales con $T_m \geq 30$ °C presentaron tendencias más consistentes y menor dispersión en los ajustes preliminares, mientras que los materiales con $T_m < 30$ °C exhibieron una mayor variabilidad y errores relativos más elevados. Estos resultados evidenciaron la necesidad de segmentar la base de datos en dos rangos de temperatura de fusión, con el fin de mejorar la capacidad de ajuste y representatividad de los modelos desarrollados.

Asimismo, la evaluación comparativa entre las diferentes configuraciones matemáticas analizadas mostró que los modelos de regresión lineal múltiple proporcionaron el mejor equilibrio entre simplicidad, interpretabilidad y capacidad predictiva, en comparación con los modelos polinomiales y las transformaciones logarítmicas evaluadas. Bajo estas condiciones, se desarrollaron las correlaciones predictivas presentadas en las secciones siguientes.

5.3.2.2 Modelo T_m para materiales de baja temperatura de fusión. Este modelo corresponde al subgrupo con $T_m < 30$ °C, conformado principalmente por aceites que presentan variaciones marcadas en IV, AV y MW. A partir de los datos presentados en la Tabla 19 se ajustó un modelo de regresión lineal múltiple para la predicción de la temperatura de fusión. El modelo obtenido se expresa mediante la ecuación (7).

$$T_m = 71,193 - 0,2517 \cdot IV + 3,4696 \cdot AV - 0,0659 \cdot MW \quad (7)$$

Tabla 20.

Estadísticas globales del modelo de regresión para $T_m < 30$ °C.

Estadístico	Valor
Coefficiente de determinación (R^2)	0,90
R^2 ajustado	0,847
Error estándar de la estimación	7,06
Estadístico F	17,56
Valor-p (modelo)	0,0023
Número de observaciones (n)	10

Las estadísticas globales del modelo, presentadas en la Tabla 20, muestran que el ajuste obtenido es adecuado para este subgrupo. El coeficiente de determinación ($R^2 = 0,898$) indica que el modelo explica aproximadamente el 90 % de la variabilidad en la temperatura de fusión, mientras que el R^2 ajustado (0,847) confirma la consistencia del ajuste al considerar el número de predictores y el tamaño de la muestra. Asimismo, el estadístico F y el valor-p asociado evidencian que el modelo es globalmente significativo.

Tabla 21.

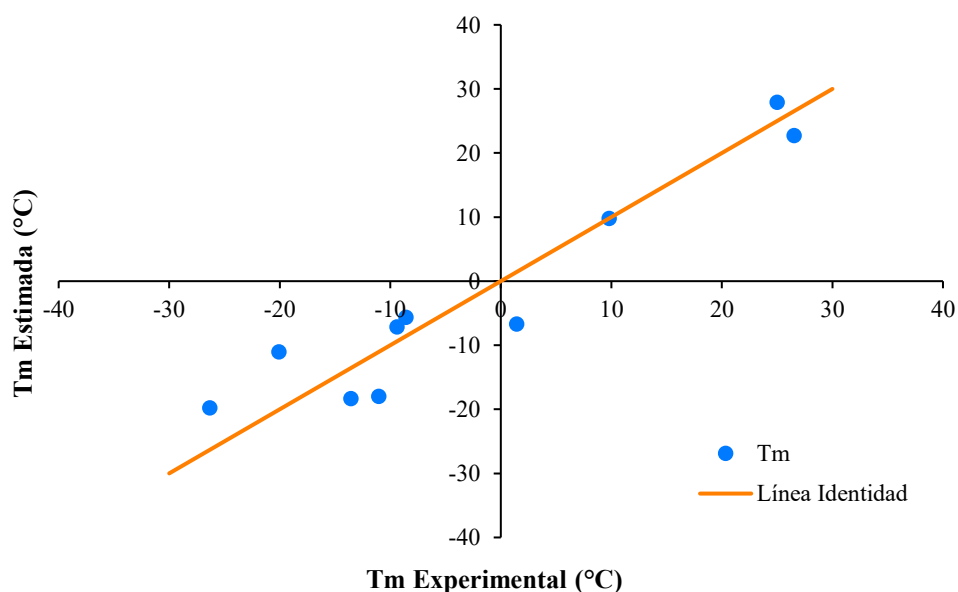
Coefficientes de regresión para $T_m < 30$ °C.

Parámetro	Coefficiente	Error típico	Estadístico t	Probabilidad
Intercepción	71,193	29,050	2,451	0,050
IV	-0,252	0,074	-3,410	0,014
AV	3,470	2,390	1,452	0,197
MW	-0,066	0,041	-1,627	0,155

En la Tabla 21 se presentan los coeficientes de regresión asociados al modelo. El índice de yodo muestra un efecto negativo y estadísticamente significativo ($p = 0,014$), lo que indica que un mayor grado de insaturación tiende a disminuir la temperatura de fusión. El índice de acidez y el peso molecular presentan valores de p superiores a 0,05, por lo que sus efectos no resultan estadísticamente significativos dentro de este subgrupo, sugiriendo que su influencia sobre la temperatura de fusión no es concluyente para estos materiales.

Figura 9.

Comparación entre T_m experimental y estimada para materiales con $T_m < 30$ °C.



La Figura 9 compara los valores experimentales con los estimados por el modelo. La línea naranja representa la tendencia ideal ($y = x$), frente a la cual la distribución de los puntos azules permite evaluar visualmente el ajuste. En general, los datos siguen una tendencia positiva consistente con los indicadores estadísticos obtenidos; sin embargo, se identifican algunas desviaciones puntuales que evidencian diferencias entre las predicciones del modelo y el comportamiento real de ciertos materiales. Con el fin de cuantificar estas discrepancias, se calculó el porcentaje de error relativo entre los valores experimentales y estimados, de acuerdo con el criterio de evaluación establecido en la metodología.

En la Tabla 22 se presentan las temperaturas de fusión estimadas, los valores experimentales y el porcentaje de error relativo para cada material del subgrupo con $T_m < 30$ °C.

Tabla 22.

Porcentaje de error entre T_m estimada y experimental ($T_m < 30$ °C).

Material	T_m Estimada (°C)	T_m Experimental (°C)	% Error Relativo
Aceite de canola	-18,34	-13,56	35,28
Aceite de coco	27,91	25,00	11,63
Aceite de girasol	-17,98	-11,03	63,03
Aceite de girasol alto oleico	-7,15	-9,40	23,89
Aceite de oliva	-6,71	1,43	569,54
Aceite de palmiste	22,73	26,53	14,31
Aceite de ricino	-5,64	-8,58	34,29
Aceite de sésamo	-11,04	-20,07	45,01
Aceite de soya	-19,78	-26,34	24,92
Oleína de palma	9,79	9,80	0,14

Los resultados muestran un desempeño variable del modelo, con materiales para los cuales la predicción presenta baja desviación relativa y otros donde se observan discrepancias

importantes. Materiales como el aceite de coco, el aceite de palmiste y la oleína de palma presentan errores relativos inferiores al 20 %, lo que evidencia una buena concordancia entre los valores experimentales y estimados para estos casos particulares.

Sin embargo, la mayoría de las muestras presentan desviaciones superiores al umbral establecido, con errores entre 23 % y 63 %, lo que indica que, aunque el modelo describe adecuadamente la tendencia global (respaldado por el alto R^2 y la proximidad a la línea de identidad), su precisión disminuye al predecir casos individuales. Esta dispersión sugiere que el comportamiento térmico de algunos materiales depende de características estructurales o composicionales más específicas que no están plenamente representadas por las variables químicas globales empleadas. El aceite de oliva presenta un comportamiento particular, dado que su temperatura de fusión experimental es cercana a 0 °C, lo que incrementa considerablemente el error relativo, aun cuando la diferencia absoluta entre los valores experimental y estimado no es elevada.

Por lo tanto, el modelo logra representar adecuadamente la tendencia general de la temperatura de fusión para materiales con $T_m < 30$ °C, identificando al índice de yodo como el predictor con mayor influencia sobre el comportamiento térmico del sistema, mientras que el AV y el MW presentan una contribución más limitada. No obstante, los errores observados en algunas muestras indican limitaciones en la precisión predictiva para ciertos materiales individuales, especialmente aquellos con temperaturas cercanas a cero.

5.3.2.3 Modelo T_m para materiales de alta temperatura de fusión. Este modelo corresponde al subgrupo con $T_m \geq 30$ °C, conformado principalmente por ceras y grasas hidrogenadas, caracterizadas por un mayor grado de orden estructural y menor variabilidad en sus propiedades fisicoquímicas globales. A partir de los datos presentados en la Tabla 19 se ajustó un modelo de regresión lineal múltiple para la predicción de la temperatura de fusión. El modelo obtenido se expresa mediante la ecuación (8(8)).

$$T_m = 36,83 - 0,064 \cdot IV + 1,831 \cdot AV + 0,00545 \cdot MW \quad (8)$$

Tabla 23.

Estadísticas globales del modelo de regresión para $T_m \geq 30$ °C.

Estadístico	Valor
Coefficiente de determinación (R^2)	0,78
R^2 ajustado	0,72
Error estándar de la estimación	7,84
Estadístico F	12,87
Valor-p (modelo)	0,00064
Número de observaciones (n)	15

Según la Tabla 23, las estadísticas globales indican que el modelo presenta una capacidad moderada para describir la temperatura de fusión de los materiales con $T_m \geq 30$ °C. El coeficiente de determinación ($R^2 = 0,78$) muestra que el modelo explica aproximadamente el 78 % de la variabilidad, mientras que el R^2 ajustado (0,72) evidencia que esta capacidad explicativa se mantiene al considerar el número de predictores incluidos en el modelo. Asimismo, el estadístico F y el valor-p asociado indican que el modelo es globalmente significativo.

Tabla 24.

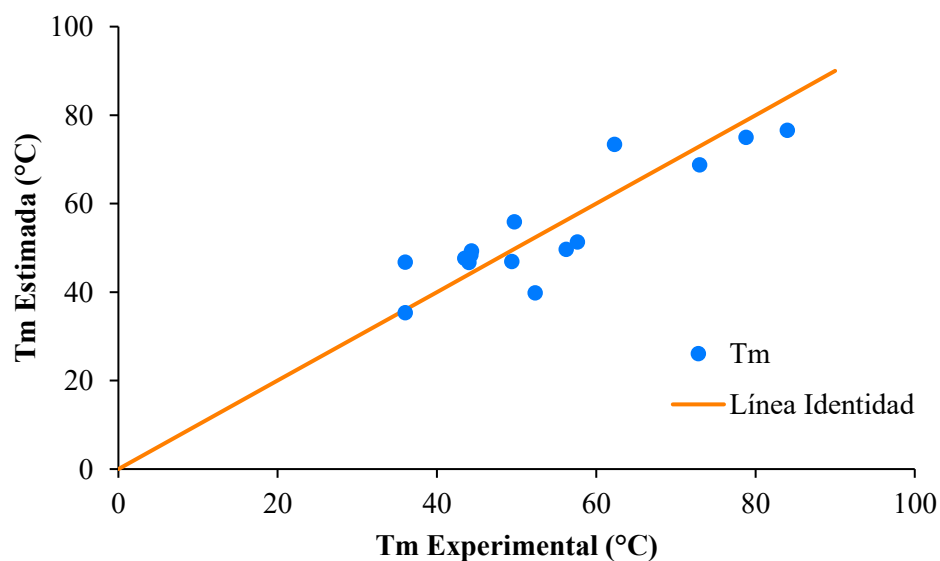
Coefficientes de regresión para $T_m \geq 30$ °C.

Parámetro	Coefficiente	Error típico	Estadístico t	Probabilidad
Intercepción	36,832	10,837	3,399	0,006
IV	-0,0635	0,0828	-0,767	0,459
AV	1,831	0,371	4,936	0,0004
MW	0,00545	0,00838	0,651	0,528

En la Tabla 24 se presentan los coeficientes estimados para el modelo. El índice de acidez (AV) presentó un efecto positivo y estadísticamente significativo ($p = 0,0004$), indicando que un mayor contenido de ácidos libres se asocia con incrementos en la temperatura de fusión dentro de este subgrupo. En contraste, el índice de yodo (IV) y el peso molecular (MW) muestran efectos no significativos ($p > 0,05$), lo que sugiere que su influencia directa sobre la temperatura de fusión es limitada o posiblemente modulada por otras características estructurales no incluidas en el modelo.

Figura 10.

Comparación entre T_m experimental y estimada para materiales con $T_m \geq 30$ °C.



La Figura 10 compara los valores experimentales y los estimados por el modelo. En general, los valores predichos siguen la tendencia global de los datos y presentan una menor dispersión en comparación con el modelo de baja temperatura de fusión, lo que puede asociarse a la mayor uniformidad y ordenamiento estructural de los materiales pertenecientes a este subgrupo. Sin embargo, aunque el modelo presenta una capacidad descriptiva moderada, únicamente el índice de acidez (AV) resultó estadísticamente significativo dentro de la correlación desarrollada. Adicionalmente, el análisis del porcentaje de error relativo permitió evaluar las discrepancias individuales entre los valores experimentales y estimados para cada material.

Tabla 25.

Porcentaje de error entre Tm estimada y experimental (Tm ≥ 30 °C).

Material	Tm Estimada (°C)	Tm Experimental (°C)	% Error Relativo
Aceite de algodón	35,32	36,00	1,90
Aceite de palma	46,75	36,00	29,85
Cera de abejas	73,40	62,28	17,86
Cera de candelilla	68,78	73,00	5,78
Cera de caña de azúcar	75,00	78,80	4,82
Cera de carnauba	76,58	84,00	8,83
EPH/EPHT-10	49,67	56,22	11,64
EPH/EPHT-2	46,91	49,38	5,00
EPH/EPHT-4	47,63	43,51	9,48
EPH/EPHT-6	48,39	44,26	9,32
EPH/EPHT-8	49,33	44,33	11,28
Estearina de palma	39,84	52,35	23,89
Estearina de palma hidrogenada	51,31	57,64	10,99
Estearina de palma hidrogenada transesterificada	55,88	49,71	12,40
Sebo bovino	46,69	44,00	6,11

En general, el modelo presenta una capacidad predictiva variable para los materiales con $T_m \geq 30$ °C. La mayoría de los compuestos evaluados presentan errores relativos inferiores al 20 %, incluyendo ceras y materiales modificados químicamente como EPH/EPHT-2, EPH/EPHT-4, EPH/EPHT-6 y EPH/EPHT-8, lo que evidencia una mejor concordancia entre los valores experimentales y estimados para materiales con composición más uniforme.

No obstante, algunos materiales, como el aceite de palma y la estearina de palma, presentan errores relativos superiores al umbral establecido, indicando limitaciones del modelo para representar sistemas con mayor complejidad composicional. Estas desviaciones sugieren que variables globales como IV, AV y MW no capturan completamente aspectos estructurales más específicos, tales como la distribución individual de triglicéridos, la presencia de fracciones minoritarias o las interacciones moleculares presentes en este tipo de materiales.

En conjunto, los resultados indican que el modelo logra representar la tendencia general de la temperatura de fusión en materiales de alta temperatura, aunque con una precisión limitada para algunos casos particulares. El índice de acidez fue la variable con mayor influencia estadística dentro del modelo, mientras que IV y MW mostraron contribuciones más moderadas. Por lo tanto, la correlación desarrollada puede considerarse útil para estimaciones preliminares y análisis comparativos, aunque su capacidad predictiva disminuye en materiales con composiciones químicas más complejas.

5.3.2.4 Modelo ΔH_m para materiales de baja temperatura de fusión. Para el desarrollo del modelo de la entalpía de fusión (ΔH_m) del subgrupo de materiales de baja temperatura de fusión ($T_m < 30$ °C), compuesto principalmente por aceites vegetales, se utilizaron los datos experimentales y bibliográficos descritos en la Tabla 19. Se aplicó un análisis de regresión lineal múltiple conservando las tres variables predictoras seleccionadas (IV, AV y MW). El modelo obtenido se expresa mediante la ecuación (9):

$$\Delta H_m = 250,673 + 0,183 \cdot IV - 4,904 \cdot AV - 0,273 \cdot MW \quad (9)$$

Tabla 26.

Estadísticas globales del modelo de regresión para ΔH_m ($T_m < 30$ °C).

Estadístico	Valor
Coefficiente de determinación (R^2)	0,50
R^2 ajustado	0,25
Error estándar de la estimación	22,05
Estadístico F	2,00
Valor-p (modelo)	0,216
Número de observaciones (n)	10

Las estadísticas globales del modelo, presentadas en la Tabla 26, indican que la regresión explica aproximadamente el 50 % de la variabilidad observada en la entalpía de fusión ($R^2 = 0,50$). No obstante, al ajustar por el número de predictores y el tamaño de la muestra, el R^2 ajustado disminuye a 0,25, lo que evidencia que la capacidad explicativa real del modelo es limitada. Asimismo, el estadístico F y el valor-p ($p = 0,216$) sugieren que el modelo no alcanza significancia

estadística global al nivel de confianza habitual. Considerando lo anterior, estos resultados reflejan que las variables químicas consideradas capturan solo parcialmente la variación de ΔH_m en este subgrupo de materiales de baja temperatura de fusión.

Tabla 27.

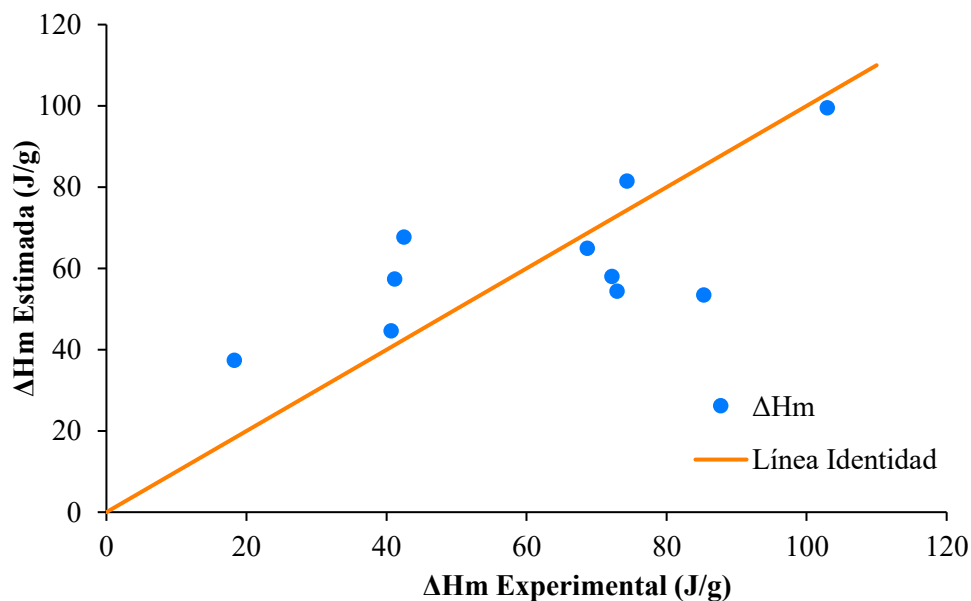
Coefficientes de regresión para ΔH_m ($T_m < 30$ °C).

Parámetro	Coefficiente	Error típico	Estadístico t	Probabilidad
Intercepción	250,67	90,76	2,762	0,033
IV	0,183	0,231	0,794	0,457
AV	-4,904	7,467	-0,657	0,536
MW	-0,237	0,127	-1,873	0,110

En la Tabla 27 se presentan los coeficientes estimados para el modelo. Ninguna de las variables consideradas resultó estadísticamente significativa, lo que refleja la limitada capacidad del modelo para explicar la variación de ΔH_m en este subgrupo. Dentro de los predictores, el peso molecular (MW) muestra la tendencia más marcada, con un coeficiente negativo y un valor-p cercano al umbral de significancia ($p = 0,110$), sugiriendo que materiales con mayor masa molecular podrían presentar entalpías de fusión ligeramente menores. Por su parte, el IV y el AV presentan efectos débiles y no significativos, indicando que su contribución a la variación de ΔH_m es limitada. Esta baja predictibilidad se relaciona con la naturaleza estructural de los materiales de baja fusión, caracterizados por matrices altamente insaturadas y menos ordenadas.

Figura 11.

Comparación entre ΔH_m experimental y estimada para materiales con $T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$.



La Figura 11 compara los valores experimentales con los estimados por el modelo. Se observa una dispersión significativa alrededor de la línea, indicando un ajuste limitado, aunque se mantiene la tendencia creciente general de la propiedad. Para cuantificar estas discrepancias, se calculó el error relativo para cada muestra, usando un umbral de 20 % como criterio de aceptabilidad. Los resultados se presentan en la Tabla 28.

Tabla 28.

Porcentaje de error entre ΔH_m estimada y experimental ($T_m < 30\text{ }^\circ\text{C}$).

Material	ΔH_m Estimada (J/g)	ΔH_m Experimental (J/g)	% Error Relativo
Aceite de canola	57,99	72,19	19,67
Aceite de coco	99,55	102,97	3,32
Aceite de girasol	64,98	68,67	5,37

Aceite de girasol alto oleico	53,45	85,30	37,34
Aceite de oliva	54,37	72,91	25,44
Aceite de palmiste	81,52	74,35	9,65
Aceite de ricino	37,35	18,25	104,65
Aceite de sésamo	57,42	41,14	39,56
Aceite de soya	67,68	42,49	59,29
Oleína de palma	44,61	40,65	9,75

En general, solo cuatro materiales presentan errores relativos inferiores al 20 %, mientras que la mayoría supera ampliamente este umbral, con desviaciones que incluso superan el 50 %, como ocurre en el aceite de ricino y el aceite de soya. Estos resultados indican que, aunque el modelo logra representar parcialmente la tendencia general de ΔH_m , su precisión disminuye considerablemente al evaluar materiales individuales.

A pesar de la dispersión observada, los errores no muestran un patrón claro de sobreestimación o subestimación, comportamiento similar al observado en el modelo de $T_m < 30$ °C. Esto sugiere nuevamente que la entalpía de fusión depende de características moleculares más específicas que no están completamente representadas por las variables globales consideradas. Por lo tanto, la predicción basada únicamente en IV, AV y MW resulta insuficiente para describir el comportamiento de estos materiales de baja temperatura de fusión, evidenciando la necesidad de incorporar variables adicionales que representen mejor la composición y estructura molecular de cada muestra.

5.3.2.5 Modelo ΔH_m para materiales de alta temperatura de fusión. En esta sección se presenta el modelo desarrollado para estimar la entalpía de fusión (ΔH_m) del subgrupo de materiales con $T_m \geq 30$ °C, conformado principalmente por ceras y grasas hidrogenadas, caracterizados por una alta saturación y un mayor ordenamiento molecular. Siguiendo la misma metodología utilizada en los modelos anteriores, se aplicó una regresión lineal múltiple empleando las variables químicas seleccionadas (IV, AV y MW), utilizando los datos experimentales descritos en la Tabla 19. El modelo obtenido para este rango térmico se presenta en la ecuación (10):

$$\Delta H_m = 118,22 + 0,179 \cdot IV + 2,761 \cdot AV + 0,00283 \cdot MW \quad (10)$$

Tabla 29.

Estadísticas globales del modelo de regresión para ΔH_m ($T_m \geq 30$ °C).

Estadístico	Valor
Coefficiente de determinación (R^2)	0,35
R^2 ajustado	0,17
Error estándar de la estimación	28,75
Estadístico F	1,93
Valor-p (modelo)	0,183
Número de observaciones (n)	15

Los resultados estadísticos del modelo se resumen en la Tabla 29. El coeficiente de determinación $R^2 = 0,35$ indica que solo el 35 % de la variabilidad en la entalpía de fusión de los materiales con $T_m \geq 30$ °C es explicada por las variables consideradas. Al considerar el efecto del número de predictores y el tamaño de la muestra, el R^2 ajustado disminuye a 0,17, evidenciando la limitada capacidad explicativa del modelo. Asimismo, el estadístico F y su valor-p ($p > 0,05$)

confirman que el modelo no es globalmente significativo, lo que sugiere que las variables IV, AV y MW presentan una capacidad limitada para describir la variación de ΔH_m en este conjunto de materiales.

Tabla 30.

Coefficientes de regresión para ΔH_m ($T_m \geq 30$ °C).

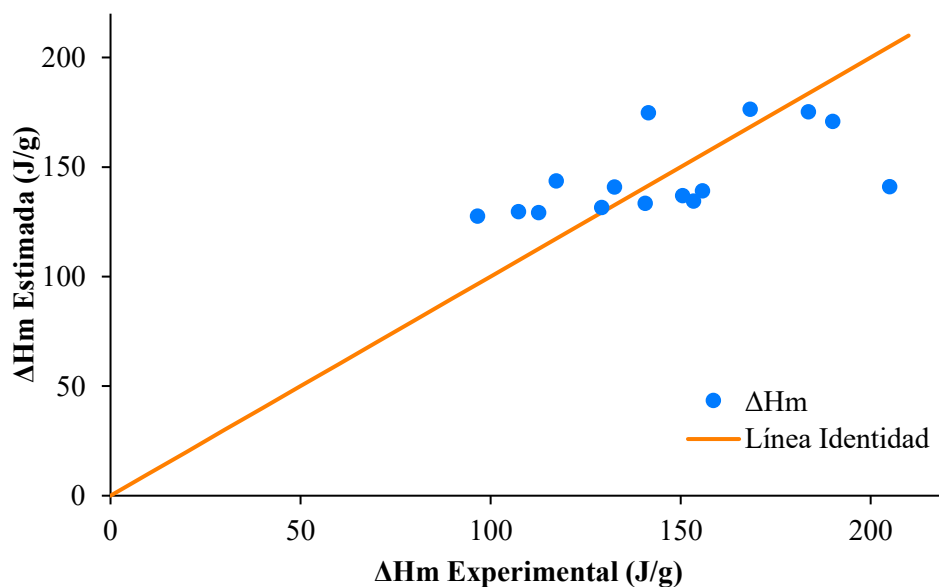
Parámetro	Coefficiente	Error típico	Estadístico t	Probabilidad
Intercepción	118,22	39,723	2,976	0,013
IV	0,179	0,304	0,588	0,568
AV	2,761	1,359	2,031	0,067
MW	0,00283	0,031	0,092	0,928

En la Tabla 30 se resumen los coeficientes estimados para el modelo. Ninguno de los predictores resulta estadísticamente significativo; sin embargo, el índice de acidez (AV) destaca como el de mayor relevancia, con un coeficiente positivo y una significancia marginal ($p = 0,067$). Esto sugiere que materiales con mayor contenido de ácidos grasos libres tienden a exhibir valores ligeramente más altos de entalpía de fusión, lo que podría estar relacionado con cambios en la organización cristalina del material.

Por su parte, el índice de yodo (IV) presenta un coeficiente positivo, pero no significativo, indicando que la variabilidad en insaturación tiene un impacto limitado en este subgrupo de materiales predominantemente saturados. Por su parte, el peso molecular (MW) muestra un efecto prácticamente nulo ($p = 0,928$), reflejando su escasa capacidad predictiva, probablemente porque la masa molecular de los componentes principales no varía lo suficiente como para influir en ΔH_m en este conjunto de ceras y grasas hidrogenadas.

Figura 12.

Comparación entre ΔH_m experimental y estimada para materiales con $T_m \geq 30$ °C.



La Figura 12 muestra la comparación entre los valores experimentales y los estimados por el modelo para los materiales con $T_m \geq 30$ °C. Aunque el modelo refleja parcialmente la tendencia general observada para ΔH_m , las predicciones individuales muestran desviaciones significativas respecto a los datos experimentales. Esto refleja que las variables utilizadas (IV, AV y MW) explican solo parcialmente la variación de la entalpía de fusión en este subgrupo. Para cuantificar estas diferencias, se calculó el error relativo de cada muestra, considerando un umbral de aceptabilidad del 20 %, cuyos resultados se presentan en la Tabla 31.

Tabla 31.

Porcentaje de error entre ΔH_m estimada y experimental ($T_m \geq 30$ °C).

Material	ΔH_m Estimada (J/g)	ΔH_m Experimental (J/g)	% Error Relativo
Aceite de algodón	140,92	132,58	6,29
Aceite de palma	143,70	117,28	22,52
Cera de abejas	174,73	141,49	23,49
Cera de candelilla	170,77	190,00	10,12
Cera de caña de azúcar	175,22	183,60	4,57
Cera de carnauba	176,38	168,30	4,80
EPH/EPHT-10	134,42	153,40	12,37
EPH/EPHT-2	127,54	96,53	32,13
EPH/EPHT-4	129,65	107,36	20,76
EPH/EPHT-6	131,48	129,23	1,74
EPH/EPHT-8	133,46	140,71	5,15
Estearina de palma	129,25	112,66	14,72
Estearina de palma hidrogenada	136,87	150,54	9,08
Estearina de palma hidrogenada transesterificada	139,11	155,79	10,71
Sebo bovino	140,99	205,00	31,23

El análisis del error relativo muestra que varios materiales presentan desviaciones inferiores al 20 %, especialmente en ceras y mezclas con mayor uniformidad estructural. Esto sugiere que, para ciertos materiales del rango de alta temperatura de fusión, las variables globales IV, AV y MW logran representar parcialmente el comportamiento de la entalpía de fusión.

No obstante, algunos materiales presentan errores superiores al 20 % y 30 %, lo que evidencia las limitaciones del modelo para predecir valores individuales de entalpía de fusión. Este comportamiento puede atribuirse a la influencia de factores composicionales y estructurales más específicos que no están representados por las variables globales consideradas (IV, AV y MW).

6. Conclusiones

El estudio permitió desarrollar modelos matemáticos que correlacionan las propiedades térmicas (temperatura y entalpía de fusión) de la estearina de palma hidrogenada y otros PCM orgánicos con sus propiedades químicas (IV, AV y MW). La segmentación de los materiales en dos grupos según su temperatura de fusión (superior o inferior a 30 °C) permitió mejorar la representatividad y el desempeño estadístico de los modelos desarrollados.

La transesterificación de la EPH produjo un material modificado (EPHT) con menor índice de acidez y ligero aumento del índice de yodo, reflejando cambios en la composición química y en la distribución de dobles enlaces de los ácidos grasos. Esto se tradujo en un incremento aproximado del 11 % en la energía térmica almacenada respecto a la EPH, evidenciando un mayor potencial para aplicaciones de energía tanto sensible como latente.

En las mezclas binarias EPH/EPHT, la proporción de cada componente afectó directamente el índice de acidez, la temperatura de fusión y la entalpía de fusión. Se identificó un punto eutéctico en la mezcla 30:70 (EPH/EPHT-4), con la temperatura de fusión más baja del sistema (43,51 °C), representando una disminución de aproximadamente 6,2 °C respecto a la EPHT y de 14,1 °C respecto a la EPH. Por su parte, la mezcla 90:10 (EPH/EPHT-10) presentó la mayor entalpía de fusión. Estos resultados evidencian que la proporción de mezcla permite modificar las propiedades térmicas y fisicoquímicas de los PCM según los requerimientos de aplicación.

El análisis estadístico realizado evidenció que las propiedades térmicas de los PCM orgánicos pueden correlacionarse con propiedades químicas como el índice de yodo, el índice de acidez y el peso molecular. No obstante, la capacidad predictiva de los modelos dependió del tipo de propiedad evaluada y del grado de heterogeneidad estructural de los materiales.

Los modelos desarrollados para la predicción de la temperatura de fusión de PCM orgánicos mostraron mejor desempeño en materiales con mayor grado de saturación y menor complejidad composicional, como estearinas, ceras naturales y mezclas modificadas, presentando errores relativos inferiores al 25 % en varios casos. En contraste, la predicción fue menos precisa para aceites altamente insaturados y materiales con temperaturas cercanas a cero, evidenciando la influencia de características moleculares específicas no representadas completamente por las variables globales empleadas.

Finalmente, los resultados obtenidos muestran que las propiedades químicas seleccionadas constituyen una herramienta preliminar útil para el análisis y estimación del comportamiento térmico de PCM orgánicos. Asimismo, la base de datos consolidada y las correlaciones desarrolladas representan un aporte para futuras investigaciones orientadas al diseño y selección de nuevos materiales de cambio de fase.

7. Recomendaciones

Los modelos desarrollados a partir de IV, AV y MW constituyen una base adecuada para describir las propiedades térmicas estudiadas. Para materiales con baja temperatura de fusión o composiciones más complejas, estos modelos se pueden complementar incorporando variables relacionadas con la microestructura, como la distribución de triglicéridos, la cantidad y posición de las insaturaciones y la proporción de ácidos grasos específicos, con el objetivo de fortalecer la capacidad explicativa y mejorar el ajuste predictivo, especialmente en la estimación de la entalpía de fusión.

Dado que el índice de yodo influye en la temperatura de fusión y el índice de acidez en la estabilidad química de los PCM, sería interesante evaluar la durabilidad de la EPHT frente a ciclos repetidos de fusión–solidificación y durante almacenamiento prolongado, incorporando ensayos de oxidación y estabilidad térmica, con el fin de validar su desempeño a largo plazo como PCM.

La transesterificación de la EPH mostró mejoras significativas en el desempeño térmico del material, lo que confirma el potencial de las modificaciones químicas para ajustar propiedades como la temperatura y la entalpía de fusión. En investigaciones futuras se recomienda explorar procesos adicionales, tales como la hidrogenación parcial, la interesterificación o el diseño de mezclas de ésteres, con el fin de evaluar su contribución a la optimización y ampliación del rango de propiedades térmicas de los PCM.

Referencias Bibliográficas

- Agencia Internacional de la Energía. (2022). *Renewables 2022*. París. Obtenido de <https://www.iea.org/reports/renewables-2022>
- Agencia Valenciana de la Energía . (2008). *Guía práctica de energía solar térmica*. Valencia.
- Ahmad, U., Naqvi, S., Ali, I., Naqvi, M., Asif, S., Bokhari, A., . . . Klemeš, J. (2022). A review on properties, challenges and commercial aspects of eco-friendly biolubricants productions. *Chemosphere*, 309, 136622. doi:10.1016/j.chemosphere.2022.136622
- Alviso, D., Aguerre , H., Nigro, N., & Artana, G. (6 de Junio de 2023). Prediction of the physico-chemical properties of vegetable oils using optimal non-linear polynomials. *Fuel*, 350, 128868. doi:10.1016/j.fuel.2023.128868
- Amin, M., Putra, N., Kosasih, E., Prawiro, E., Luanto, R., & Mahlia, T. (2017). Thermal properties of beeswax/graphene phase change material as energy storage for building applications. *Applied Thermal Engineering*, 112, 273 - 280. doi:10.1016/j.applthermaleng.2016.10.085
- Ansu, A. K., Sharma, R. K., & Singh, P. (2021). Development and Testing of Binary Organic Eutectic Mixture for Thermal Energy Storage. *Lecture Notes in Mechanical Engineering*, 787 - 794. doi:10.1007/978-981-16-0159-0_69
- Aridi, R., & Yehya, A. (2022). Review on the sustainability of phase-change materials used in buildings. *Energy Conversion and Management: X*, 100237. doi:10.1016/j.ecmx.2022.100237
- Azuokwu, A., Igbafe, A., Yerima, Y., Akpobi, E., Ngubi, F., Azike, R., & Onoji, S. (2024). A Comparative Study of the Physicochemical Properties of Oils Extracted from Common

- Species of the Niger Delta Raphia Palm Fruits and *Elaeis guineensis*. *American Journal of Chemical Engineering*, 12(3), 34 - 51. doi:10.11648/j.ajche.20241203.11
- Boussaba, L., Lefebvre, G., Makhoulf, S., Grados, A., & Royon, L. (2021). Investigation and properties of a novel composite bio-PCM to reduce summer energy consumptions in buildings of hot and dry climates. *Solar Energy*, 214, 119 - 130. doi:10.1016/j.solener.2020.11.060
- Boussaba, L., Makhoulf, S., Foufa, A., Lefebvre, G., & Royon, L. (2019). Vegetable Fat: a low-cost bio-based phase change material for thermal energy storage in buildings. *Journal of Building Engineering*, 21, 222 - 229. doi:10.1016/j.job.2018.10.022
- Boyaci, I. H., Karabulut, I., & Turan, S. (2003). Slip melting point estimation of fat blends before and after interesterification based on their fatty acid compositions. *Journal of Food Lipids*, 10(3), 193 - 202. doi:10.1111/j.1745-4522.2003.tb00015.x
- Brykczynski, H., Seilert, J., & Flöter, E. (2025). Prediction of Melting Point Temperatures and Enthalpies of Fusion for Pure Wax Esters Using a Group Contribution Model. *Crystal Growth & Design*, 25(16), 6697 - 6709. doi:10.1021/acs.cgd.5c00684
- CAS 8006-44-8: *Cera de candelilla*. (2024). Obtenido de CymitQuimica: <https://cymitquimica.com/es/cas/8006-44-8/>
- Castellar Ortega, G., Angulo Mercado, E., & Cardozo Arrieta, B. (2014). Transesterification vegetable oils using heterogeneous catalysts. *Prospectiva*, 12(2), 90 - 104. doi:10.15665/rp.v12i2.293
- Chamli, D., Bootello, M., I., B., Jouhri, S., Boukhchina, S., & Martínez-Force, E. (2017). Chemical characterization and thermal properties of kernel oils from Tunisian peach and nectarine varieties of *Prunus persica*. *Grasas y Aceites*, 68(3), e211. doi:10.3989/gya.0111171

- Chaparro, L., Neira, L., Molina, D., Rivera-Barrera, D., Castañeda, M., López-Giraldo, L., & Escobar, P. (2023). Biowaxes from palm oil as promising candidates for cosmetic matrices and pharmaceuticals for human use. *Materials*, *16*(12). doi:10.3390/ma16124402
- Chetpattananondh, P., & Tongurai, C. (2008). Synthesis of high purity monoglycerides from crude glycerol and palm stearin. *DOAJ*, *30*(4), 515 - 521. Obtenido de <https://doaj.org/article/0e669328a4214556b505ce452a982a61>
- Chinome Chinome, A. G., & Sánchez Sepúlveda, M. A. (2022). *Evaluación del potencial de la estearina de palma hidrogenada para su uso como material de cambio de fase*. Tesis de pregrado, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga. Obtenido de <https://noesis.uis.edu.co/handle/20.500.14071/11550>
- da Cunha, S., & de Aguiar, J. (2020). Phase change materials and energy efficiency of buildings: A review of knowledge. *Journal of Energy Storage*, *27*, 101083. doi:10.1016/j.est.2019.101083
- De Clercq, N., Danthine, S., Nguyen, M., Gibon, V., & Dewettinck, K. (2011). Enzymatic Interesterification of Palm Oil and Fractions: Monitoring the Degree of Interesterification using Different Methods. *Journal of the American Oil Chemists Society*, *89*(2), 219 - 229. doi:10.1007/s11746-011-1905-x
- Derawi, D., Abdullah, B., Huri, H., Yusop, R., Salimon, J., Hairunisa, N., & Salih, N. (2014). Palm Olein as Renewable Raw Materials for Industrial and Pharmaceutical Products Applications: Chemical Characterization and Physicochemical Properties Studies. *Advances in Materials Science and Engineering*, 1 - 5. doi:10.1155/2014/134063
- Dias, T., Neto, P., Ansolin, M., Follegatti-Romero, L., Batista, E., & Meirelles, A. (2015). Liquid-liquid equilibrium for ternary systems containing ethylic biodiesel + anhydrous ethanol +

- refined vegetable oil (sunflower oil, canola oil and palm oil): experimental data and thermodynamic modeling. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 32(3), 699 - 706. doi:10.1590/0104-6632.20150323s00003447
- Dzindziora, A., Dzienniak, D., Rokita, T., Wojciechowski, J., Sułowski, M., Nurkusheva, S., & Bembenek, M. (2024). A Study of the Relationship between the Dynamic Viscosity and Thermodynamic Properties of Palm Oil, Hydrogenated Palm Oil, Paraffin, and Their Mixtures Enhanced with Copper and Iron Fines. *Materials*, 17(7), 1538. doi:10.3390/ma17071538
- Esipovich, A., Kanakov, E., Charykova, T., Otopkova, K., Smirnov, M., Mityukova, Y., & Belousov, A. (2024). A Comprehensive Study on Physicochemical Properties of Fatty Acid Esters Derived from Different Vegetable Oils and Alcohols and Their Potential Application. *Energies*, 17(24), 6407. doi:10.3390/en17246407
- Faraj, K., Khaled, M., Faraj, J., Hachem, F., & Castelain, C. (2021). Experimental Study on the Use of Enhanced Coconut Oil and Paraffin Wax Phase Change Material in Active Heating Using Advanced Modular Prototype. *Journal of Energy Storage*, 41, 102815. doi:10.1016/j.est.2021.102815
- Fasina, O., Craig-Schmidt, M., Colley, Z., & Hallman, H. (2007). Predicting melting characteristics of vegetable oils from fatty acid composition. *LWT*, 41(8), 1501 - 1505. doi:10.1016/j.lwt.2007.09.012
- González Díaz, A., García Núñez, J. A., Cortés B., I. L., Díaz O., J. S., & Dueñas S., J. (2022). Indicadores composicionales en la química de los ácidos grasos en el aceite de palma. ¿Qué tan relevante es el índice de yodo? *Palmas*, 23(2), 29 - 36. doi:10.56866/01212923.13711

- González Romero , J. A., & Sarmiento González , L. C. (2019). *Predicción matemática de la conductividad térmica y la capacidad calorífica en aceites vegetales*. Bogotá, DC: Universidad de la Salle. Obtenido de <https://ciencia.lasalle.edu.co/>
- Guzmán Castillo, M., Kafarov, V., Guzman, A., & Garzón, L. (2013). Influence of temperature during crude palm oil hydrotreating over NiMo/ γ -Al₂O₃. *Revista ION*, 26(1), 7 - 14.
- Hameed, G., Ghafoor, M. M., Yousaf, M. H., Imran, M., Zaman, M., Elkamel, A., . . . Olabi, A. (2022). Low temperature phase change materials for thermal energy storage: Current status and computational perspectives. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 50, 101808. doi:10.1016/j.seta.2021.101808
- Hassim, N., Kanagaratnam, S., Huey, S., & Ismail, N. (2022). Characteristics of sunflower wax, carnauba wax and beeswax in palm superolein blended oil. *Journal of Oil Palm Research*, 35(4), 694 - 712. doi:10.21894/jopr.2022.0055
- Hathal, M., Al-Jadir, T., Al-Sheikh, F., Edan, M., Haider, M., Rsool, R., . . . Al jubori, A. (2023). Thermal performance characterization of a thermal energy storage tank with various phase change materials. *International Journal of Thermofluids*, 18, 100322. doi:10.1016/j.ijft.2023.100322
- Holden, N., Wolfe, M., Ogejo, J., & Cummins, E. (2020). *Introduction to Biosystems Engineering*. doi:10.21061/introbiosystemsengineering
- Ichu, C., & Nwakanma, H. (2019). Comparative Study of the Physicochemical Characterization and Quality of Edible Vegetable Oils. *International Journal of Research in Informative Science Application & Techniques (IJRISAT)*, 3(2). doi:10.46828/ijrisat.v3i2.56
- ICONTEC. (2011). *Grasas y aceites vegetales y animales. Determinación del índice de acidez y de la acidez (NTC 218:2011)*. Instituto Colombiano de Normas Técnicas y Certificación.

- ICONTEC. (2019). *Grasas y aceites vegetales y animales. Determinación del índice de yodo (NTC 283:2019)*. Instituto Colombiano de Normas Técnicas y Certificación.
- Iuliano, M., Cirillo, C., Zarli, A., Ciambelli, P., & Sarno, M. (2023). Selective hydrogenation of vegetable oil over supported noble metal nanocatalyst. *Inorganic Chemistry Communications*, *160*, 111974. doi:10.1016/j.inoche.2023.111974
- Jadhav, H., Gogate, P., Waghmare, J., & Annapure, U. (2021). Intensified synthesis of palm olein designer lipids using sonication. *Ultrasonics Sonochemistry*, *73*, 105478. doi:10.1016/j.ultsonch.2021.105478
- Jahangirian, H., Haron, M., Yusof, N., Silong, S., Kassim, A., Rafiee-Moghaddam, R., . . . Gharayebi, Y. (2011). Enzymatic Synthesis of Fatty Hydroxamic Acid Derivatives Based on Palm Kernel Oil. *Molecules*, *16*(8), 6634 - 6644. doi:10.3390/molecules16086634
- Jain, A., & Yalkowsky, S. (2006). Estimation of Melting Points of Organic Compounds-II. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, *95*(12), 2562 - 2618. doi:10.1002/jps.20634
- Jeon, J., Park, J., Wi, S., Yang, S., Ok, Y., & Kim, S. (01 de Mayo de 2019). Latent heat storage biocomposites of phase change material-biochar as feasible eco-friendly building materials. *Environmental Research*, *172*, 637 - 648. doi:10.1016/j.envres.2019.01.058
- Joshi, J., Bhanderi, K., & Patel, J. (2023). A review on bio-lubricants from non-edible oils-recent advances, chemical modifications and applications. *Journal of the Indian Chemical Society*, *100*(1), 100849. doi:10.1016/j.jics.2022.100849
- Kalantari, F., Bahmaei, M., Ameri, M., & Shoaie, E. (24 de Junio de 2010). Effect of vegetable oil oxidation on the hydrogenation reaction process. *Grasas Y Aceites*, *61*(4), 361 - 368. doi:10.3989/gya.123209

- Kalombe, R., Sobhansarbandi, S., & Kevern, J. (1 de Marzo de 2023). Assessment of low-cost organic phase change materials for improving infrastructure thermal performance. *Construction and Building Materials*, 369, 130285. doi:10.1016/j.conbuildmat.2022.130285
- Kumar, N., Hirsche, J., LaClair, T., Gluesenkamp, K., & Graham, S. (2019). Review of stability and thermal conductivity enhancements for salt hydrates. *Journal of Energy Storage*, 24, 100794. doi:10.1016/j.est.2019.100794
- Lemak, A., Kelapa, M., Menggunakan, S., Nano, P., & Rossi, M. (2018). Separation of fatty acids from palm oil using organic solvent nanofiltration. *Malaysian Journal of Analytical Science*, 22(3). doi:10.17576/mjas-2018-2203-25
- Li, H., Liu, J., He, X., & Liu, S. (2022). Characteristic the volatiles compounds of fractionation beef tallow by gas chromatography-ion mobility spectrometry. *Food Science and Technology*, 42. doi:10.1590/fst.58922
- Liu, M., Zhang, X., Ji, J., & Yan, H. (2023). Review of research progress on corrosion and anti-corrosion of phase change materials in thermal energy storage systems. *Journal of Energy Storage*, 63, 107005. doi:10.1016/j.est.2023.107005
- Liu, Y., Zheng, J., Deng, Y., Wu, F., & Wang, H. (2021). *Effect of functional modification of porous medium on phase change behavior and heat storage characteristics of form-stable composite phase change materials: A critical review* (Vols. 44 - Parte B). *Journal of Energy Storage*. doi:10.1016/j.est.2021.103637
- Lizcano-González, V. A. (2025). *Desarrollo de un sistema sostenible de almacenamiento de energía solar térmica en condiciones de alta montaña empleando el cambio de fase de*

- materiales autóctonos*. Tesis de Doctorado, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga. Obtenido de <https://noesis.uis.edu.co/handle/20.500.14071/45787>
- Lozada Campo, A. M., & Salgado Carabali, V. (2022). *Transesterificación de subproductos de refinación de aceite de palma para la obtención de materiales de cambio de fase*. Bucaramanga, Colombia. Obtenido de <https://noesis.uis.edu.co/handle/20.500.14071/12096>
- Ma, G., Zhang, Y., Jing, Y., Jia, Y., & Sun, J. (2019). A novel low-temperature phase change material based on stearic acid and hexanamide eutectic mixture for thermal energy storage. *Chemical Physics Letters*, 714, 166 - 171. doi:10.1016/j.cplett.2018.11.003
- Meher, L. C., Vidyasagar, D., & Naik, s. (2004). Technical aspects of biodiesel production by transesterification—a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 10(3), 248 - 268. doi:10.1016/j.rser.2004.09.002
- Mehrizi, A. A., Karimi-Maleh, H., Naddafi, M., & Karimi, F. (2023). Application of bio-based phase change materials for effective heat management. *Journal of Energy Storage*, 61, 106859. doi:10.1016/j.est.2023.106859
- Montgomery, D., Peck, E., & Vining, G. (2021). *Introduction to Linear Regression Analysis*. John Wiley & Sons.
- Murillo-Méndez, C. J., Ramírez-Quintero, A. F., López-Giraldo, L. J., & Castañeda-Rodas, M. (2022). Planteamiento de un modelo matemático de características macroscópicas de bioceras producidas del aceite de palma con interés comercial. *Revista ION*, 35(2), 59 - 69. doi:10.18273/revion.v35n2-2022005
- Narváez Rincón, P. C. (2014). *Diseño conceptual de procesos químicos: metodología con aplicaciones en esterificación* (Primera ed.). Bogotá: Universidad Nacional de Colombia.

- National Institute of Standards and Technology (NIST)*. (s.f.). Obtenido de Castor oil: <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C8001794&Mask=4#Thermo-Phase>
- Navarro, L., De Gracia, Á., Castell, A., & Cabeza, L. (2016b). Experimental study of an active slab with PCM coupled to a solar air collector for heating purposes. *Energy and Buildings*, *128*, 12 - 21. doi:10.1016/j.enbuild.2016.06.069
- Navarro, L., De Gracia, Á., Colclough, S., Browne, M., McCormack, S., Griffiths, P., & Cabeza, L. F. (2016a). Thermal energy storage in Building Integrated Thermal Systems: A review. Part 1. Active Storage Systems. *Renewable Energy*, *86*, 526 - 547. doi:10.1016/j.renene.2015.11.040
- Nazari, M., Jebrane, M., & Terziev, N. (2021). Multicomponent bio-based fatty acids system as phase change material for low temperature energy storage. *Journal of Energy Storage*, *39*, 102645. doi:10.1016/j.est.2021.102645
- Nusantoro, B., Yanty, N., Van De Walle, D., Hidayat, C., Danthine, S., & Dewettinck, K. (8 de Enero de 2018). Calculation procedure for formulating lauric and palmitic fat blends based on the grouping of triacylglycerol melting points. *Grasas Y Aceites*, *68*(4), 221. doi:10.3989/gya.0553171
- Orozco Corredor, C. X. (2006). *Producción de ácidos grasos saturados a partir de la hidrogenación catalítica de ácido oleico*. Bogotá, DC: Universidad de los Andes.
- Orozco, M. F., Acurio, K., Vásquez-Aza, F., Martínez-Gómez, J., & Chico-Proano, A. (26 de Noviembre de 2021). Thermal storage of nitrate salts as Phase Change Materials (PCMs). *Materials*, *14*(23), 7223. doi:10.3390/ma14237223
- Ortega Alegria, D. R., & Flórez Marulanda, J. F. (2021). Performance of biodiesel production by means of Ultrasonic. *Inge CUC*, *17*(2), 51 - 64. doi:10.17981/ingecuc.17.2.2021.06

Pantzaris, T., & Jaaffar, A. (2002). Properties and Utilization of Palm Kernel Oil. 23(3), 46 - 58.

Obtenido de

<http://publicaciones.fedepalma.org/index.php/palmas/article/download/925/925>

Patel, V., Dumancas, G., Viswanath, L., Maples, R., & Subong, B. (2016). Castor Oil: Properties, Uses, and Optimization of Processing Parameters in Commercial Production. *Lipid Insights*, 9, 1 - 12. doi:10.4137/lpi.s40233

Patiño Becerra, M., & Ortega, G. S. (2011). *Predicción de las propiedades fisicoquímicas de los ácidos grasos constituyentes del aceite de palma y de higuera mediante la implementación de métodos predictivos y su programación en matlab*. Bucaramanga, Colombia: Universidad Industrial de Santander.

Patterson, H. (2011). Hydrogenation methods. En *Hydrogenation of fats and oils: Theory and Practice* (págs. 189 - 278). AOCS Press. doi:10.1016/b978-1-893997-93-6.50014-2

Pattnaik, S., Mathur, B., Desai, A., Patel, A., & Chowdhury, P. (2025). Biodiesel production from non-edible castor and sesame oils via homogeneous transesterification: comparative physico-chemical evaluation. *Chemical Papers*, 79(6), 3951 - 3961. doi:10.1007/s11696-025-04047-y

Putra, N., Rawi, S., Amin, M., Kusriani, E., Kosasih, E., & Mahlia, T. (1 de Febrero de 2019). Preparation of beeswax/multi-walled carbon nanotubes as novel shape-stable nanocomposite phase-change material for thermal energy storage. *Journal of Energy Storage*, 21, 32 - 39. doi:10.1016/j.est.2018.11.007

Rajagukguk, Y., Utcu, M., Islam, M., Muzolf-Panek, M., & Tomaszewska-Gras, J. (2022). Authenticity Assessment from Sesame Seeds to Oil and Sesame Products of Various Origin

- by Differential Scanning Calorimetry. *Molecules*, 27(21), 7496. doi:10.3390/molecules27217496
- Ramnanan-Singh, R. (2012). Formulation & Thermophysical Analysis of a Beeswax Microemulsion & The Experimental Calculation of its Heat Transfer Coefficient. Obtenido de https://academicworks.cuny.edu/cc_etds_theses/115/
- Ravotti, R., Fellmann, O., Lardon, N., Fischer, L., Stamatiou, A., & Worlitschek, J. (2018). Synthesis and investigation of thermal properties of highly pure carboxylic fatty esters to be used as PCM. *Applied Sciences*, 8(7), 1 - 18. doi:10.3390/app8071069
- Ravotti, R., Worlitschek, J., Pulham, C., & Stamatiou, A. (2020). Triglycerides as Novel Phase-Change Materials: A Review and Assessment of their thermal properties. *Molecules*, 25(23), 5572. doi:10.3390/molecules25235572
- Rizal, T., Amin, M., Widodo, S., Rachman, N., Amir, F., Pane, N., & Mahlia, T. (2021). Integration of phase change material in the design of Solar Concentrator-Based Water Heating System. *Entropy*, 24(1), 57. doi:10.3390/e24010057
- Rocha, J., Lopes, J., Mascarenhas, M., Arellano, D., Guerreiro, L., & Da Cunha, R. (2012). Thermal and rheological properties of organogels formed by sugarcane or candelilla wax in soybean oil. *Food Research International*, 318 - 323.
- Ros, E., López-Miranda, J., Picó, C., Rubio, M. Á., Babio, N., Bulló, M., . . . Salas-Salvadó, J. (1 de Agosto de 2015). Consenso sobre las grasas y aceites en la alimentación de la población española adulta: postura de la Federación Española de Sociedades de Alimentación, Nutrición y Dietética (FESNAD). *PubMed*, 32(2), 435 - 477. doi:10.3305/nh.2015.32.2.9202

- Saeed, R., Schlegel, J., Castano, C., Sawafta, R., & Kuturu, V. (2017). Preparation and thermal performance of methyl palmitate and lauric acid eutectic mixture as phase change material (PCM). *Journal of Energy Storage*, *13*, 418 - 424. doi:10.1016/j.est.2017.08.005
- Sarcinella, A., Cunha, S., Aguiar, I., Aguiar, J., & Frigione, M. (2025). Sustainable Organic Phase Change Materials for Sustainable Energy Efficiency Solutions. *Polymers*, *17*(10), 1343. doi:10.3390/polym17101343
- Seilert, J., Hoffmann, T., Rappolt, M., & Flöter, E. (2025). On the relevance of inhomogeneity in saturated fatty acid compositions for the crystallization kinetics of fat blends. *Soft Matter*, *21*, 4650 – 4665. doi:10.1039/d5sm00418g
- Shi, Z., Ji, J., Liu, X., Sun, J., & Zhang, Z. (2025). Castor oil-based polyurethane sealant for road crack repair: An experimental study of durability. *International Journal of Adhesion and Adhesives*, *114*, 104193. doi:10.1016/j.ijadhadh.2025.104193
- Spiazzi, B., Duarte, A., Zingano, C., Teixeira, P., Amazarray, C., Merello, E., . . . Colpani, V. (2023). Coconut oil: an overview of cardiometabolic effects and the public health burden of misinformation. *Archives of Endocrinology and Metabolism*, *67*(6), e000641. doi:10.20945/2359-3997000000641
- Sunflower Oil - Supplier & Distributor - Hanson Chemicals*. (s.f.). Obtenido de Hanson Chemicals: <https://hansonchemicals.com/products/sunflower-oil/>
- UNFCCC. (2022). *Las emisiones mundiales de CO2 repuntaron en 2021 hasta su nivel más alto de la historia*. Obtenido de <https://unfccc.int/es/news/las-emisiones-mundiales-de-co2-repuntaron-en-2021-hasta-su-nivel-mas-alto-de-la-historia>

- Vandana, L., & Ramadoss, R. (2023). Herbal myristic acid blended with expanded graphite for thermal regulation in construction materials. *Journal of Energy Storage*, 65, 107258. doi:10.1016/j.est.2023.107258
- Weiss, W., & Spörk-Dür, M. (2024). *Solar Heat World Wide*. IEA Solar Heating & Cooling Programme. doi:10.18777/ieashc-shww-2024-0001
- Wen, X., & Qiang, Y. (2004). A new group contribution method for estimating melting and boiling points of organic compounds. *Chemical Engineering Communications*, 191(1), 75 - 86. doi:10.1080/00986440390225378
- Wiatros-Motyka, M., Fulghum, N., & Jones, D. (2024). *Global Electricity Review 2024*. EMBER. Obtenido de <https://ember-energy.org/app/uploads/2024/05/Report-Global-Electricity-Review-2024.pdf>
- Willnecker, A., & Pramparo, M. (2008). Study on jojoba oil hydrogenation. *Grasas Y Aceites*, 60(1). doi:10.3989/gya.032708
- Wonorahardjo, S., Sutjahja, I. M., Kurnia, D., Fahmi, Z., & Putri, W. A. (2018). Potential of Thermal Energy Storage Using Coconut Oil for Air Temperature Control. *Buildings*, 8(8), 95. doi:10.3390/buildings8080095
- Wu, M., Liu, C., & Rao, Z. (2023). Preparation and performance of lauric acid phase change material with the double-layer structure for solar energy storage. *Journal of Energy Storage*, 65, 107385. doi:10.1016/j.est.2023.107385
- Xia, M., Yuan, Y., Zhao, X., Cao, X., & Tang, Z. (2016). Cold storage condensation heat recovery system with a novel composite phase change material. *Applied Energy*, 175, 259 - 268. Obtenido de <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.05.001>

- Xie, N., Huang, Z., Luo, Z., Gao, X., Fang, Y., & Zhang, Z. (2017). Inorganic Salt Hydrate for Thermal Energy Storage. *Applied Sciences*, 7(12), 13 - 17. doi:10.3390/app7121317
- Yang, J., & Wang, X. (2025). Preparation and thermal properties of organic phase change energy storage materials. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 56(3). doi:10.1016/j.cjac.2025.100491
- Yao, L., Lio, J., Wang, T., & Jarboe, D. (16 de Abril de 2013). Synthesis and characterization of acetylated and stearylized soy wax. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 1063 - 1071. doi:10.1007/s11746-013-2239-7
- Yılmaz, B., & Ağagündüz, D. (2021). Fractionated palm oils: emerging roles in the food industry and possible cardiovascular effects. *Critical Reviews in Food Science*, 62(7), 1990 - 1998. doi:10.1080/10408398.2020.1869694
- Yuan, Y., Zhang, N., Tao, W., Cao, X., & He, Y. (2013). Fatty acids as phase change materials: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 29, 482 - 498. doi:10.1016/j.rser.2013.08.107
- Yusuf, A., 'Ulhaq, S. D., Soehanie, A., Wonorahardjo, S., & Sutjahja, I. M. (2025). Determining the phase change characteristics of lauric acid to realise its optimum performance in latent thermal energy storage. *Journal of King Saud University - Engineering Sciences*, 37(3). doi:10.1007/s44444-025-00004-y
- Zeberg-Mikkelsen, C., & Stenby, E. (1999). Predicting the melting points and the enthalpies of fusion of saturated triglycerides by a group contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 162(1-2), 7 - 17. doi:10.1016/s0378-3812(99)00171-5
- Zhao, Y., Zhao, C., Markides, C., Wang, H., & Li, W. (2020). Medium- and high-temperature latent and thermochemical heat storage using metals and metallic compounds as heat

storage media: A technical review. *Applied Energy*, 280, 115950.

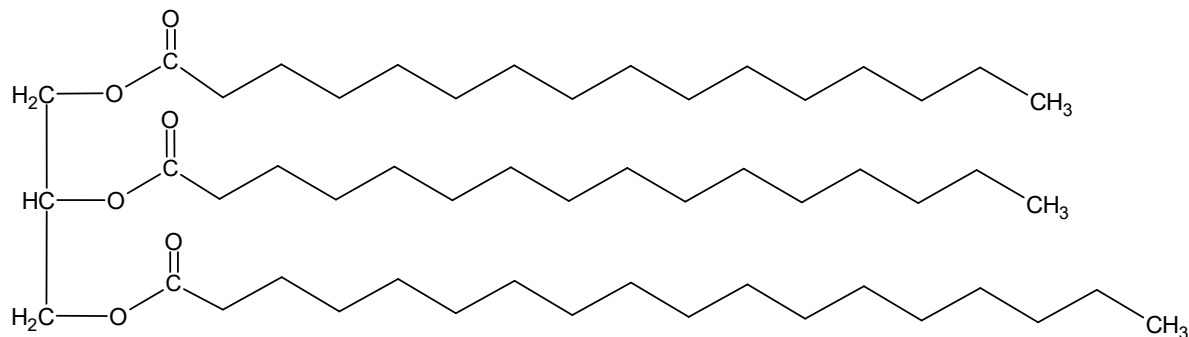
doi:10.1016/j.apenergy.2020.115950

Apéndices

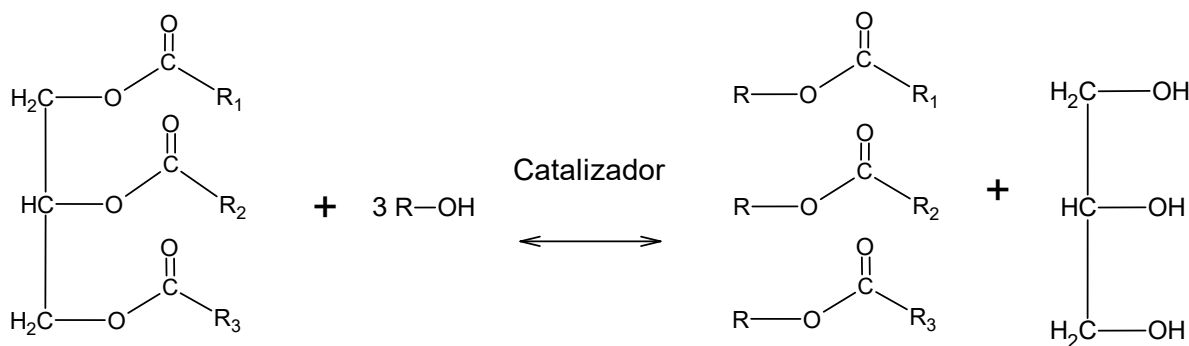
Apéndice A. Esquema general de la reacción de transesterificación.

La transesterificación es un proceso en el que los triglicéridos, mezclas de ácidos grasos presentes en aceites vegetales, reaccionan con un alcohol en presencia de un catalizador ácido o básico. Este mecanismo da lugar a la formación de ésteres alquílicos y produce glicerina como subproducto (Ortega Alegria & Flórez Marulanda, 2021).

En este trabajo se empleó estearina de palma hidrogenada (EPH) como fuente de triglicéridos. Debido al proceso de hidrogenación, la EPH contiene una elevada proporción de ácidos grasos saturados, principalmente ácido palmítico ($C_{16:0}$) y ácido esteárico ($C_{18:0}$) (Boyaci et al., 2003). Para representar la reacción, se asumió un triglicérido predominante formado por dos cadenas carbonadas derivadas del ácido palmítico y una cadena derivada del ácido esteárico, cuya fórmula estructural se muestra en la Figura A1. El alcohol utilizado en la reacción fue alcohol cetílico, empleándose KOH como catalizador básico. El esquema general de la transesterificación, ilustrando el triglicérido modelo, el alcohol cetílico y los productos obtenidos, se presenta en la Figura A2.

Figura A1. *Fórmula estructural del triglicérido representativo de la EPH.*

Nota. En la estructura mostrada, las dos primeras cadenas carbonadas corresponden al ácido palmítico (C_{16:0}), mientras que la tercera corresponde al ácido esteárico (C_{18:0}). Esta representación se utiliza como triglicérido modelo, ya que en la EPH la proporción de ácidos grasos puede variar entre moléculas individuales. Para una muestra típica de EPH se reportan valores aproximados de 55,23 % de C_{16:0} y 40,24 % de C_{18:0} (Boyaci et al., 2003).

Figura A2. *Esquema general de la reacción de transesterificación.*

Nota. R₁, R₂ y R₃ indican las cadenas acilo presentes en el triglicérido representativo mostrado en la Figura A1, mientras que R corresponde a la cadena del alcohol cetílico utilizado como reactivo.

Apéndice B. Fuentes bibliográficas de la base de datos.

En este apéndice se presentan las fuentes bibliográficas utilizadas para la recopilación de las propiedades químicas y térmicas de los materiales orgánicos empleados en el desarrollo de los modelos matemáticos predictivos. La información consolidada corresponde a datos obtenidos de literatura especializada y de los resultados experimentales desarrollados en el presente estudio.

Tabla B1.

Fuentes bibliográficas asociadas a las propiedades químicas y térmicas empleadas en la construcción de la base de datos.

Material	Propiedad	Referencia
Aceite de algodón	IV, AV, MW, Tm y ΔH_m	(Patterson, 2011)
Aceite de canola	IV, AV	(Iuliano et al., 2023)
	MW	(Dias et al., 2015)
	Tm, ΔH_m	(Fasina et al., 2007)
Aceite de coco	IV, AV	(Ichu & Nwakanma, 2019)
	MW	(Spiazzi et al., 2023)
	Tm, ΔH_m	(Faraj et al., 2021)
Aceite de girasol	IV, AV	(Patterson, 2011)
	MW	(Dias et al., 2015)
	Tm, ΔH_m	(Fasina et al., 2007)
Aceite de girasol alto oleico	IV, AV	(Nusantoro et al., 2018)
	MW	(Sunflower Oil - Supplier & Distributor - Hanson Chemicals, s.f.)
	Tm, ΔH_m	(Chamli et al., 2017)
Aceite de oliva	IV	(Patterson, 2011)

	AV	(Ichu & Nwakanma, 2019)
	MW	(Patterson, 2011)
	Tm, ΔH_m	(Fasina et al., 2007)
	IV, AV	(Azuokwu et al., 2024)
Aceite de palma	MW	(Lemak et al., 2018)
	Tm, ΔH_m	(Dzindziora et al., 2024)
	IV	(Patterson, 2011)
	AV	(Nusantoro et al., 2018)
Aceite de palmiste	MW	(Jahangirian et al., 2011)
	Tm, ΔH_m	(Boussaba et al., 2019)
	IV, AV	(Esipovich et al., 2024)
	MW	(Shi et al., 2025)
Aceite de ricino	Tm	(Patel et al., 2016)
	ΔH_m	(NIST, s.f.)
	IV, AV	(Ichu & Nwakanma, 2019)
Aceite de sésamo	MW, Tm, ΔH_m	(Rajagukguk et al., 2022)
	IV	(Nusantoro et al., 2018)
	AV	(Castellar Ortega et al., 2014)
	MW	(Holden et al., 2020)
	Tm, ΔH_m	(Kalombe et al., 2023)
Cera de abejas	IV, AV, MW, Tm y ΔH_m	(Rizal et al., 2021)
	IV, AV	(Rocha et al., 2012)
Cera de candelilla	MW	(CAS 8006-44-8: Cera de candelilla, 2024)
	Tm, ΔH_m	(Rocha et al., 2012)
Cera de caña de azúcar	IV, AV, MW, Tm y ΔH_m	(Rocha et al., 2012)
	IV, AV	(Guzmán Castillo et al., 2013)
Cera de carnauba	MW	(Hassim et al., 2022)

	T _m , ΔH _m	(Xia et al., 2016)
EPH/EPHT-10	Datos experimentales	Presente estudio
EPH/EPHT-2	Datos experimentales	Presente estudio
EPH/EPHT-4	Datos experimentales	Presente estudio
EPH/EPHT-6	Datos experimentales	Presente estudio
EPH/EPHT-8	Datos experimentales	Presente estudio
Esterina de palma	Datos experimentales	Presente estudio
	MW	(Chetpattananondh & Tongurai, 2008)
	T _m , ΔH _m	(Chinome Chinome & Sánchez Sepúlveda, 2022)
Esterina de palma hidrogenada	Datos experimentales	Presente estudio
	MW	(Boyaci et al., 2003)
	Datos experimentales	Presente estudio
Esterina de palma hidrogenada transesterificada	Datos experimentales	Presente estudio
Oleína de palma	IV, AV	(Derawi et al., 2014)
	MW	(Jadhav et al., 2021)
	T _m , ΔH _m	(De Clercq et al., 2011)
Sebo bovino	IV	(Patterson, 2011)
	AV	(Li et al., 2022)
	MW, T _m y ΔH _m	(Patterson, 2011)

Nota. IV: índice de yodo (g I₂/100 g muestra); AV: índice de acidez (mg KOH/g muestra); MW: peso molecular promedio (g/mol); T_m: temperatura de fusión (°C); ΔH_m: entalpía de fusión (J/g).

Apéndice C. Ajuste de los modelos matemáticos en Microsoft Excel

El desarrollo de las correlaciones matemáticas se realizó mediante herramientas de regresión lineal múltiple empleadas en Microsoft Excel 365, utilizando la base de datos consolidada de propiedades químicas y térmicas de los materiales orgánicos evaluados.

Inicialmente, la información experimental y bibliográfica se organizó en una hoja de cálculo, donde cada fila correspondió a un material y las columnas representaron las variables predictivas y de respuesta. Como variables independientes se emplearon el índice de yodo (IV), el índice de acidez (AV) y el peso molecular promedio (MW), mientras que como variables dependientes se utilizaron la temperatura de fusión (T_m) y la entalpía de fusión (ΔH_m).

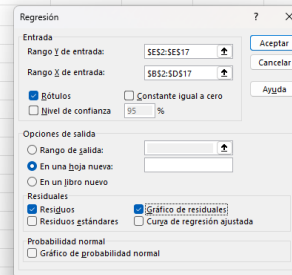
El ajuste de las correlaciones se realizó utilizando la herramienta “Análisis de datos” → “Regresión” disponible en Microsoft Excel 365. Para cada modelo, se definió como variable de respuesta (rango Y) la propiedad térmica a estimar (T_m o ΔH_m), mientras que las variables predictivas IV, AV y MW fueron empleadas como variables independientes (rango X).

La Figura C1 presenta un ejemplo del procedimiento de regresión lineal múltiple empleado en Microsoft Excel para la obtención de las correlaciones matemáticas desarrolladas en este estudio.

Figura C1.

Ejemplo del análisis de regresión empleado para el desarrollo de los modelos predictivos.

Muestra	Parámetro fisicoquímico			
	IV, g I ₂ /100 g	AV, mg KOH/ g	MW, g/mol	Tf, °C
Aceite de algodón	108	0,35	863,0	36,00
Aceite de palma	55	4,8	847,78	36,00
Cera de abejas	10,5	19,5	282,40	62,28
Cera de candelilla	24,5	17	436,84	73,00
Cera de caña de azúcar	20	18,2	1122,7	78,80
Cera de carauaba	10,5	19,5	865,5	84,00
EPH/EPHT-10	5,45	4,63	864,2	56,22
EPH/EPHT-2	5,8	1,58	1385,6	49,38
EPH/EPHT-4	5,95	2,52	1204,0	43,51
EPH/EPHT-6	5,74	3,34	1064,5	44,26
EPH/EPHT-8	5,6	4,18	953,9	44,33
Estearina de palma	40,01	0,55	834	52,35
Estearina de palma hidrogenada	4,81	5,59	834	57,64
Estearina de palma hidrogenada transesterificada	0,9	5,97	1498,7	49,71
Sebo bovino	45,5	4,43	850,92	44,00



A partir de este procedimiento, el programa generó automáticamente los coeficientes de regresión, el coeficiente de determinación (R^2) y los parámetros estadísticos asociados al ajuste. Las ecuaciones finales se construyeron utilizando los coeficientes obtenidos para cada variable independiente. Este mismo procedimiento fue aplicado para el desarrollo de las cuatro correlaciones matemáticas propuestas, correspondientes a los modelos de temperatura y entalpía de fusión en los diferentes rangos de temperatura evaluados.

Apéndice D. Curvas DSC generadas mediante TRIOS para EPH, EPHT y sus mezclas eutécticas.

