

Imágenes hiperespectrales en la predicción de las variables fisicoquímicas y mecánicas de jabón a base de aceite residual de uso doméstico

Hyperspectral imaging in the prediction of the physicochemical and mechanical variables of soap based on waste oil from domestic use

Joe Jara-Vélez^{1,2*}; Jhastin Florián-Huamán¹; David A. Callirgos-Romero³

1 Escuela de Ingeniería Agroindustrial, Facultad de Ciencias Agropecuarias, Universidad Nacional de Trujillo, Av. Juan Pablo II s/n, Trujillo, Perú.

2 Escuela de Ingeniería Industrial, Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Universidad César Vallejo, Carretera Panamericana Norte km 695, Chepén 13870, Perú.

3 Universidade Federal de Pelotas (UFPel) - Departamento de Ciência e Tecnologia de Alimentos, Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, Av. Eliseu Maciel, s/n, Capão do Leão, Pelotas, RS 96160-000, Brasil.

* Autor correspondiente: jjarave01@ucvvirtual.edu.pe (Joe. Jara-Vélez).

ORCID de los autores:

J. Jara-Vélez: <https://orcid.org/0000-0003-4994-6297>

J. Florián-Huamán: <https://orcid.org/0000-0002-2039-9181>

D. A. Callirgos-Romero: <https://orcid.org/0009-0004-7428-4154>

RESUMEN

El objetivo del presente estudio fue predecir mediante imágenes hiperespectrales las variables fisicoquímicas y mecánicas de jabones elaborados a partir del aceite residual. Se aplicó un diseño experimental Delineamiento Compuesto Central Rotacional a las variables independientes tiempo de calentamiento, relación solución NaCl/aceite y agitación durante el tiempo de saponificación y teniendo como variable dependiente el pH, dureza, adhesividad y elasticidad. Paralelamente se utilizó la tecnología de imágenes hiperespectrales en modo de reflectancia (896 - 1704 nm) sobre cada tratamiento. Los datos espectrales se correlacionaron con los datos experimentales utilizando modelos PLSR, PCR y MLR. Los modelos MLR presentaron mejor nivel predictivo (R^2 de 99,9%, 95,2%, 82,9% y 84,6%, respectivamente para cada variable dependiente). Del procedimiento de optimización, se encontró que, con 5,9495 min de agitación, 0,75 de relación solución NaCl/aceite y 718,182 rpm de agitación durante el proceso de saponificación, se tiene un jabón parecido al comercial.

Palabras clave: imágenes hiperespectrales; espectroscopía; modelación; regresión lineal múltiple; optimización.

ABSTRACT

The objective of this study was to predict the physicochemical and mechanical properties of soaps produced from waste cooking oil using hyperspectral imaging. A Central Composite Rotational Design (CCRD) was applied to the independent variables: heating time, NaCl solution-to-oil ratio, and stirring during the saponification process. The dependent variables were pH, hardness, adhesiveness, and elasticity. Hyperspectral imaging technology in reflectance mode (896 - 1704 nm) was applied to each experimental treatment. Spectral data were correlated with experimental measurements using PLSR, PCR, and MLR models. Among these, the MLR models showed the highest predictive performance, with R^2 values of 99.9%, 95.2%, 82.9%, and 84.6% for each respective dependent variable. Optimization results indicated that a soap comparable to commercial products could be obtained using 5.9495 minutes of heating, a 0.75 NaCl solution-to-oil ratio, and stirring at 718.182 rpm during saponification.

Keywords: hyperspectral imaging; spectroscopy; modeling; multiple linear regression; optimization.

Recibido: 28-10-2025.

Aceptado: 11-11-2025.



Esta obra está publicada bajo la licencia [CC BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

INTRODUCCIÓN

Los atributos externos de una muestra, como el tamaño, la forma, el color y la textura superficial, pueden evaluarse con relativa facilidad mediante técnicas convencionales de análisis de imágenes. No obstante, la predicción de parámetros internos, como el contenido de humedad, grasa o proteína, resulta considerablemente más compleja, debido a la limitada penetración óptica de estas metodologías. En este contexto, la tecnología de imágenes hiperespectrales (HSI, Hyperspectral Imaging) ha emergido como una técnica no destructiva que combina información espacial y espectral, permitiendo inferir la composición química de los materiales sin contacto físico ni necesidad de preparación de muestra (Patel et al., 2024).

El principio de funcionamiento de la HSI se basa en la adquisición de un hipercubo de datos, en el cual cada píxel contiene un espectro completo de reflectancia o absorbancia, considerado su "firma espectral". Esta firma representa la interacción de la radiación electromagnética con los enlaces moleculares de la muestra (principalmente O-H, C-H y N-H), los cuales presentan bandas de absorción características según su estructura química (Zuo et al., 2025). La combinación entre espectroscopía e imagen permite obtener simultáneamente características físicas (forma, tamaño, apariencia, color) y químicas (composición molecular) de la muestra, lo que hace que una sola longitud de onda resulte insuficiente para describir adecuadamente alimentos u otros productos complejos (Medina-García et al., 2025).

En años recientes, la integración de la HSI con métodos quimiométricos y algoritmos de aprendizaje automático ha ampliado significativamente su aplicabilidad. Técnicas como la regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR), regresión lineal múltiple (MLR) y regresión por componentes principales (PCR) permiten modelar la relación entre los espectros y las variables fisicoquímicas de interés, mejorando la predicción cuantitativa de propiedades internas (Haughey et al., 2023). Asimismo, algoritmos de deep learning aplicados al procesamiento de HSI, como redes neuronales convolucionales y autoencoders, han demostrado un alto rendimiento en la detección de defectos, clasificación de calidad y cuantificación de compuestos en sistemas alimentarios complejos (Pesce, 2024).

En el ámbito alimentario, la tecnología hiperespectral se ha utilizado en diversas configuraciones ópticas, destacando el enfoque push-broom (barrido en línea) por su alta resolución espectral y velocidad de adquisición (Lee et al., 2025). Este enfoque ha permitido registrar firmas espectrales en rangos visibles e infrarrojos (400 – 1700 nm), donde la información relacionada con agua, grasa y proteínas puede correlacionarse con datos de laboratorio. Por ejemplo, en productos con alto contenido lipídico, se han reportado predicciones de ácidos grasos libres en el rango de 390–1000 nm con coeficientes de determinación superiores a 0,90 (Gama et al., 2024). De igual manera, la adulteración de aceites comestibles, como la mezcla de aceite de coco con palmiste, ha sido

detectada mediante modelos PLSR contruidos con bandas espectrales entre 864 y 1696 nm (Jermwongrutthanachai et al., 2024).

Los avances recientes evidencian que la integración de HSI con quimiometría constituye una herramienta robusta para la predicción de parámetros fisicoquímicos y la optimización de procesos industriales. Marín-Méndez et al. (2024) demostraron que la combinación de HSI con análisis multivariado permite predecir con alta precisión valores nutricionales y energéticos en alimentos procesados. Por su parte, Lee et al. (2025) revisaron su aplicabilidad en la evaluación de calidad mediante espectros del infrarrojo de onda corta (SWIR), mientras que Medina-García et al. (2025) destacaron la importancia de seleccionar bandas relevantes para mejorar la interpretabilidad y reducir la dimensionalidad de los modelos.

En productos grasos y matrices saponificables, la aplicación de HSI se ha extendido hacia la caracterización de aceites, grasas y sus derivados. Jara-Vélez et al. (2025) propusieron recientemente un enfoque de optimización analítica para la producción de jabones ecológicos a partir de aceites residuales, integrando espectroscopía hiperespectral (896 – 1704 nm) y modelado quimiométrico mediante PLSR y MLR. Este estudio logró predecir variables como pH, dureza, adhesividad y resiliencia con coeficientes de determinación superiores al 0,95, demostrando la viabilidad de la HSI como técnica complementaria para el control de calidad y la evaluación no destructiva de jabones artesanales.

Desde el punto de vista químico, la saponificación continúa siendo la base de la fabricación de jabones. Se trata de una reacción de hidrólisis alcalina en la que triglicéridos reaccionan con una base fuerte (hidróxido de sodio o potasio), produciendo sales de ácidos grasos (jabones) y glicerina (Sarkar et al., 2021). Las propiedades del jabón final, dureza, solubilidad, formación de espuma y pH, dependen del tipo de materia grasa utilizada, el perfil de ácidos grasos y el agente alcalino empleado. Jabones duros suelen derivarse de grasas saturadas (como sebo o aceite de coco) y NaOH, mientras que jabones blandos o líquidos se elaboran a partir de aceites insaturados (como linaza, algodón o pescado) y KOH (Ali et al., 2023). Estudios recientes evaluaron formulaciones con distintas proporciones de sebo bovino y fracciones de palma (estearina/palmiste), midiendo características como dureza, formación de espuma y solubilidad. Se observó que el aumento en la fracción saturada incrementa la dureza y reduce la solubilidad, además de modificar los tiempos de saponificación y el rendimiento del producto final según la composición grasa (Uduma et al., 2025). Aunque los fundamentos de la fabricación de jabones están bien establecidos, la incorporación de imágenes hiperespectrales junto con quimiometría ofrece un enfoque innovador y sostenible para caracterizar jabones elaborados a partir de aceites residuales. Esta integración tecnológica permite predecir de forma rápida y no destructiva variables

de calidad como pH, dureza y textura, y representa una alternativa viable para optimizar procesos de producción con base científica y aplicabilidad industrial.

En el marco de la Agenda 2030, la gestión integral de residuos promueve la prevención, reducción, reutilización y reciclaje de materiales (meta ODS 12.5), avanzando hacia una economía circular y servicios municipales inclusivos (United Nations, 2025; UN-Habitat, 2020). Pero, grandes cantidades de aceite residual provenientes de la industria gastronómica y doméstica son vertidas a alcantarillado, provocando serios problemas de contaminación ambiental. Además, estos residuos a menudo son reutilizados, alterando su composición y generando compuestos tóxicos y potencialmente cancerígenos. Cuando se desechan en cuerpos de agua, los aceites forman películas superficiales que impiden el intercambio gaseoso, afectando la flora y fauna acuática y alterando el equilibrio ecológico. La diversidad de productos generados por oxidación, hidrólisis o degradación térmica en aceites usados es amplia, y muchos son difíciles de detectar con técnicas analíticas convencionales. Sin embargo, en años recientes se han desarrollado métodos rápidos de caracterización (Tawo & Mbamalu, 2025). El residuo oleoso resultante de procesos de fritura es frecuentemente vertido en cañerías, obstruyéndolas y generando altos impactos ambientales y costos económicos. No obstante, estos residuos pueden aprovecharse como materia prima para la fabricación de jabones. La producción de jabones a partir de aceites usados representa una alternativa de alto valor para su replicación en contextos educativos o comunitarios, al promover el reciclaje ecológico, fortalecer la economía doméstica y reducir el impacto ambiental. Asimismo, contribuye a la salud pública mediante el uso de productos más seguros y sostenibles (Tawo et al., 2025). El uso extendido de aceites comestibles en fritura, sumado a su alto costo y complejidad de disposición, impulsa su

reutilización, lo que implica riesgos tanto ambientales como sanitarios.

Desde la perspectiva ambiental, los residuos grasos obstruyen drenajes, contaminan aguas superficiales y subterráneas, alteran ecosistemas, aumentan el riesgo de incendios y disminuyen la fertilidad del suelo (Cheng, 2021). En términos de salud, la reutilización repetida de aceites favorece la formación de compuestos tóxicos como aldehídos α,β -insaturados, furanos, acrolina y compuestos poliaromáticos, con efectos mutagénicos, carcinogénicos y neurotóxicos demostrados (Abrante-Pascual et al., 2024). En consecuencia, la problemática del aceite usado articula un desafío ambiental y sanitario, pero también una oportunidad técnica para convertir este residuo en un insumo valioso mediante su transformación en jabones ecológicos con valor social y ambiental.

Los aceites no se disuelven en agua, formando películas impermeables que impiden el paso del oxígeno y afectan la vida tanto acuática como terrestre. Al ser vertidos en suelos, destruyen el humus y reducen la fertilidad, contaminando aguas subterráneas y superficiales que a menudo se destinan al consumo humano. Este trabajo busca contribuir con una alternativa de solución, mediante el aprovechamiento del aceite residual para la producción de jabón. Se propone además una metodología innovadora para su elaboración, reduciendo los costos asociados a la remediación ambiental y ofreciendo un producto económico y de calidad. Finalmente, se plantea la aplicación de imágenes hiperespectrales como una herramienta con gran capacidad informativa para analizar muestras de forma rápida, no destructiva y de bajo costo, en sustitución de métodos tradicionales o instrumentales.

El objetivo del presente estudio fue predecir, mediante imágenes hiperespectrales, variables fisicoquímicas y mecánicas (pH, humedad y propiedades texturales) de jabones elaborados a partir de aceite residual.

METODOLOGÍA

Recolección y preparación del aceite residual

El aceite residual fue recolectado de establecimientos gastronómicos de Guadalupe, La Libertad, Perú. Las muestras fueron mezcladas y homogeneizadas sin discriminar origen ni marca comercial. Posteriormente, se sometieron a decantación para eliminar partículas en suspensión de mayor tamaño, lo cual permitió la sedimentación progresiva durante un periodo aproximado de una semana. Este procedimiento no demandó una labor intensiva ni tiempos prolongados. El aceite residual así obtenido fue sometido a análisis fisicoquímicos (Tabla MS1, Material Suplementario) con el fin de caracterizar sus propiedades básicas antes de ser empleado en la elaboración de jabón.

Diseño experimental de contrastación

Se aplicó un Delineamiento Compuesto Central Rotacional (DCCR) con tres variables independientes, bajo un diseño que incluyó: 8 puntos factoriales (2^3), 6 puntos axiales (2×3) y 3 réplicas

en el punto central, totalizando 17 tratamientos, generados mediante el software Minitab® 19. En la Tabla 1 se presenta la matriz de valores correspondientes a las variables independientes utilizadas para la elaboración de los jabones. Para cada tratamiento, se produjeron seis muestras de jabón con forma cilíndrica, de 2 cm de radio y 1 cm de espesor, las cuales fueron empleadas en las mediciones mediante imágenes hiperespectrales (HSI).

Proceso para la obtención de jabón

La elaboración del jabón se desarrolló en base al diseño mostrado en la Tabla 1. Se preparó una solución de NaOH en agua destilada, con concentraciones entre 14 y 22 g de NaOH por cada 100 mL de aceite, enfriándola a temperatura ambiente para su uso seguro. La mezcla con el aceite se realizó en vasos de precipitados de 400 mL, empleando 100 mL de aceite por tratamiento, previamente calentado a la temperatura correspondiente según el diseño experimental.

Tabla 1

Valores codificados y reales utilizados en el DCCR para la elaboración de jabones

Variables	Niveles				
	-1,68	-1	0	1	1,68
Tiempo	3	3,81	5	6,19	7
NaCl/aceite	0,25	0,35	0,5	0,65	0,75
Agitación	400	501,35	650	798,65	900

La saponificación se inició con la adición controlada de la solución alcalina al aceite residual, bajo agitación continua mediante un agitador magnético con sistema de calentamiento. El tiempo de proceso fue monitoreado a partir del momento de contacto entre ambas fases, manteniéndose la agitación y temperatura establecidas para cada tratamiento. Esta etapa condujo a la formación del jabón a través de la reacción de hidrólisis alcalina de los triglicéridos presentes.

Dos minutos antes de finalizar el tiempo de saponificación, se incorporó una solución de cloruro de sodio (NaCl), formulada en concentraciones entre 2,5 y 12,5 g por cada 50 mL de agua, de acuerdo con los valores definidos en el diseño. Este paso permitió favorecer la separación del jabón respecto a la glicerina y al exceso de NaOH, aprovechando la insolubilidad del jabón en soluciones salinas y su menor densidad, que facilitó su flotación. Luego de varias horas de reposo, se retiró por la parte inferior la mezcla salina con glicerina. El jabón recuperado fue vertido en moldes cilíndricos individuales y dejado en reposo durante 4 días a temperatura ambiente para permitir su solidificación. Posteriormente, las muestras fueron almacenadas en condiciones controladas durante 21 días, tras los cuales se realizaron los análisis de textura, rendimiento, pH (Tabla MS2, Material Suplementario) y adquisición de imágenes hiperespectrales, conforme al protocolo experimental.

Adquisición y procesamiento de imágenes hiperespectrales

Se utilizó un sistema de adquisición de imágenes hiperespectrales en modo de reflectancia con configuración en línea (pushbroom), operando en el rango de 896 – 1704 nm. El sistema incluyó una cámara hiperespectral con tecnología Camera Link (CL, Technology, USA), lentes de apertura f/2.4 (Hyperspec, alta eficiencia), un sistema de

iluminación QTH ajustable (Model 21DC, Headwall Inc., USA) con ángulo de incidencia de 45°, una plataforma móvil automatizada (DMX-J-SA-17, Arcus Technology Inc., USA), y un procesador Intel Core i7 (Lenovo Inc., USA) con el software Hyperspec III. Este software permitió configurar parámetros como número de líneas, velocidad de escaneo, tiempo de captura, rango espectral e intensidad de iluminación. La configuración del sistema se muestra en la Figura 1.

Previo a la adquisición, se realizó la calibración automática del equipo mediante referencia blanca (Spectralon) y negra (cámara cubierta), según protocolo del software Hyperspec III. Las imágenes se capturaron en modo reflectancia con configuración pushbroom en el rango de 896–1704 nm, con resolución espectral de 4,743 nm, velocidad de escaneo de 5 mm/s y una distancia fija de 27,5 cm entre lente y muestra.

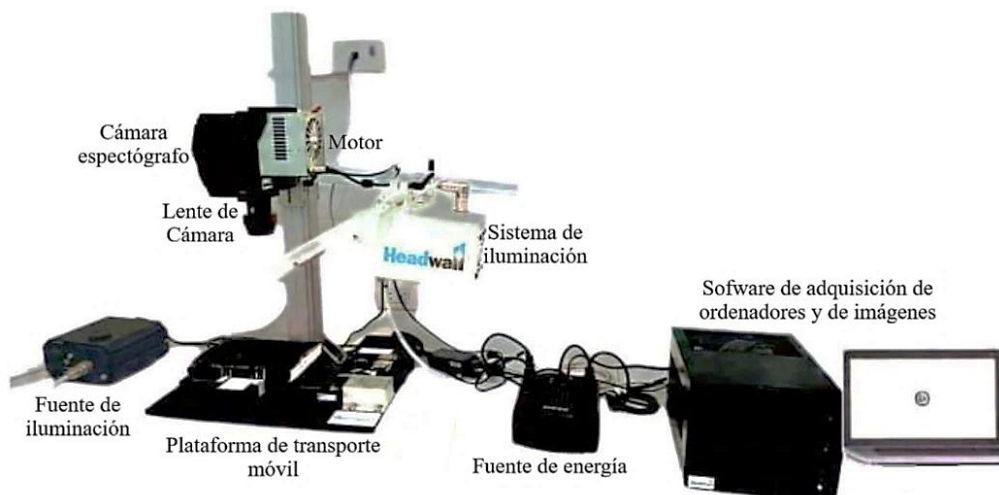
Las muestras se colocaron sobre la plataforma móvil y fueron transportadas al campo de visión de la cámara para adquirir imágenes con información espectral y espacial. El sistema fue controlado por el software de adquisición, y los datos se almacenaron para su posterior análisis.

La corrección radiométrica de las imágenes se realizó utilizando referencias oscuras (B) y blancas (W), aplicando la ecuación:

$$I = (I_0 - B)/(W - B) * 100 \quad (1)$$

donde I es la imagen corregida, I_0 la imagen cruda, y B y W las imágenes de referencia oscura y blanca, respectivamente (Shaikh et al., 2021; Hannula et al., 2020; Barreto et al., 2019).

Para segmentar el área útil de la muestra, se aplicó un algoritmo de umbral global en imágenes previamente transformadas a alta resolución de contraste, con el fin de eliminar el fondo (Sun, 2010). Esta segmentación generó una “máscara” utilizada para definir las regiones de interés (ROIs) de cada muestra.

**Figura 1.** Componentes del sistema de adquisición de imágenes hiperespectrales mediante el enfoque en línea (pushbroom).

La extracción de los espectros promedio por ROI se realizó con el software Spectronon 2.61, y los datos fueron exportados a MATLAB R2010a para generar matrices espectrales que correspondieran con los atributos fisicoquímicos medidos analíticamente.

Modelado espectral y análisis estadístico

Se construyeron modelos de regresión multivariante: PLSR, PCR y MLR, utilizando espectros promedio y valores de calidad (pH, textura, etc.) como variables dependientes. Estas técnicas son apropiadas para datos hiperespectrales por su capacidad de gestionar alta dimensionalidad, colinealidad entre predictores y reducción mediante variables latentes (Medina-García et al., 2025).

Se establecieron dos tipos de modelos: con espectros completos y espectros reducidos. Debido al número limitado de muestras, se aplicó validación cruzada tipo leave-one-out, dividiendo los datos en conjuntos de calibración ($n = XX$) y predicción ($n = YY$), con balance proporcional entre tratamientos.

El desempeño predictivo fue evaluado mediante:

- Coeficientes de determinación: R_c^2 , R_{cv}^2 , R_p^2
- Errores cuadráticos medios: RMSEC, RMSECV, RMSEP
- Número óptimo de variables latentes (VL), determinado mediante el mínimo de PRESS (Samrat et al., 2022).

Modelos robustos fueron aquellos con RMSEs bajos y similares entre fases, y R^2 elevados en todas las etapas (He et al., 2023). Se priorizó el modelo reducido que maximizara el R_p^2 , según el preprocesamiento aplicado.

Selección de longitudes de onda

La alta redundancia espectral justifica la selección de bandas relevantes para reducir dimensionalidad

sin pérdida de información. Esta selección se basó en los coeficientes β de los modelos completos (PLSR, PCR, MLR), considerando como óptimas aquellas longitudes con mayor influencia (Rogers et al., 2023; Zhang & Abdulla, 2023; Yu et al., 2024; Li et al., 2024). Los modelos optimizados fueron reconstruidos con las bandas seleccionadas, utilizando 3 formas espectrales: reflectancia (RS), absorbancia (AS) y Kubelka-Munk (KMS):

$$AS = -\log R \quad (2)$$

$$KMS = \frac{(1-R)^2}{2R} \quad (3)$$

Visualización química

Los modelos con mejor desempeño fueron aplicados para generar imágenes químicas o mapas de predicción, donde cada píxel del hipercubo fue convertido en un valor estimado del atributo modelado (Nikzadfar et al., 2023; Kharbach et al., 2023). Estos mapas se representaron en escala de color lineal (azul-rojo), facilitando la visualización de la distribución espacial del pH y textura en la superficie del jabón. El análisis visual permite identificar heterogeneidades locales y gradientes de calidad durante el proceso de secado (Fan et al., 2022). Para ello, se implementó un script en MATLAB R2022a que incluye rutinas de normalización, predicción píxel a píxel y reconstrucción pseudocolor, compatibles con matrices tridimensionales (Zhang & Abdulla, 2023). La Figura 2 resume gráficamente el flujo de procesamiento para la predicción de variables fisicoquímicas mediante imágenes hiperespectrales.

Los datos obtenidos para las variables de respuesta —textura, porcentaje de rendimiento, pH e imágenes hiperespectrales (HSI)— del jabón elaborado a partir de aceite residual fueron procesados y analizados estadísticamente utilizando el software Minitab® versión 19.

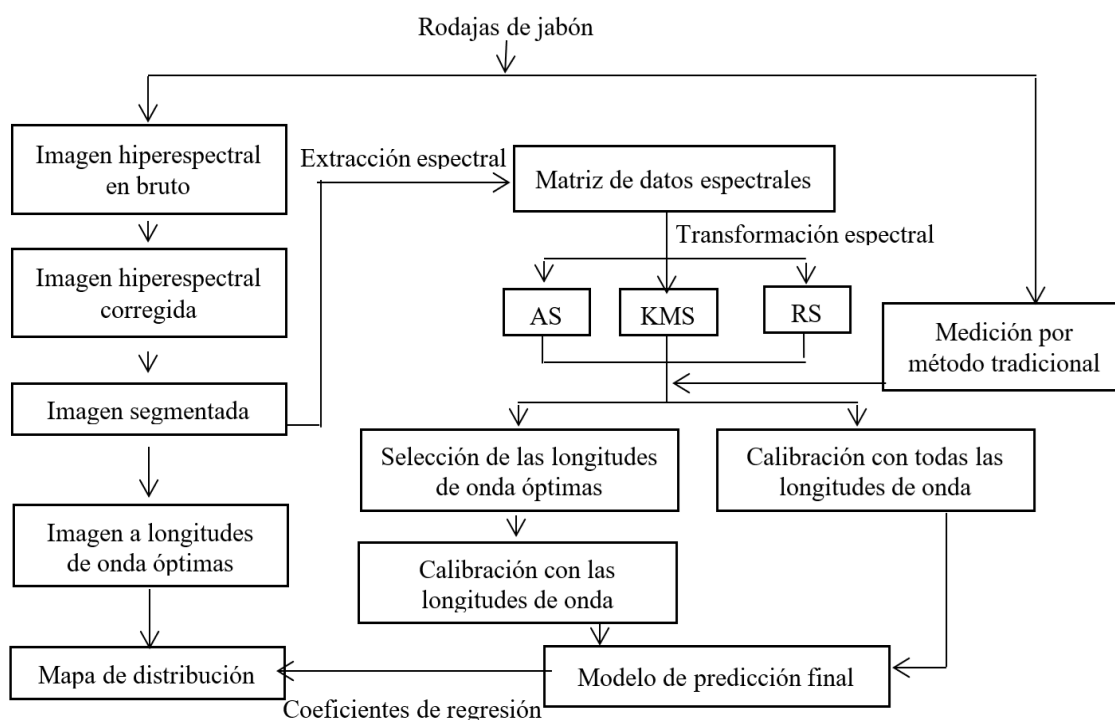


Figura 2. Principales pasos del procedimiento experimental.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Caracterización fisicoquímica del aceite residual

La Tabla 2 presenta las características fisicoquímicas del aceite residual analizado. La acidez libre fue del 5,20 %, valor significativamente superior al límite recomendado para aceites comestibles refinados (valor ácido $\leq 0,6$ mg KOH/g), así como a los rangos de peróxidos sugeridos para aceites vírgenes o refinados, lo que evidencia un deterioro considerable. Este nivel elevado puede atribuirse a la exposición prolongada a altas temperaturas y al elevado contenido de agua en los alimentos fritos, condiciones que favorecen la hidrólisis de triglicéridos y la formación de ácidos grasos libres (Abrante-Pascual et al., 2024).

La literatura señala que la repetición de ciclos de fritura incrementa la acidez y la peroxidación lipídica, con degradación progresiva del aceite y acumulación de compuestos polares y polímeros de triacilglicéridos (Chen et al., 2025; Manzoor et al., 2022). En procesos de fritura entre 160–180 °C, la proporción de ácidos grasos insaturados tiende a disminuir, mientras que aumentan los saturados y trans, especialmente bajo condiciones severas y prolongadas (Mahmud et al., 2023). Este cambio estructural explica la reducción observada en el índice de yodo (IV), indicador directo del grado de insaturación de los lípidos (Roman-Lara & Chong, 2025). El bajo contenido de materia insaponificable (0,03%) sugiere una alta pureza del aceite, con mínima presencia de compuestos no saponificables. En aceites vegetales, esta fracción suele incluir esteroides, tocoferoles y otros compuestos funcionales que, en bajas concentraciones, no interfieren significativamente con las valoraciones estándar (Poljšak & Kočevár Glavač, 2024). Asimismo, la densidad relativa se encuentra dentro de los rangos establecidos por normas internacionales, lo que confirma una matriz lipídica predominantemente triglicérida (Codex Alimentarius, 1999/actual).

La reutilización prolongada del aceite en presencia de residuos sólidos acelera las reacciones de degradación, disminuye el punto de humo, genera olores y sabores indeseables, y eleva los niveles de compuestos oxidativos, como ha sido ampliamente documentado (Manzoor et al., 2022; Mahmud et al., 2023). No obstante, en este caso, la humedad residual fue baja ($\approx 0,011\%$) y el índice de peróxidos (12,5 meq O_2 /kg) se mantuvo dentro de rangos aceptables para aceites en uso según criterios operativos (por ejemplo, POV < 50 meq O_2 /kg), lo que indica una estabilidad razonable del sistema (Park et al., 2020). Además, el contenido de compuestos volátiles fue inferior al 0,2% m/m, conforme al límite estipulado por el Codex Alimentarius (1999/actual).

El índice de yodo (IV ≈ 47) sugiere una insaturación moderada, lo que favorece el equilibrio entre reactividad química y estabilidad oxidativa, siendo relevante para aplicaciones posteriores como la formulación de jabones. Este parámetro, junto con el valor de saponificación, constituye una métrica clave para evaluar la idoneidad del aceite en procesos de transformación (Roman-Lara & Chong, 2025; Ajikumar et al., 2025).

Tabla 2

Caracterización fisicoquímica del aceite residual de frituras de papas

Parámetros	Valores
Acidez (%)	5,15
Densidad (g/ml)	0,92
Índice de saponificación (mg/g de muestra)	137
Material insaponificable (%)	0,03
Humedad (%)	0,011
Índice de peróxido (meq O_2 /kg de aceite)	12,5
Índice de yodo	47,0

Por otro lado, la Tabla 3 presenta los resultados de dos jabones comerciales de referencia (Neko y Palmolive) frente a los elaborados a partir de aceite residual, con fines comparativos. El jabón Neko registró un pH de 10,15 y Palmolive de 10,01, valores consistentes con el rango típico de jabones en barra ($\approx 8,5 - 10,5$), como han documentado estudios recientes de mercado y análisis físico-químicos (Dastidar et al., 2023; Alsalhi et al., 2024). Desde el punto de vista dermatológico, estos niveles de pH son más alcalinos que el manto ácido de la piel ($\approx 4,5 - 5,5$), lo que contextualiza la necesidad de evaluar los jabones formulados con aceite residual en términos de textura, desempeño (formación de espuma, solubilidad, desgaste) y tolerancia cutánea. Estas propiedades dependen en gran medida del pH y del tipo de tensioactivo presente, lo cual puede incidir en la sensación al tacto, capacidad de limpieza y potencial de resequedad (Hawkins et al., 2021).

Tabla 3

Textura y pH de jabón comercial

Jabón	Textura	pH
Neko	716,80	10,15
Palmolive	1044,34	10,10

Los jabones elaborados con aceite residual presentaron un pH entre 9,46 y 9,86 (Tabla 4), valores ligeramente inferiores a los observados en jabones comerciales como Neko y Palmolive (Tabla 3). Aunque todos se ubican dentro del rango alcalino típico para jabones en barra ($\approx 8,5 - 10,5$), el uso de aceite residual permitió obtener formulaciones con un perfil de pH más moderado. Se observó una tendencia general en la que un mayor valor de textura (fuerza de penetración) se relacionó con un menor rendimiento. Por ejemplo, el tratamiento 5 mostró el rendimiento más alto (140,38%) con una textura baja (182,75 g), mientras que el tratamiento 10, con textura más elevada, obtuvo el menor rendimiento. Esta relación inversa se atribuye a una saponificación incompleta, acentuada por la baja concentración de NaCl, lo que afectó la cohesión del jabón y promovió la separación de fases (Maotsela et al., 2019). La parte jabonosa, de menor densidad, flotó sobre la mezcla, mientras que el NaOH no reaccionado quedó atrapado en la fracción sólida, incrementando tanto la textura como el pH.

Este comportamiento fue confirmado visualmente mediante la presencia de una sustancia aceitosa en

la superficie del jabón (Figura 3), indicando una formación limitada de jabón y separación incompleta de fases. Asimismo, la agitación desempeñó un rol crítico: tiempos más prolongados de agitación favorecieron la compactación del jabón y separación de líquidos, generando productos más duros, pero con menor rendimiento.

Por otro lado, bajo condiciones experimentales constantes (%NaOH = 20, temperatura = 30 °C, relación solución NaOH/aceite = 0,7 y %NaCl = 5), se registraron mejoras generales en rendimiento, salvo en el tratamiento 10 (38,8%), que mantuvo una textura elevada y pH de 9,805. En este caso, la separación eficiente entre la fase salina y la jabonosa se asoció al efecto de una agitación más intensa, que permitió una mayor compactación del jabón sólido y desplazamiento de líquidos al fondo del molde. En términos de pH, todos los tratamientos de esta etapa se mantuvieron por debajo de 10, generando jabones sólidos adecuados para uso doméstico. Los tratamientos 1 y 4 mostraron características visuales deficientes, incluyendo una película aceitosa y coloración marrón oscura (Figura 3), atribuibles a una baja velocidad de agitación y reacción insuficiente entre NaOH y ácidos grasos insaturados. Este mismo fenómeno se evidenció en el tratamiento 13, con un rendimiento de apenas 76,89%.

Al analizar la relación entre pH y textura, se observó que la disminución del pH se acompañó de un incremento en la cohesión del jabón, reflejada en mejoras de textura desde 182,75 hasta 730 g (Tabla 2). Esta mayor compactación puede relacionarse con una atracción más eficiente entre moléculas saponificadas, generando productos con características físicas deseables para uso doméstico.

En términos de rendimiento, los tratamientos 5, 6 y 7 fueron los más destacados. No obstante, el tratamiento 8 (a pesar de su bajo rendimiento) presentó excelentes propiedades físicas y sensoriales, incluyendo buena textura, color uniforme y alta homogeneidad (Figura 3). Este tratamiento también mostró la mayor formación de espuma y una solubilidad moderada, atributos valiosos desde el punto de vista comercial, ya que los consumidores priorizan la durabilidad y funcionalidad equilibrada de los productos. En contraste, los tratamientos 1, 2, 3, 9, 11, 12, 13, 14 y 16 presentaron baja formación de espuma, asociada a una relación baja de solución NaCl/aceite y tiempos de agitación inferiores a 5 minutos. En estos casos, la cohesión estructural fue adecuada, pero la escasa separación entre la solución salina y la masa jabonosa generó una inclusión de NaCl en la matriz sólida, lo que formó redes que dificultaron la generación de espuma, independientemente de la solubilidad observada. Cabe destacar que, en todos los tratamientos, se evidenció la separación de la fase salina, acumulada en el fondo de los moldes (Figura 3). En términos visuales, los jabones con mejor apariencia y homogeneidad correspondieron a los tratamientos 5, 6, 7, 8, 9, 16 y 17. La agitación controlada resultó fundamental para mejorar la cinética de la reacción, promover una emulsificación eficiente de los componentes y generar una matriz final más estable.



Figura 3. Jabones obtenidos a partir de aceite residual de los tratamientos en la segunda etapa.

Modelos PLSR para la predicción de pH, dureza, adhesividad y elasticidad

Para el desarrollo de modelos predictivos de variables como pH, dureza, adhesividad y elasticidad (Tabla 5), se aplicaron algoritmos de regresión por mínimos cuadrados parciales (PLSR), regresión por componentes principales (PCR) y regresión lineal múltiple (MLR). La identificación de longitudes de onda relevantes se realizó inicialmente mediante la inspección de los valores absolutos de los coeficientes β obtenidos en los modelos calibrados, un enfoque tradicionalmente utilizado en estudios previos (ElMasry, Barbin, Pasquini e Iqbal).

Investigaciones han cuestionado el uso exclusivo de los coeficientes β como criterio de selección. Aredo et al. (2023) destaca que, si bien las representaciones β vs. longitud de onda son útiles, no siempre las bandas con los coeficientes más altos aportan la mejor información predictiva. Algunas longitudes, aunque menos prominentes, pueden ofrecer información complementaria no redundante, especialmente cuando las bandas adyacentes son altamente correlacionadas.

En este contexto, se ha propuesto el uso combinado de otros métodos de selección de variables, como VIP (Variable Importance in Projection), SPXY (Sample Partitioning based on X and Y) y CARS (Competitive Adaptive Reweighted Sampling), con el fin de reducir la colinealidad, mejorar la interpretabilidad y prevenir el sobreajuste del modelo (Wang et al., 2022). Por tanto, en este estudio se adoptó una estrategia híbrida que combinó la inspección visual de los coeficientes β con validaciones basadas en importancia multivariada, asegurando que las longitudes de onda seleccionadas contribuyan significativamente a la predicción de cada variable dependiente.

Tabla 4

Valores experimentales para pH, textura, Rendimiento, solubilidad y espuma en la segunda etapa

Tratamiento	TIEM (min)	RELsol NaCl/aceite	AGI (rpm)	NaOH	TEMP	NaOH/aceite	NaCl	pH	Tex (g)	Rend. (%)	Solubilidad	Espuma
1	3,811	0,35	501,35	20	30	0,7	5	9,70	204,398	127,84	63,04	5,06
2	6,189	0,35	501,35	20	30	0,7	5	9,76	209,04	123,40	56,46	7,01
3	3,811	0,65	501,35	20	30	0,7	5	9,86	327,28	117,86	52,26	5,16
4	6,189	0,65	501,35	20	30	0,7	5	9,62	389,41	85,77	39,10	11,08
5	3,811	0,35	798,65	20	30	0,7	5	9,76	182,75	140,38	41,91	15,18
6	6,189	0,35	798,65	20	30	0,7	5	9,69	508,20	130,29	25,32	11,29
7	3,811	0,65	798,65	20	30	0,7	5	9,75	281,306	128,80	27,51	8,25
8	6,189	0,65	798,65	20	30	0,7	5	9,51	440,29	95,35	65,71	7,03
9	3	0,5	650	20	30	0,7	5	9,54	224,69	128,53	22,07	3,25
10	7	0,5	650	20	30	0,7	5	9,81	730,76	38,80	29,58	8,13
11	5	0,25	650	20	30	0,7	5	9,50	209,02	128,27	31,39	6,45
12	5	0,75	650	20	30	0,7	5	9,46	406,26	101,93	17,42	5,64
13	5	0,5	400	20	30	0,7	5	9,67	238,35	73,89	52,41	3,65
14	5	0,5	900	20	30	0,7	5	9,62	228,93	129,27	41,04	2,36
15	5	0,5	650	20	30	0,7	5	9,73	262,00	102,96	57,70	8,92
16	5	0,5	650	20	30	0,7	5	9,73	290,20	102,95	44,81	4,80
17	5	0,5	650	20	30	0,7	5	9,69	258,21	104,54	34,92	9,85

Tabla 5

Caracterización textural y fisicoquímica de jabones elaborados a partir de aceite residual

Muestra	Text (g)	Dureza (g)	Adhesividad (g.s)	Elasticidad	Cohesividad	Gomosidad	Resiliencia	pH	IA
JABON.M1	204,398	232,394	-95,219	0,179	0,151	35,082	0,029	9,700	2,525
JABON.M2	209,048	249,891	-108,188	0,169	0,141	35,337	0,025	9,757	2,525
JABON.M3	327,282	505,985	-112,914	0,161	0,112	56,826	0,021	9,865	3,086
JABON.M4	389,417	760,244	-123,567	0,208	0,077	58,829	0,008	9,622	1,964
JABON.M5	182,754	164,008	-97,865	0,197	0,143	23,440	0,025	9,758	0,842
JABON.M6	508,206	770,461	-103,815	0,116	0,070	53,640	0,018	9,687	1,122
JABON.M7	281,306	333,253	-96,643	0,118	0,097	32,483	0,028	9,750	1,122
JABON.M8	440,298	842,921	-95,401	0,920	0,142	119,535	0,005	9,508	3,086
JABON.M9	224,697	294,502	-188,063	0,175	0,130	38,290	0,022	9,538	1,964
JABON.M10	730,768	799,569	-108,496	0,102	0,070	55,772	0,020	9,805	1,122
JABON.M11	209,024	287,063	-97,698	0,122	0,105	30,164	0,025	9,496	2,525
JABON.M12	406,200	773,018	-119,604	0,110	0,053	40,872	0,009	9,456	1,122
JABON.M13	238,353	25,169	-58,783	0,098	0,057	1,437	0,020	9,668	1,964
JABON.M14	228,937	274,864	-86,026	0,073	0,053	14,564	0,019	9,622	2,244
JABON.M15	262,004	466,855	-118,489	0,273	0,114	53,015	0,008	9,733	1,964
JABON.M16	290,208	382,453	-100,265	0,126	0,114	43,461	0,034	9,730	2,244
JABON.M17	258,211	313,015	-103,618	0,145	0,136	42,549	0,037	9,696	1,964

Dado el rango espectral de trabajo (896 – 1704 nm) y una resolución espectral de 5,08 nm, el total de bandas disponibles fue de 159. Los análisis mostraron que solo un número reducido de longitudes de onda influyó de manera significativa en los modelos, lo cual refleja tanto la eficiencia del método de selección como la especificidad espectral de los atributos analizados.

Selección de longitudes de onda más influyentes y construcción de modelos PLSR simplificados

En la Figura 4 se presentan los picos de longitud de onda más influyentes, de acuerdo con los coeficientes β del modelo PLSR:

Para pH: 973, 1139, 1205, 1333, 1385 y 1584 nm, siendo 1205 nm la más determinante.

- Para dureza: 1001, 1143, 1233, 1362, 1494 y 1698 nm, con un pico máximo en 1143 nm.
- Para adhesividad: 1006, 1053, 1143, 1233, 1362, 1494 y 1694 nm, destacando también 1143 nm.
- Para elasticidad: 1001, 1053, 1143, 1233, 1362, 1494 y 1698 nm, con 1143 nm como la más influyente.

En todos los casos, el número de longitudes de onda seleccionadas fue relativamente bajo (entre 6 y 7), lo

que sugiere una respuesta espectral compacta y específica para cada atributo. Este conjunto reducido permite construir modelos simplificados de PLSR sin comprometer la precisión predictiva, al tiempo que mejora la interpretabilidad y reduce el costo computacional del análisis.

Comparación y evaluación de los modelos PLSR completos y simplificados

Una vez definido el número óptimo de variables latentes (VL), se construyeron modelos PLSR para las variables pH, dureza, adhesividad y elasticidad, cuyos coeficientes de regresión se muestran en la Figura 4. Los valores predichos frente a los observados se presentan en la Figura 5, permitiendo evaluar visualmente el ajuste de los modelos. En general, los modelos basados en el espectro completo mostraron mejor desempeño predictivo en comparación con los modelos simplificados. Entre ellos, los modelos de pH y dureza alcanzaron coeficientes de validación cruzada (R_{cv}^2) de 0,863 y 0,761 respectivamente, mientras que el modelo de elasticidad presentó un R_p^2 de 0,705, lo que sugiere un ajuste aceptable en condiciones de predicción externa.

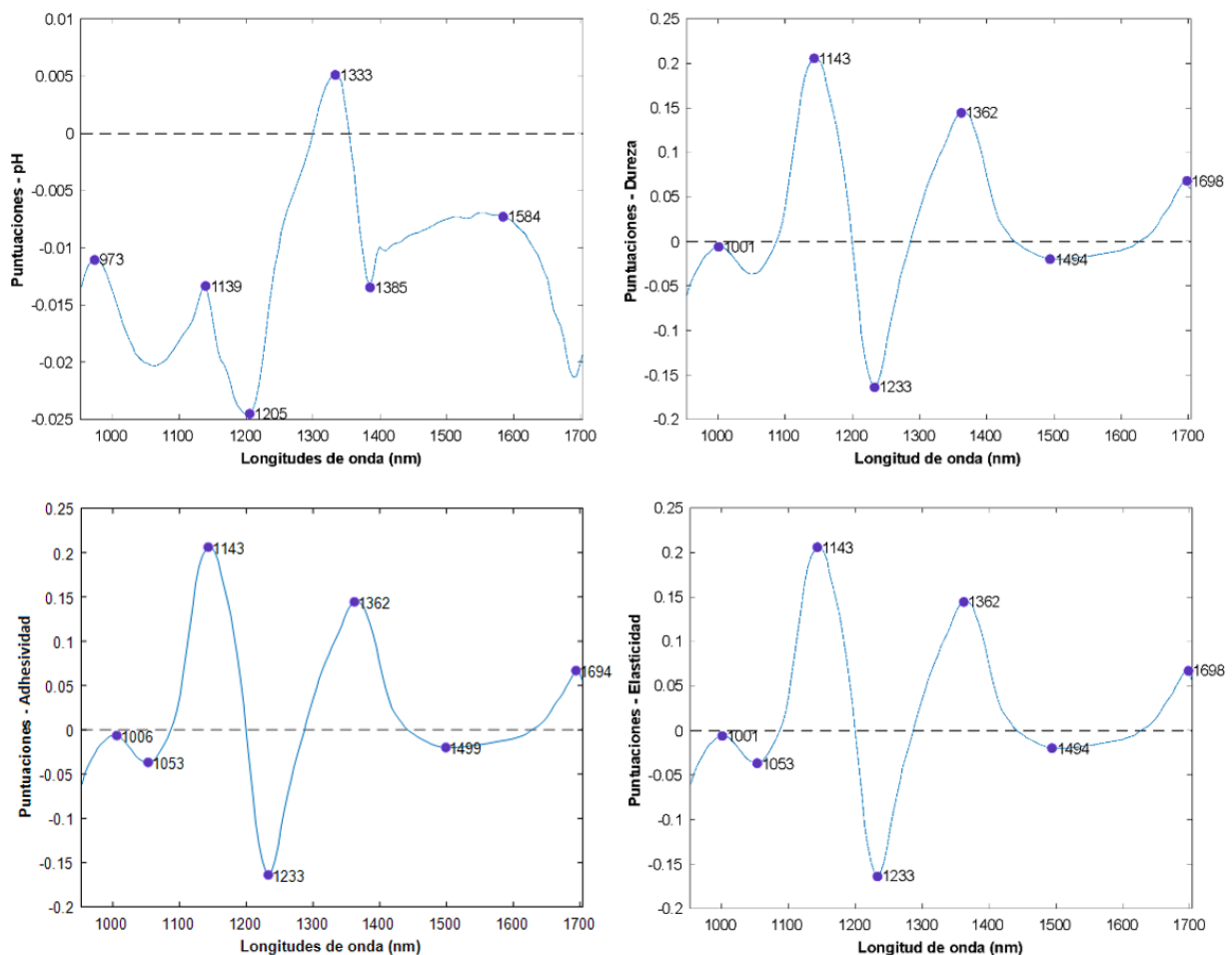


Figura 4. Coeficiente β vs longitud de onda de los modelos de espectro completo PLSR para la predicción de parámetros de calidad en el jabón.

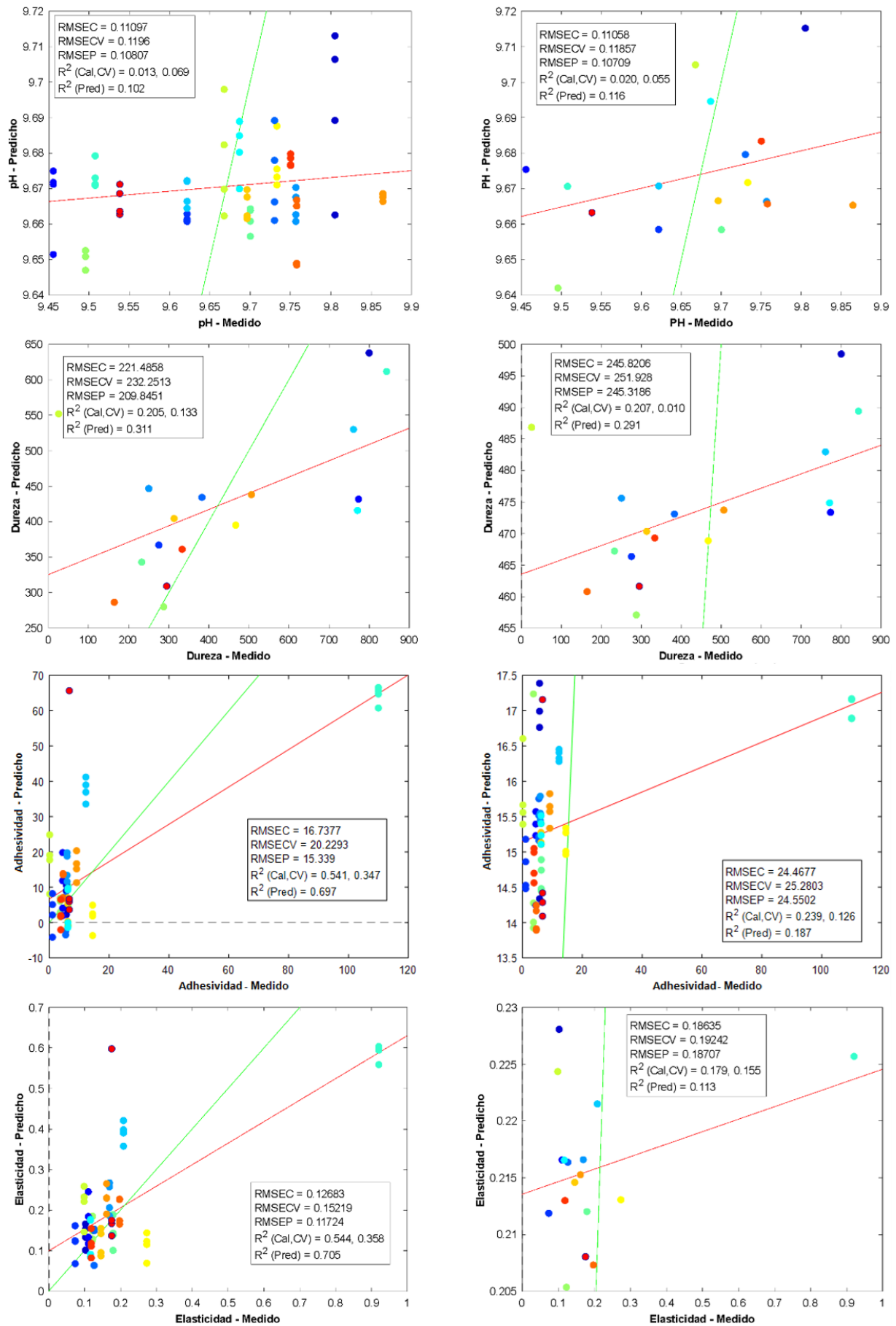


Figura 5. Parámetros observados y predichos por los modelos PLSR completo y reducido en los conjuntos de calibración y validación y predicción en jabones.

En contraste, los modelos reducidos no superaron el rendimiento de los completos. Aunque en el caso del pH el modelo reducido alcanzó un R_p^2 de 0,716, su mejora fue marginal y no suficientemente robusta como para justificar la reducción del número de bandas. Este resultado coincide con lo reportado por Aredo et al. (2019), quienes concluyeron que la correlación entre longitudes de onda individuales y parámetros de calidad específicos, como el marmoleo de carne, puede ser baja o no significativa cuando se aplica una selección simplificada.

La Figura 5 revela que, para la mayoría de las variables, la línea de predicción (verde) se separa considerablemente de la línea ideal de igualdad (línea roja), tanto en los modelos completos como en los reducidos, lo que se traduce en valores elevados de error (RMSEC, RMSECV y RMSEP). Según Caicedo y Romero (2021), esta divergencia es un indicio claro de baja precisión predictiva, siendo el MSE una métrica crítica para evaluar la fidelidad del modelo respecto a los datos reales: a menor MSE, mayor precisión del ajuste.

Los coeficientes de determinación para calibración (R_c^2) también fueron bajos en los modelos reducidos, con valores de 0,013 (pH), 0,205 (dureza), 0,541 (adhesividad) y 0,544 (elasticidad), lo que limita su utilidad práctica en contextos de predicción confiable. Únicamente en el caso del pH y gomosidad, los modelos simplificados mostraron ligeras ventajas: una menor separación angular en la línea predictiva y valores de RMSEP comparativamente menores frente al modelo completo, tal como se observa en la Figura 5.

En conjunto, estos hallazgos no respaldan de forma generalizada el uso de modelos simplificados con selección de longitudes de onda, al menos bajo las condiciones de resolución espectral y características del conjunto de datos utilizados en este estudio. La aplicación de modelos completos, a pesar de su mayor complejidad computacional, ofrece mayor estabilidad estadística y precisión en la predicción.

Selección de longitudes de onda más influyentes y construcción de modelos simplificados PCR

La Figura 6 presenta los coeficientes de regresión obtenidos en los modelos PCR, identificando las longitudes de onda más influyentes en la predicción del pH, dureza, adhesividad y elasticidad. Para cada variable se determinaron los picos de mayor peso absoluto, considerados como indicadores clave de sensibilidad espectral dentro del rango analizado (896–1704 nm). Para el pH, se identificaron ocho longitudes relevantes: 973, 1048, 1139, 1205, 1338, 1428, 1603 y 1703 nm, siendo 1338 nm la de mayor influencia en el modelo. Para la dureza, se seleccionaron once bandas: 1030, 1129, 1167, 1210, 1229, 1295, 1376, 1395, 1442, 1584 y 1698 nm, destacando esta última (1698 nm) como la más significativa. Para la adhesividad, se identificaron diez longitudes de onda relevantes: 1006, 1063, 1143, 1177, 1210, 1276, 1357, 1409, 1504 y 1660 nm, siendo 1660 nm la de mayor contribución. De manera similar, para la elasticidad, también se seleccionaron once longitudes: 1006, 1063, 1143, 1177, 1210, 1267, 1314, 1352, 1409, 1509 y 1660 nm, con esta última nuevamente como la más influyente.

El número total de longitudes seleccionadas para cada parámetro (entre 8 y 11) confirma que es posible construir modelos simplificados con un conjunto reducido

de variables espectrales, lo que potencialmente mejora la interpretabilidad sin comprometer severamente la capacidad predictiva. Esta estrategia resulta especialmente relevante en contextos donde se busca reducir la dimensionalidad sin perder información significativa del sistema químico-físico modelado.

Comparación de los modelos PCR completos y simplificados

Una vez definido el número óptimo de variables latentes, se aplicó la regresión PCR para construir los modelos predictivos, cuyos coeficientes de regresión se muestran en la Figura 6. Tal como se observa en la Figura 7, los modelos construidos con el espectro completo muestran un ajuste superior en comparación con sus versiones simplificadas. Sin embargo, ninguno de los modelos alcanzó niveles de ajuste aceptables (es decir, coeficientes de determinación mayores al 70%) para ninguna de las variables evaluadas (R_c^2 , R_{cv}^2 y R_p^2).

En los modelos reducidos, se observan ligeras mejoras puntuales, como en el caso de la adhesividad, donde el modelo reducido alcanza un R_p^2 , y del pH, con un R_c^2 de 0,399; sin embargo, ambos siguen por debajo del umbral mínimo recomendado para aplicaciones predictivas robustas. Los gráficos de dispersión (Figura 7) de los valores observados frente a los predichos reflejan que, tanto para espectros completos como reducidos, las líneas de regresión muestran una alta desviación respecto a la diagonal ideal (línea de igualdad), indicando errores significativos. Esta separación está asociada a los elevados valores de RMSEC, RMSECV y RMSEP, con diferencias mínimas entre ellos, lo que sugiere una limitada capacidad de generalización de los modelos.

Finalmente, todos los R_c^2 obtenidos fueron bajos, con resultados de 0,263 (pH), 0,305 (dureza), 0,526 (adhesividad) y 0,520 (elasticidad). Aunque el modelo reducido para el pH mostró una menor separación angular y menor error de predicción en comparación con el modelo completo, la mejora sigue siendo insuficiente para considerarse significativa o práctica.

Selección de longitudes de onda más influyentes y construcción de modelos simplificados MLR

En la Figura 8 se presentan los coeficientes de regresión del modelo MLR, a partir de los cuales se identificaron las longitudes de onda más influyentes para cada variable de respuesta. Para el pH, se seleccionaron 19 bandas relevantes: 963, 1053, 1091, 1124, 1162, 1191, 1248, 1276, 1338, 1362, 1409, 1433, 1504, 1564, 1594, 1641, 1694, 1698 y, nuevamente, 1124 nm, siendo esta última probablemente un error de duplicación. La longitud de onda con mayor peso fue 1091 nm. Para la dureza, se identificaron 11 longitudes influyentes: 1011, 1143, 1167, 1177, 1238, 1371, 1385, 1423, 1485, 1651 y 1656 nm, destacando 1167 nm como la más significativa. En el caso de la adhesividad, se seleccionaron 9 bandas: 1006, 1072, 1148, 1172, 1205, 1428, 1523, 1556 y 1660 nm, con 1660 nm como la de mayor influencia. Finalmente, para la elasticidad, las longitudes más relevantes fueron 1001, 1134, 1172, 1210, 1385, 1566 y 1670 nm, siendo 1670 nm la dominante. En todos los casos, el número de variables seleccionadas fue relativamente bajo (entre 7 y 19 bandas), lo cual resulta favorable para la construcción de modelos simplificados.

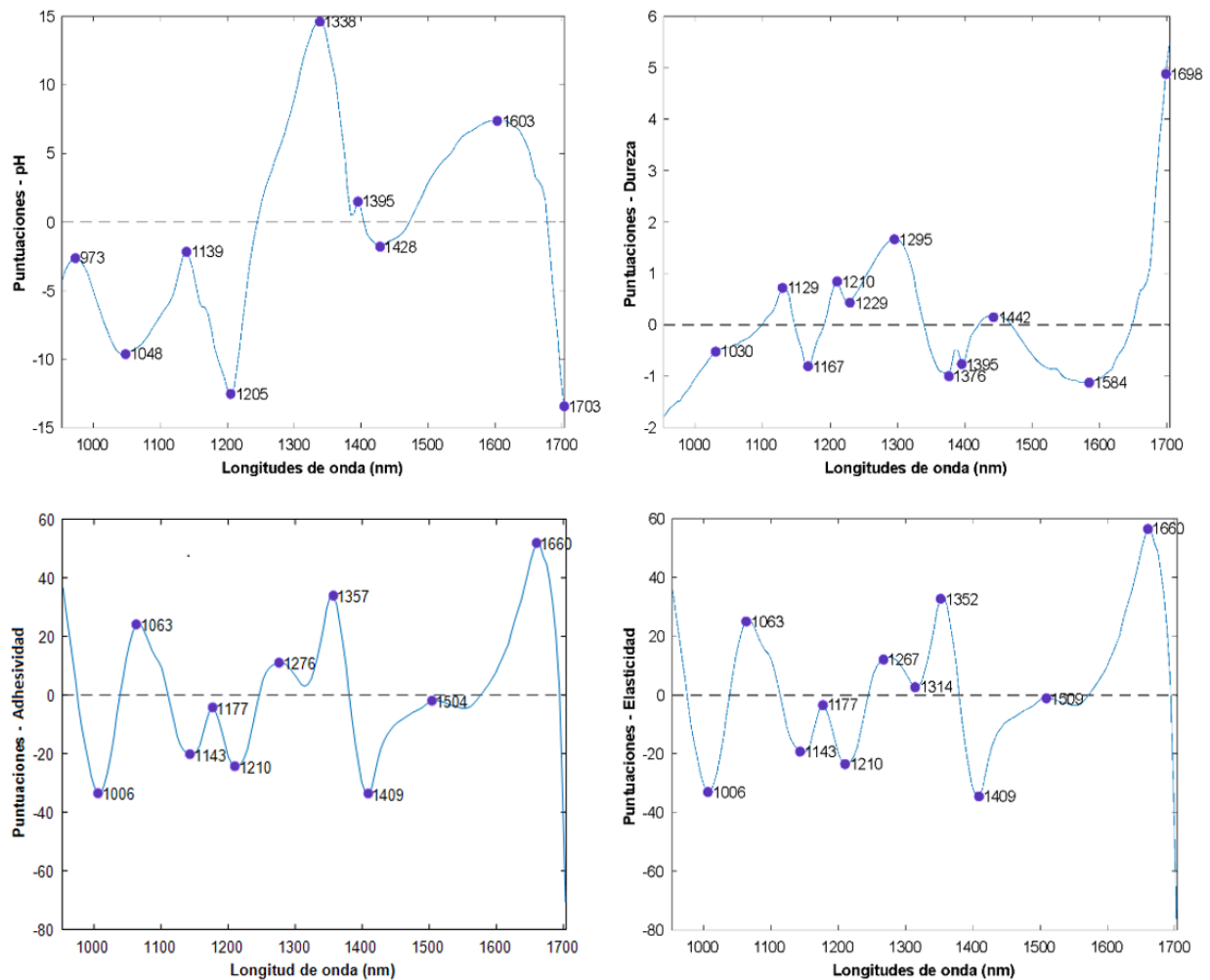


Figura 6. Coeficiente β vs longitud de onda de los modelos de espectro completo PCR para la predicción de parámetros de calidad en el jabón.

Esta selección se realizó sobre la base de los coeficientes absolutos más altos del modelo completo, lo que permitió reducir la dimensionalidad sin comprometer significativamente la capacidad explicativa del modelo.

Comparación y evaluación de los modelos MLR completos y simplificados

Una vez definido el número de variables latentes, se aplicó la regresión MLR para construir los modelos predictivos, cuyos coeficientes se presentan en la Figura 8. La Figura 9 muestra los resultados de predicción para los modelos completos y reducidos. En general, los modelos basados en espectros completos demostraron un mejor desempeño, con coeficientes de determinación en calibración (R_c^2) superiores al 70% para todas las variables: 0,999 para pH, 0,952 para dureza, 0,829 para adhesividad y 0,846 para elasticidad, siendo considerados estadísticamente aceptables y robustos. En contraste, los modelos simplificados no superaron a los completos en precisión predictiva. Solo en los casos de adhesividad y elasticidad se observaron valores de R_{cv}^2 de 0,338 y 0,400, respectivamente, y un R_p^2 de 0,720 para elasticidad, lo cual, si bien representa una mejora marginal en comparación con sus versiones simplificadas previas, sigue siendo insuficiente para validar su uso como modelo alternativo.

El análisis visual de la Figura 9 revela que, al emplear espectros completos, el ángulo entre las líneas de valores observados y predichos es considerablemente menor, lo que se traduce en un bajo error cuadrático medio de calibración (RMSEC). Sin embargo, los valores de RMSECV y RMSEP fueron más altos y con diferencias apreciables, indicando cierta variabilidad durante la validación cruzada y predicción externa. A pesar de ello, las diferencias entre RMSEC, RMSECV y RMSEP fueron reducidas en todos los modelos completos, lo que sugiere buena estabilidad, bajo riesgo de sobreajuste y capacidad de generalización aceptable.

Este comportamiento es consistente con hallazgos recientes en el campo de la quimiometría aplicada a imágenes hiperespectrales, donde la proximidad entre los errores de calibración y validación, junto con altos valores de R_c^2 y R_p^2 , se considera un criterio clave para la validación de modelos predictivos confiables (Kharbach et al., 2023; Liu et al., 2023).

En resumen, la reducción del número de longitudes de onda no mejoró el rendimiento global del modelo MLR. Por el contrario, los resultados confirman que el uso de espectros completos proporciona una mayor precisión y consistencia en la predicción de variables como pH, dureza, adhesividad y elasticidad.

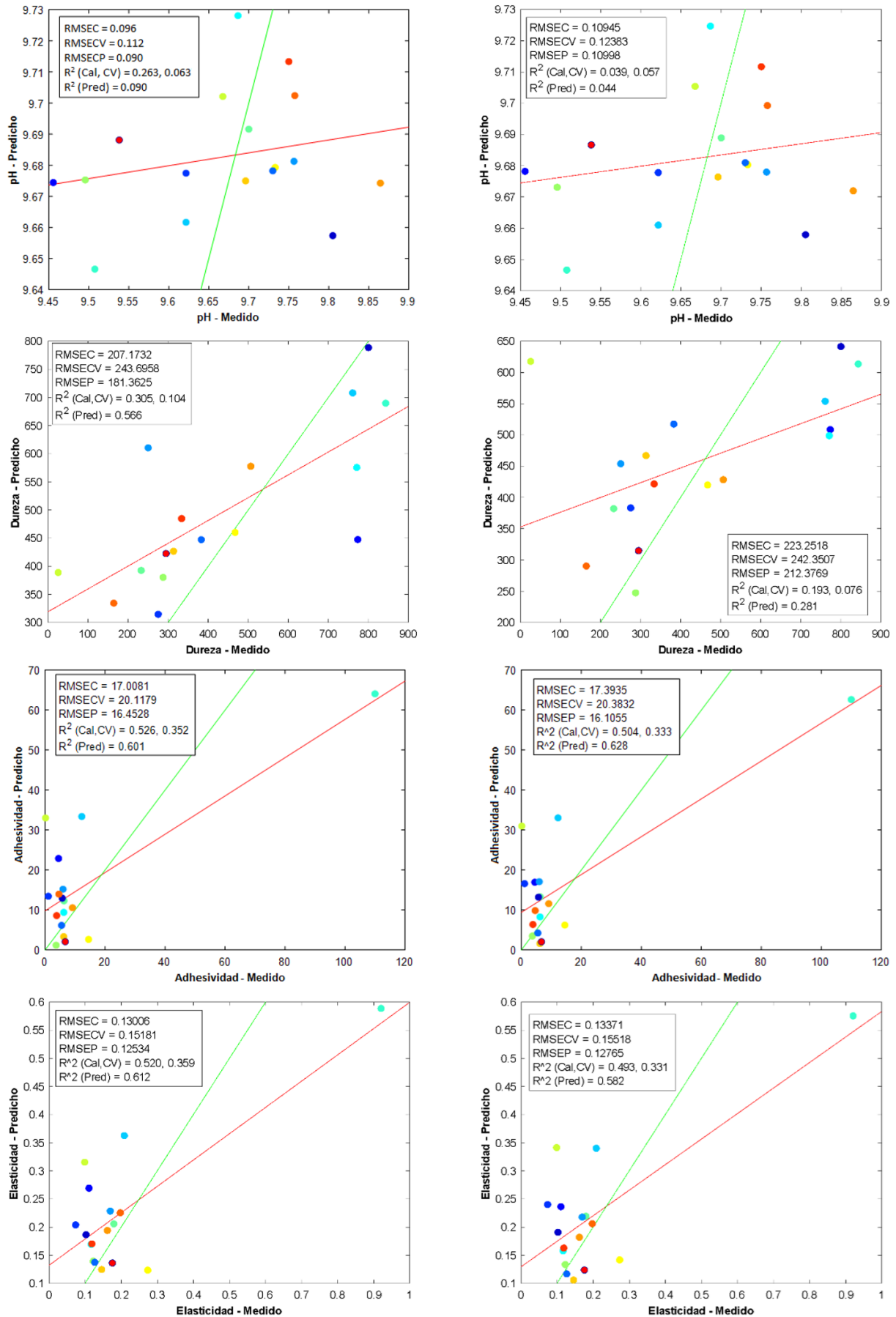


Figura 7. Parámetros observados y predichos por los modelos PCR completo y reducido en los conjuntos de calibración y validación y predicción en jabones.

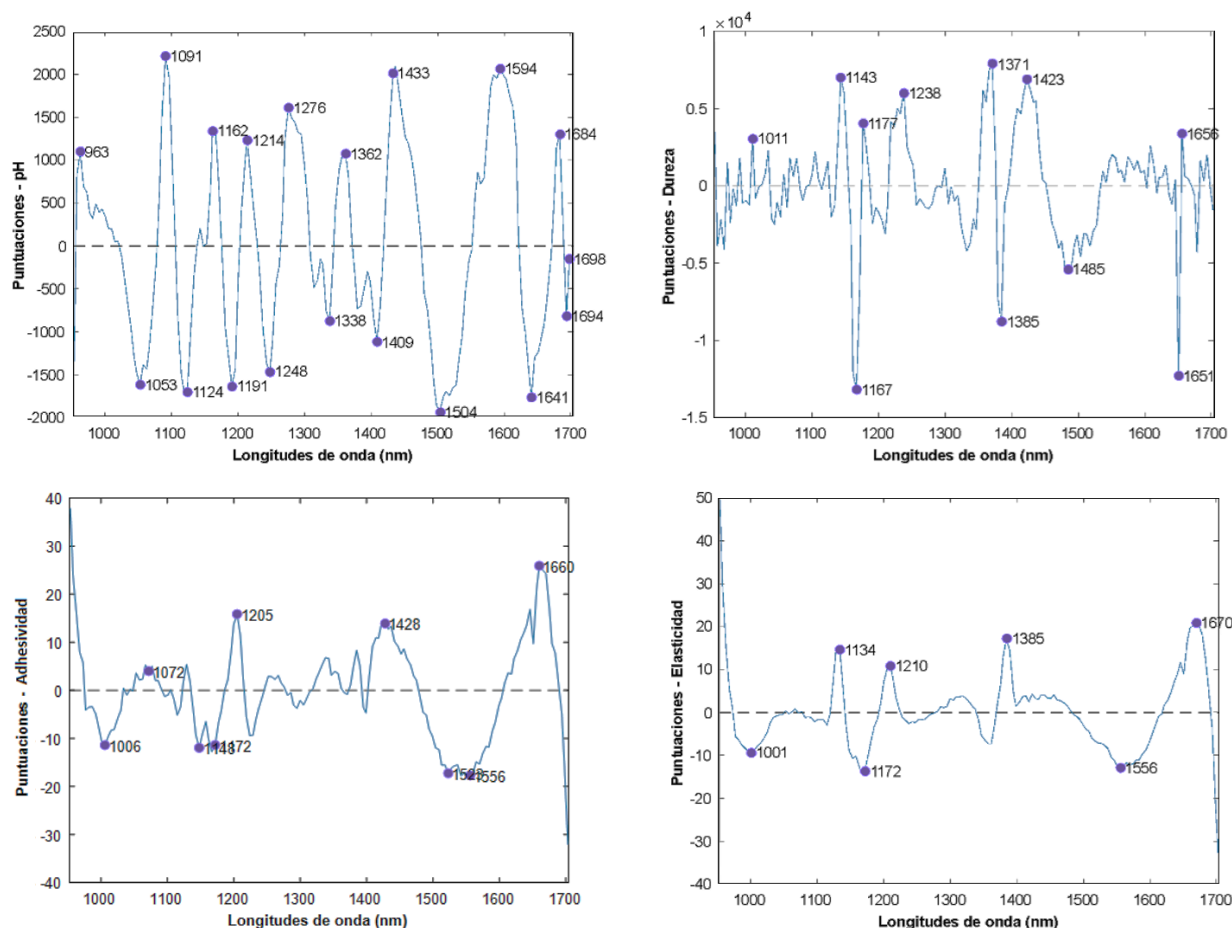


Figura 8. Coeficiente β vs longitud de onda de los modelos de espectro completo para la predicción de parámetros de calidad en el jabón.

Selección del mejor modelo predictivo

A partir de los resultados obtenidos con los modelos PLSR, PCR y MLR, se concluye que la reducción del rango espectral no mejora significativamente el ajuste de los modelos ni incrementa los coeficientes de determinación de calibración (R_c^2) o predicción (R_p^2). Por el contrario, los modelos construidos con el espectro completo demostraron un comportamiento más robusto y estable, con valores de R_c^2 y R_p^2 consistentemente superiores al 70 %. En consecuencia, se seleccionaron estos modelos como base para definir el modelo estadístico predictivo de mejor desempeño para todas las variables dependientes evaluadas.

En la Tabla 6 se resumen los resultados de los modelos completos. El modelo MLR destacó por presentar los valores más bajos de error cuadrático medio de calibración (RMSEC) y los R_c^2 más altos, superando el umbral de aceptabilidad del 70% en todas las variables. Asimismo, mostró valores reducidos de RMSEP y R_p^2 elevados, salvo en el caso de la elasticidad, donde el modelo PLSR presentó un rendimiento ligeramente superior. En términos generales, considerando la combinación de bajo RMSEC, altos valores de R_c^2 (cerca del 100 %) y R_p^2 elevados, el modelo predictivo con mejor ajuste global fue el MLR basado en espectros completos. Estos hallazgos refuerzan la superioridad del MLR frente a los modelos PLSR y PCR, especialmente en contextos de alta colinealidad, característica común en datos hiperespectrales debido a la fuerte correlación entre longitudes de onda adyacentes. Jara et al. (2025)

también reportaron una mayor estabilidad y capacidad de generalización del MLR al comparar su eficacia con la de PLSR en la predicción de propiedades texturales en matrices complejas. En contraste, los modelos PLSR y PCR presentaron coeficientes de determinación más bajos, lo cual concuerda con lo reportado por Aredo (2019). Este autor señaló que un número reducido de longitudes de onda influyentes puede estar asociado a la baja resolución espectral (≈ 8 nm) en el rango de 400–1000 nm, que limita la obtención de bandas efectivas (≈ 75). No obstante, estudios posteriores con mayor densidad espectral han demostrado mejoras sustanciales en la capacidad predictiva. Por ejemplo, Pasquini (2018) evidenció que una resolución inferior a 5 nm y un rango extendido hasta la región del NIR (~ 1700 nm) permite captar mejor las absorciones químicas características de los compuestos analizados.

La distribución de los coeficientes β para las variables pH y dureza se presenta ampliamente dispersa, con amplitudes moderadas, lo que refleja la resolución espectral utilizada (4,74 nm) y el rango de adquisición (896–1703 nm). Si bien esta configuración limita la resolución de bandas de absorción estrechas, no impide identificar regiones críticas asociadas a grupos funcionales relevantes. Además, como destacan Fernández-Pierna & Baeten (2020), en condiciones de alta colinealidad o solapamiento espectral, las absorciones clave no siempre coinciden con los picos máximos de los coeficientes β , sino que pueden ubicarse en zonas de transición entre picos, aspecto que debe considerarse en la interpretación de los modelos.

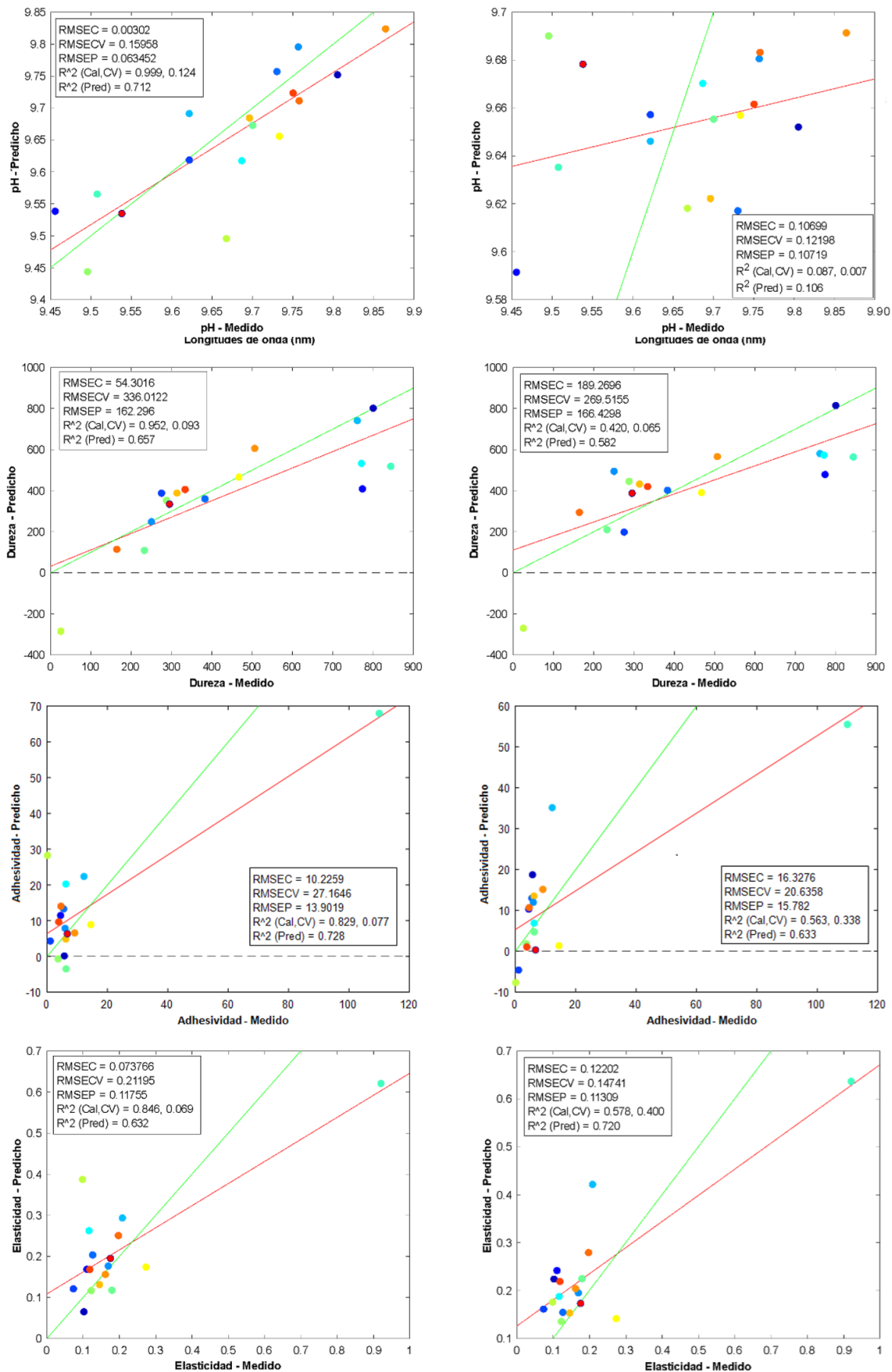


Figura 9. Parámetros observados y predichos por los modelos MLR completo y reducido en los conjuntos de calibración y validación y predicción en jabones.

Optimización de los parámetros independientes en la producción de jabón

La optimización de los parámetros independientes en la producción de jabón se llevó a cabo considerando múltiples variables respuesta simultáneamente. Para ello, se definieron metas específicas de optimización: minimizar el pH, maximizar la dureza, maximizar la adhesividad, y minimizar la elasticidad, cohesividad, gomosidad y resiliencia. Estas metas fueron aplicadas al modelo generado mediante el Diseño Compuesto Central Rotacional (DCCR) y analizadas a través de superficies de respuesta generadas con el software Minitab 19.

En la Tabla 7 se presentan las condiciones óptimas globales para los parámetros independientes, que

permiten alcanzar un equilibrio entre las variables tecnológicas y sensoriales evaluadas. Según los resultados del análisis multivariado, las condiciones óptimas corresponden a un tiempo de agitación de 5,9495 minutos, una relación solución NaCl/NaOH de 0,75 y una velocidad de agitación de 718,182 rpm.

Asimismo, se reportan las condiciones óptimas individuales para cada variable respuesta por separado, de acuerdo con los criterios de optimización previamente definidos. Estas condiciones permiten identificar los ajustes específicos requeridos para priorizar una propiedad particular del jabón (como elasticidad o dureza), según las necesidades de formulación o los requerimientos funcionales del producto final.

CONCLUSIONES

Los modelos estadísticos construidos a partir de imágenes hiperespectrales permitieron predecir con precisión características fisicoquímicas y mecánicas del jabón elaborado a partir de aceite residual doméstico. Entre los modelos evaluados, la Regresión Lineal Múltiple (MLR) con información espectral completa presentó el mejor desempeño, alcanzando coeficientes de determinación de calibración (R_c^2) superiores al 70 % en todas las variables analizadas: 99,9% (pH), 95,2 % (dureza), 82,9% (adhesividad) y 84,6% (elasticidad). Estos resultados se complementaron con errores de calibración (RMSEC) y predicción (RMSEP) bajos, lo que confirma la robustez y capacidad de generalización del modelo.

En contraste, los modelos PLSR y PCR mostraron desempeños limitados, especialmente con espectros reducidos. Aunque el modelo PLSR logró ajustes aceptables para pH, dureza y elasticidad (con R_{cv}^2 y R_p^2 cercanos al 70%), la adhesividad no fue correctamente estimada. El modelo PCR, por su parte, no alcanzó

niveles predictivos aceptables en ninguna variable bajo ninguna de las configuraciones.

Con base en estos resultados, se concluye que el modelo MLR con espectro completo constituye la mejor herramienta predictiva para este sistema, destacando por su mayor estabilidad frente a la colinealidad espectral y su capacidad de representar adecuadamente la variabilidad de los atributos del jabón.

Asimismo, la optimización del proceso de saponificación, basada en análisis de superficie de respuesta (DCCR) implementado en Minitab 19, permitió establecer las condiciones operativas ideales: tiempo de agitación de 5,95 min, relación solución NaCl/aceite de 0,75 y velocidad de agitación de 718 rpm. Estas condiciones contribuyen a obtener un producto con características mejoradas y estandarizables para aplicaciones domésticas, lo cual valida el uso de técnicas hiperespectrales como herramientas de control y optimización en procesos de valorización de residuos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abrante-Pascual, S., Nieva-Echevarría, B., & Goicoechea-Oses, E. (2024). Vegetable oils and their use for frying: a review of their compositional differences and degradation. *Foods*, 13(24), 4186. <https://doi.org/10.3390/foods13244186>
- Ajikumar, N., Ramanathan, S., Ragupathy, D., & Ramesh, M. (2025). Quick and reagent-free monitoring of edible oil adulteration: A comprehensive review. *Food Chemistry*, 450, 138765. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.138765>
- Alsalmi, A., Al-Ali, A., Al-Shamsi, A., & Al-Marzooqi, F. (2024). Exploring pH levels and environmental impacts on personal care products. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 21(2), 123. <https://doi.org/10.3390/ijerph21020123>
- Aredo, V., Velásquez, L., Carranza-Cabrera, J., & Siche, R. (2019). Predicting of the quality attributes of orange fruit using hyperspectral images. *Journal of Food Quality and Hazards Control*, 6, 82-92. <https://doi.org/10.18502/jfqhc.6.3.1381>
- Barreto, M. A. P., Johansen, K., Angel, Y., & McCabe, M. F. (2019). Radiometric assessment of a UAV-based push-broom hyperspectral camera. *Sensors*, 19(21), 4699. <https://doi.org/10.3390/s19214699>
- Cheng, H. (2021). Functional Cellulosic Porous Materials: Structure Design, Surface Engineering, and Applications. <https://doi.org/10.3390/19789036552660>
- Chen, J., Zhang, L., Guo, X., Qiang, J., Cao, Y., Zhang, S., & Yu, X. (2025). Influence of frying conditions on quality attributes of frying oils: Kinetic investigation of polar compounds. *Food Chemistry: X*, 29, 102673. <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2025.102673>
- Dastidar, S. G., Yarovsky, Y., Leopoldino, S. R., Agarwal, P., Ghosh, C., Bangal, A., ... & Raut, J. S. (2023). Revisiting the role of total fatty matter in soap bars. *Journal of Surfactants and Detergents*, 26(6), 797-806. <https://doi.org/10.1002/jsde.12699>
- Fan, S., Lu, H., & Huang, M. (2022). Hyperspectral imaging combined with chemometrics to visualize moisture and chemical composition in food products. *Food Analytical Methods*, 15(6), 1614-1626. <https://doi.org/10.1007/s12161-022-02361-9>
- Gama, T., Farrar, M. B., Tootoonchy, M., Wallace, H. M., Trueman, S. J., Tahmasbian, I., & Bai, S. H. (2024). Hyperspectral imaging predicts free fatty acid levels, peroxide values, and linoleic acid and oleic acid concentrations in tree nut kernels. *LWT*, 199, 116068. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2024.116068>
- Haughey, S. A., Montgomery, H., Moser, B., Logan, N., & Elliott, C. T. (2023). Utilization of hyperspectral imaging with chemometrics to assess beef maturity. *Foods*, 12(24), 4500. <https://doi.org/10.3390/foods12244500>
- Hawkins, S., Dasgupta, B. R., & Ananthapadmanabhan, K. P. (2021). Role of pH in skin cleansing. *International Journal of Cosmetic Science*, 43(4), 474-483. <https://doi.org/10.1111/ics.12721>
- He, H., Li, Z., Qin, Q., Yu, Y., Guo, Y., Cai, S., & Li, Z. (2025). Spectroscopic and Imaging Technologies Combined with Machine Learning for Intelligent Perception of Pesticide Residues in Fruits and Vegetables. *Foods*, 14(15), 2679. <https://doi.org/10.3390/foods14152679>
- Hou, S. J., Cheng, K. C., Lin, S. H., Hsiao, I. L., Santoso, S. P., Singajaya, S., ... & Lin, S. P. (2024). Improvement of extracellular polysaccharides production from *Cordyceps militaris* immobilized alginate beads in repeated-batch fermentation. *LWT*, 193, 115752. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2024.115752>
- ISO. (2020). ISO 660: Animal and vegetable fats and oils—Determination of acid value and acidity. Geneva: International Organization for Standardization.

- ISO. (2020). ISO 3657: Animal and vegetable fats and oils—Determination of saponification value. Geneva: International Organization for Standardization.
- ISO. (2020). ISO 758: Liquid chemical products—Determination of density by the hydrometer method. Geneva: International Organization for Standardization.
- ISO. (2023). ISO 4561: Soaps—Determination of free alkali and free fatty acids. Geneva: International Organization for Standardization.
- ISO. (1978). ISO 672: Soaps—Determination of moisture and volatile matter content—Oven method. Geneva: International Organization for Standardization. https://www.iso.org/standard/4837.html?utm_source=chatgpt.com
- Jara-Vélez, J., Siche, R., Velásquez-Barreto, F. F., Salazar-Campos, O., Lopez, Y., & Salazar-Campos, J. (2025). Analytical optimisation of eco-friendly soap production using hyperspectral imaging and chemometric modelling of physicochemical properties. *Microchemical Journal*, 215, 114259. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2025.114259>
- Kharbach, M., Alaoui Mansouri, M., Taabouz, M., & Yu, H. (2023). Current application of advancing spectroscopy techniques in food analysis: data handling with chemometric approaches. *Foods*, 12(14), 2753. <https://doi.org/10.3390/foods12142753>
- Lee, J. B., Bae, Y. J., Kwon, G. Y., Sohn, S. K., Lee, H. R., Kim, H. J., ... & Shim, K. B. (2025). Short-Wave Infrared Hyperspectral Image-Based Quality Grading of Dried Laver (*Pyropia* spp.). *Foods*, 14(3), 497. <https://doi.org/10.3390/foods14030497>
- Li, X., Fu, X., & Li, H. (2024). A CARS-SPA-GA feature wavelength selection method based on hyperspectral imaging with potato leaf disease classification. *Sensors*, 24(20), 6566. <https://doi.org/10.3390/s24206566>
- Mahmud, N., Islam, J., Oyom, W., Adrah, K., Adegoke, S. C., & Tahergorabi, R. (2023). A review of different frying oils and oleogels as alternative frying media for fat-uptake reduction in deep-fat fried foods. *Heliyon*, 9(11). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e22863>
- Manzoor, S., Masoodi, F. A., Rashid, R., Ahmad, M., & Kousar, M. U. (2022). Quality assessment and degradative changes of deep-fried oils in street-fried food chain of Kashmir, India. *Food Control*, 141, 109184. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2022.109184>
- Maotsela, T., Danha, G., & Muzenda, E. (2019). Utilization of Waste Cooking Oil and Tallow for Production of Toilet "Bath" Soap. *Procedia Manufacturing*, 35, 541-545. <https://doi.org/10.1016/j.promfg.2019.07.008>
- Marín-Méndez, J. J., Esplandiú, P. L., Alonso-Santamaría, M., Remirez-Moreno, B., Del Castillo, L. U., Dublán, J. E., ... & Sáiz-Abajo, M. J. (2024). Hyperspectral imaging as a non-destructive technique for estimating the nutritional value of food. *Current Research in Food Science*, 9, 100799. <https://doi.org/10.1016/j.crfs.2024.100799>
- Medina-García, M., Amigo, J. M., Martínez-Domingo, M. A., Valero, E. M., & Jiménez-Carvelo, A. M. (2025). Strategies for analysing hyperspectral imaging data for food quality and safety issues—A critical review of the last 5 years. *Microchemical Journal*, 214, 113994. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2025.113994>
- Nikzadfar, M., Rashvand, M., Zhang, H., Shenfield, A., Genovese, F., Altieri, G., ... & Di Renzo, G. C. (2024). Hyperspectral imaging aiding artificial intelligence: A reliable approach for food qualification and safety. *Applied Sciences*, 14(21), 9821. <https://doi.org/10.3390/app14219821>
- Olu-Arotiowa, O. A., Odesanmi, A. A., Adedotun, B. K., Ajibade, O. A., Olasesan, I. P., Odofin, O. I., & Abass, A. O. (2022). Review on environmental impact and valorization of waste cooking oil. *LAUTECH Journal of Engineering and Technology*, 16(1), 144-163.
- Pasquini, C. (2018). Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives—A review. *Analytica chimica acta*, 1026, 8-36. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2018.04.004>
- Park, J.-M., Koh, J.-H., & Kim, J.-M. (2020). Determining the reuse of frying oil for fried sweet and sour pork according to type of oil and frying time. *Food Science of Animal Resources*, 40(5), 785-794. <https://doi.org/10.5851/kosfa.2020.e54>
- Patel, D., Bhise, S., Kapdi, S. S., & Bhatt, T. (2024). Non-destructive hyperspectral imaging technology to assess the quality and safety of food: A review. *Food Production, Processing and Nutrition*, 6(1), 69. <https://doi.org/10.1186/s43014-024-00246-4>
- Pesce, L. (2024). Machine Learning for Predicting Grape Quality Using Spectral Imaging Techniques (Doctoral dissertation, Politecnico di Torino). <https://webthesis.biblio.polito.it/34088/>
- Pillay, R., Hardeberg, J. Y., & George, S. (2019). Hyperspectral imaging of art: Acquisition and calibration workflows. *Journal of the American Institute for Conservation*, 58(1-2), 3-15. <https://doi.org/10.1080/01971360.2018.1549919>
- Rogers, M., Blanc-Talon, J., Urschler, M., & Delmas, P. (2023). Wavelength and texture feature selection for hyperspectral imaging: a systematic literature review. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 17(6), 6039-6064. <https://doi.org/10.1007/s11694-023-02044-x>
- Poljšak, N., & Kočevkar Glavač, N. (2024). Analytical evaluation and antioxidant activity of selected vegetable oils to support evidence-based use in dermal products. *Natural Product Communications*, 19(10), 1934578X241281245. <https://doi.org/10.1177/1934578X241281245>
- Roman-Lara, M. M., & Chong, K. J. (2025). A miniaturized iodine value assay for quantifying the unsaturated fatty acid content of lipids, lipid mixtures, and biological membranes. *Lipids*, 60(5), e12438. <https://doi.org/10.1002/lipd.12438>
- Samrat, N. H., Johnson, J. B., White, S., Naiker, M., & Brown, P. (2022). A rapid non-destructive hyperspectral imaging data model for the prediction of pungent constituents in dried ginger. *Foods*, 11(5), 649. <https://doi.org/10.3390/foods11050649>
- Sarkar, R., Pal, A., Rakshit, A., & Saha, B. (2021). Properties and applications of amphoteric surfactant: A concise review. *Journal of Surfactants and Detergents*, 24(5), 709-730. <https://doi.org/10.1002/jsde.12542>
- Shaikh, M. S., Jaferzadeh, K., Thörnberg, B., & Casselgren, J. (2021). Calibration of a hyper-spectral imaging system using a low-cost reference. *Sensors*, 21(11), 3738. <https://doi.org/10.3390/s21113738>
- Tawo, O. E., & Mbamalu, M. I. (2025). Advancing waste valorization techniques for sustainable industrial operations and improved environmental safety. *Int. J. Sci. Res. Arch*, 14(02), 127-149. <https://doi.org/10.1030574/ijrsra.2025.14.2.0334>
- Uduma, U. A., Isah, A. N., Zauro, S. A., & Yakubu, M. (2025). Production and analysis of laundry soaps from blended oils (palm kernel oil, palm stearin, beef tallow, and cottonseed oil). *FUDMA Journal of Sciences*, 19(1), 45-55. <https://doi.org/10.33003/fjs-2025-0904-3600>
- UN-Habitat. (2020). Solid Waste Management. UN-Habitat Knowledge & Innovation. https://unhabitat.org/topic/solid-waste-management?utm_source=chatgpt.com
- United Nations Environment Programme (UNEP). (2024). Global Waste Management Outlook 2024 (GWMO 2024). <https://doi.org/10.59117/20.500.11822/44939>
- Zhang, G., & Abdulla, W. (2023). Explainable AI-driven wavelength selection for hyperspectral imaging of honey products. *Food Chemistry Advances*, 3, 100491. <https://doi.org/10.1109/JSTARS.2023.3312345>
- Zhang, L., Gao, X., & Sun, D.-W. (2023). Visualization of food internal quality attributes by hyperspectral imaging coupled with multivariate regression and deep learning. *Food Control*, 151, 109884. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2023.109884>
- Zuo, J., Peng, Y., Li, Y., Chen, Y., & Yin, T. (2024). Advancements in Hyperspectral Imaging for Assessing Nutritional Parameters in Muscle Food: Current Research and Future Trends. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 73(1), 85-99. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2025.113994>

Tabla 6
Resumen de los modelos PLSR, PCR Y MLR del espectro completo

Parámetros	MLR				PLSR				PCR			
	Calibración		Predicción		Calibración		Predicción		Calibración		Predicción	
	Rc2	RMSEC	Rp2	RMSEP	Rc2	RMSEC	Rp2	RMSEP	Rc2	RMSEC	Rp2	RMSEP
pH	0,999	0,003	0,712	0,063	0,013	0,111	0,102	0,108	0,263	0,096	0,400	0,090
Dureza	0,952	54,302	0,657	162,296	0,205	221,486	0,311	209,845	0,305	207,173	0,566	181,363
Adhesividad	0,829	10,226	0,728	13,902	0,541	16,738	0,697	15,339	0,526	17,008	0,601	16,453
Elasticidad	0,846	0,074	0,632	0,118	0,544	0,127	0,705	0,117	0,520	0,130	0,612	0,125

Tabla 7
Condición que optimizan la relación de las variables independientes y las variables dependientes

Condición	Tiempo (min)	NaCl/aceite	Agitación (rpm)	Espuma (ml/g muestra)	Solubilidad	Dureza	Rendimiento (%)	pH
Todas la VD	5,95	0,75	718,18	7,25	41,74	479,57	89,77	9,34
Solo Espuma	3,13	0,25	579,58	7,24				
Solo solubilidad	3,05	0,64	400		41,33			
Solo dureza	7	0,25	900			837,42		
Solo rendimiento	3	0,75	900				176,27	
Solo pH	7	0,75	900					9,20