



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE MEDICINA VETERINARIA Y
ZOOTECNIA

PREDICCIÓN DEL PERFIL DETALLADO DE ÁCIDOS GRASOS EN
LECHE POR MEDIO DE ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

TESIS

PARA OBTENER EL TÍTULO DE
MÉDICA VETERINARIA ZOOTECNISTA

PRESENTA

EUNICE ZURIZADAI FLORES RAMÍREZ

Asesores:

MVZ, Ph.D. Toledo Alvarado Hugo Oswaldo

Biólogo, Ph.D. Vázquez Peláez Carlos Gustavo



Ciudad Universitaria, CD. MM 2022.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

DEDICATORIA

En memoria de mi abuelita Malena, que fue mi inspiración para comenzar y continuar con mis estudios.

A mi familia, mis padres Gabriel Flores y Ma. Del Socorro Ramírez, por todo su esfuerzo, sus consejos, su guía y su apoyo incondicional, mis hermanas Dana, Lesly, Gabi, Eli y mi hermano Joel por toda su paciencia y por motivarme.

Por todo su amor, apoyo emocional y compañía, a mi confidente y a las personas especiales que estuvieron conmigo durante este proceso.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a Dios por darme la capacidad para poder concluir esta tesis.

Gracias a mi tutor Hugo Toledo por su paciencia y motivación.

Agradezco a todas las personas que estuvieron involucradas en el proceso de esta tesis. A la Asociación Holstein de México, al Laboratorio de Bromatología de la FMVZ y a las personas que me ayudaron para la obtención y el análisis de los datos.

CONTENIDO

	Página
INDICE DE TABLAS	VI
INDICE DE FIGURAS	VII
INDICE DE ANEXOS	IX
RESUMEN	X
INTRODUCCIÓN	1
Qué es la leche y subproductos.	1
Producción y consumo a nivel mundial.	4
Producción y consumo en México.	6
Sistemas de producción lechera en México.	6
Normatividad en México para evaluar la calidad de la leche.	8
Composición de la leche.	10
Relación de los ácidos grasos con el ambiente y otros fenotipos	16
Cromatografía de gases para la medición de los ácidos grasos.	18
Espectroscopía FTIR para la predicción de la composición de los ácidos grasos.	19
Justificación.	20
Objetivo general	21
Objetivos específicos	21
MATERIAL Y MÉTODOS	22
Muestreo y análisis	22
Calibración de las ecuaciones con los espectros FTIR	22
Validación de resultados	23

RESULTADOS	26
DISCUSIÓN	43
REFERENCIAS	1

INDICE DE TABLAS

Tabla 1. Clasificación de la leche por tipo de consumo (FAO,2020).	2
Tabla 2. Sistemas de producción lechera en México.	7
Tabla 3. Especificaciones higiénico-sanitarias de la leche cruda de vaca.	8
Tabla 4. Especificaciones higiénico-sanitarias de la leche cruda de vaca	9
Tabla 5. Inhibidores en leche	10
Tabla 6. Principales ácidos grasos presentes en la leche de vaca.	15
Tabla 7 Estadísticas descriptivas del perfil detallado de ácidos grasos	42
Tabla 8 Resultados de la validación cruzada	42
Tabla 9 Cuadro comparativo de los resultados de valores predichos.	48

INDICE DE FIGURAS

Figura 1. Desglose del consumo lechero mundial, (OCLA, 2019).....	4
Figura 2. Figura 2 Estructura del glóbulo de grasa en la leche	13
Figura 3. Ácidos grasos durante el ciclo estral.....	18
Figura 4. Diagrama del funcionamiento de un Gas-cromatógrafo.....	19
Figura 5 Diagrama de funcionamiento para la medición de analitos por medio de espectroscopia infrarroja	20
Figura 6 Diseño de la validación cruzada de los modelos.	25
Figura 7 Proceso de toma de muestra, análisis y predicción del perfil detallado de ácidos grasos.	25
Figura 8 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para la grasa, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.	26
Figura 9 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Caproico C6:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	27
Figura 10 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Caprílico C8:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	28
Figura 11 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Cáprico C10.:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	29
Figura 12 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Láurico C:12.:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	30
Figura 13 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Tridecanóico C13:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	31

Figura 14 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Mirístico C14:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	32
Figura 15 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Pentadecánico C15:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	33
Figura 16 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Pentadecenoico C15:1cis10, %, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	34
Figura 17 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Palmítico C16:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	35
Figura 18 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Heptadecanoico C17:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	36
Figura 19 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Heptadecenoico C17:1cis10, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	37
Figura 20 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Esteárico C18:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	38
Figura 21 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Oléico C18:1n9cis, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	39
Figura 22 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Gamma linolénico C18:3n6, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	40
Figura 23 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Araquídico C20:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.....	41

INDICE DE ANEXOS

Anexo 1 Matriz de correlación a color de los valores de los ácidos grasos predichos.	6
Anexo 2 Histograma de la grasa total (%) en la leche obtenida por método de Gerber.	7
Anexo 3 Cromatografía de gases.	7
Anexo 4 Espectroscopía Infrarroja por transformada de Fourier.	8

RESUMEN

FLORES RAMÍREZ EUNICE ZURIZADAI. (bajo la dirección de: MVZ, Ph. D. Hugo Oswaldo Toledo Alvarado y Biólogo Ph D Carlos Gustavo Vázquez Peláez).

La leche bovina es un alimento indispensable en la nutrición humana, ya que es una fuente importante de energía, grasas y proteína. Los ácidos grasos en la leche son componentes que pueden ayudarnos a medir la calidad de la leche, sin embargo, en México existen pocos datos debido a los altos costos de las pruebas y el difícil acceso a ellas. La grasa es un componente que puede ser alterado por factores ambientales y genéticos, es por ello que implementar un programa de mejoramiento genético es una herramienta útil para poder obtener una leche de calidad. En el siguiente trabajo se desarrollaron ecuaciones para el espectro infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR) que es un instrumento de bajo costo, al que se tiene un mayor acceso a partir de los valores observados el cromatógrafo de gases. Se utilizaron 49 muestras recabadas del rancho Pío X y aproximadamente 4000 registros de FTIR obtenidos de la asociación Holstein de México. Se calibraron por medio del software "R" con el modelo estadístico de regresiones lineales bayesianas (BayesB), para validar las ecuaciones se utilizó un sistema de validación cruzada y para evaluar las medias se hicieron pruebas de t para cada par de medias.

Este instrumento permitió conseguir ecuaciones calibradas y validadas con medias estadísticamente iguales para los ácidos grasos: caprónico C6:0, caprílico C8:0, cáprico C:10:0, laúrico C:12:0, tridecanóico C13:0, mirístico C14:0, pentadecenóico C15:1cis10, palmítico C16:0, heptadecanóico C17:0, heptadecenóico C17:1cis10, esteárico C18:0, oléico C18:1n9cis, gamma linolénico C18:3n6 y araquídico C20:0.

INTRODUCCIÓN

Qué es la leche y subproductos.

La definición para el término leche es muy diversa, pues depende de la finalidad a la que se destinará. Una de las más comunes son las que encontramos en libros, además de encontrarse en leyes y manuales, por ejemplo: “Es un alimento primordial segregado por las glándulas mamarias de los mamíferos con la finalidad de nutrir a las crías en su primera fase de vida” (Zavala, 2005).

Entre sus propiedades físicas, está su color opalescente relacionado con el contenido de grasa, desde blanco azulado hasta blanco amarillento. La densidad varía dependiendo de la composición, entre 1.028 y 1.034 kg/L, y un pH de 6.6 a 6.8 siendo ligeramente ácido. (Santillán, Méndez and Vélez, 2014).

La leche de vaca es un alimento indispensable en la nutrición humana, sobre todo en la infancia y en la tercera edad, por su riqueza nutricional y sus propiedades. Además, la leche puede ser transformada en productos de muy diferentes características, en algunos casos son más fáciles de conservar que la materia prima.

Existen diferentes clasificaciones respecto a la forma de consumo de la leche, por ejemplo, la que se expone en la tabla 1, perteneciente a la FAO, la forma de consumo más popular es la leche fluida seguida del queso. En el desglose podemos observar que una de estas categorías es el consumo informal, la FAO define como “informal” cuando la leche es comercializada a través de canales sin concesión de licencias ni reglamentación. (FAO, 2020)

Tabla 1. Clasificación de la leche por tipo de consumo (FAO,2020).

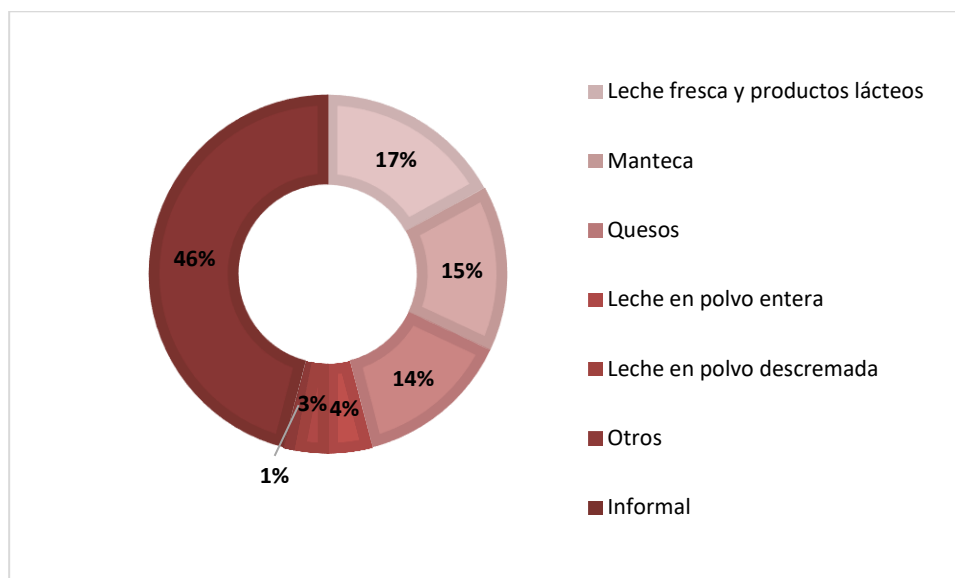
Producto	Subproductos	Descripción
Leche	Leches: pasteurizadas, desnatada, normalizada, reconstituida, de larga conservación, y enriquecida.	Es el producto lácteo más consumido. Se obtiene por ordeño, dando el tratamiento particular en cada caso.
Leche fermentada	Yogur, kumys, dahi, laban, tarag, ayran, kurut y kéfir.	Se obtiene de la fermentación de la leche utilizando microorganismos adecuados para llegar a un nivel adecuado de acidez.
Leche en polvo		Se obtiene de la deshidratación de la leche, generalmente se presenta en polvo o gránulos.
Leche condensada	Leche azucarada.	Se obtiene de la eliminación parcial de agua de leche entera o desnatada y concentración mediante un tratamiento térmico.
Leche evaporada		Se obtienen de la eliminación parcial de agua de leche entera o desnatada.
Nata	Nata recombinada, reconstituida, nata para untar o batir, envasada a presión, fermentada, acidificada.	Es la parte de la leche que es comparativamente rica en grasas, se obtiene descremando o centrifugando la leche.
Mantequilla	Ghee (mantequilla clarificada)	Son productos derivados de la leche, es el batido de la leche o la nata- El ghee se obtiene eliminando el agua de la mantequilla y tiene un tiempo de conservación muy largo.

Queso	Muchas variedades	Son obtenidos mediante la coagulación de la caseína que se separa del suero.
Suero	Queso de suero, bebidas a base de suero, bebidas de suero fermentado, pasta de suero, suero en polvo.	Es la parte líquida de la leche que queda después de la cuajada en la fabricación del queso. Se utiliza para fabricar lactosa, pasta de suero y suero en polvo.

En México, las presentaciones más comunes son: la leche fluida, el queso, la mantequilla, la leche en polvo, descremada y entera. (SAGARPA/SIAP, 2018) En la NOM-155-SCOFI-2012 podemos ver la clasificación, además de establecer las especificaciones fisicoquímicas de la leche; la clasificación se realiza dependiendo de: Tipo de grasa (Entera, semidescremada, parcialmente descremada), proceso primario (Rehidratada, reconstituida o deslactosada), el proceso secundario (Pasteurizado, ultrapasteurizado, microfiltrada ultra, evaporada, condensada, azucarada, deshidratada o en polvo, concentrada) y por último si se agrega algún sabor. (Secretaría de Economía, 2012)

En la figura 1 se muestra una gráfica de la OCLA (“Observatorio de la cadena Láctea Argentina”), que es una organización que se encarga de realizar análisis estadísticos con respecto a productos lácteos, donde se indica la forma en la que se consume la leche mundialmente y el porcentaje que ocupa cada una. (OCLA, 2019)

Figura 1. Desglose del consumo lechero mundial, (OCLA, 2019)



Producción y consumo a nivel mundial.

En el mundo, la leche que se produce es en 81.4% proveniente de la vaca. La producción de leche de vaca a nivel mundial ha ido en aumento en los últimos

años, se estimó que de 2010-2018 la producción aumentó 1.9% anualmente, solamente en el 2018 se produjeron 10.527 millones de litros de leche.

En el 2018, los 10 bloques/países con el 74.4% de producción de leche a nivel mundial son: la Unión Europea con 166.7 miles de millones de kgs., Estados Unidos con 98.7 mm de kgs, India con 90.2 mm de kgs, Brasil con 34.7 mm de kgs, China con 30.8 mm de kgs, Rusia con 30.6 mm de kgs, Nueva Zelanda con 22.2 mm de kgs, Turquía con 20 mm de kgs, Pakistán con 17.4 mm de kgs y México con 12.4 mm de kgs. (OCLA, 2019)

Se estima que más de 750 millones de personas en todo el mundo se dedican a la producción de leche. En países en desarrollo el 80% de la leche producida está en manos de los pequeños productores, lo que contribuye a la seguridad alimentaria y medios de vida, siendo una importante fuente de ingresos en efectivo. (FAO, 2020)

A pesar de que la producción ha ido en aumento, el consumo per cápita está por debajo de la recomendación FAO-OMS, esto se debe a que la repartición de los alimentos no es equitativa, el consumo de leche y sus subproductos es mayor en los países desarrollados, por ejemplo: en países de la Unión Europea el consumo de leche supera los 300 litros persona/año y el promedio en países desarrollados el consumo promedio es de 240 litros al año; en países en desarrollo el promedio es de 80 litros, existiendo países que se encuentran por debajo de los 50 litros de leche al año (OCLA, 2019).

Aparentemente, no existen consecuencias nutricionales asociadas con un nulo o bajo consumo de leche de vaca, siempre y cuando exista una alimentación variada y equilibrada. Sin embargo, debido a sus características nutricionales, es recomendable incluir la leche y sus derivados en la dieta. Los únicos casos donde no es recomendable el consumo es el en caso de personas con alergias a las proteínas y en caso de padecer hipolactasia. (Uscanga-Domínguez *et al.*, 2019).

Producción y consumo en México.

En 2018, México ocupó el 8ª lugar en producción mundial de leche produciendo 12, 008,239 miles de toneladas, es decir el 2% de la producción mundial. Siendo Jalisco el principal productor. (SADER and SIAP, 2018)

México importa anualmente 2, 011 millones de dólares en productos lácteos, esto es 33.91% de la producción total. Los productos importados son: leche descremada en polvo (34%), queso rallado (9%), grasa butírica (8%), queso parmesano (7%), otros quesos (6%), caseína (5%), otros (31%). (Canilec, 2018) Creando un déficit comercial de 1,289 millones de dólares.

Sistemas de producción lechera en México.

Existen básicamente cuatro sistemas para la producción de leche: el especializado, semi-especializado, familiar y el de doble propósito. A continuación, se muestra en la tabla 2 una explicación de cada uno de estos.

Tabla 2. Sistemas de producción lechera en México.

Sistema	Tipo de ganado	Nivel tecnológico	Estados
Especializado	Altas productoras de raza Holstein, Suizo, Jersey	Alto. Ordeñadoras mecánicas, tanques enfriadores, manejo de establos.	50% producción total. Jalisco, Durango, Coahuila, Guanajuato, Aguascalientes, Chihuahua, Estado de México, San Luis Potosí, Hidalgo, Querétaro y Baja California.
Semi-especializado	Medianas productoras de Holstein y suizo.	Medio. Ordeño manual, sin equipo de refrigeración, manejo semiestabulado,	20% de la producción total. Baja California, Baja California sur, Colima, Chihuahua, CDMX, Hidalgo, Jalisco, Estado de México, Michoacán, Morelos, Puebla, Sinaloa, Sonora, Tlaxcala y Zacatecas.
Familiar	Cruzas de Raza Holstein y Suizo con cruzas de buena calidad	Bajo. Instalaciones rudimentarias, con predominio de ordeña manual, el ganado está en pastoreo y su producción se destina directamente a pequeñas poblaciones y a autoconsumo	21% de la producción total. Jalisco, Estado de México, Michoacán, Sonora y en menor grado en Aguascalientes, Baja California, Coahuila, Chihuahua, CDMX, Durango y Nuevo León.
Doble propósito	Razas cebuinas y cruzas con Holstein Suizo, y Simmental	Se produce carne y leche instalaciones rústicas y en su mayoría ordeño manual, están principalmente en pastoreo	9% de la producción total del país Chiapas, Veracruz, Jalisco, Guerrero, Tabasco, Nayarit, San Luis Potosí y Tamaulipas.

Normatividad en México para evaluar la calidad de la leche.

En México existen normas para poder evaluar la calidad de la leche: NOM-251-SSA1-2009, NOM-155-SCFI-2012, NOM-243-SSA1-2010 México Calidad Suprema, NMX-F-700-COFOCALEC-2004 y la NMX-F-708-COFOCALEC-2004, esta última considerada de gran importancia para realizar las evaluaciones de calidad de la leche en establos lecheros. La tabla 3, 4 y 5 hacen una comparación de los parámetros y rangos evaluados en algunas de las normas anteriores, también se explica brevemente a qué se refieren estos parámetros. (Blanco Ochoa, 2018).

Tabla 3. Especificaciones higiénico-sanitarias de la leche cruda de vaca.

Parámetro	NOM-155-SCFI-2003	NMX-700-COFOCALEC-2004	Calidad Suprem,2007
Acidez (como ácido láctico g/L)	1.3 a 1.7	1.3 a 1.6	1.35 a 1.45
Prueba del alcohol al 72% v/w		Negativa	Negativa
Materia extraña		Libre	Libre
Indicadores bacterianos		Negativo	Negativo
Aflatoxina M1 mg/kg		0.5	0.5
Cuenta total de Bacterias Mesofílicas Aerobias (UFC/ml)		≤ 100,000 101,000 a 300,000 301,000 a 599,000 600,000 a 1,200,000	35,000 máx
Conteo de Células Somáticas (CCS/ml)		≤4000,000 401,000 a 500,000 501,000 a 749,000 800,000 a 1,000,000	≤ 400,000

La *acidez* de la leche. Es la suma de la acidez natural más la acidez desarrollada, donde la acidez natural está dada por caseínas minerales, ácidos orgánicos y

fosfatos, y la acidez desarrollada, es el ácido láctico formado a partir de la lactosa por crecimiento microbiano. Para medir la acidez titulable se lleva a cabo la prueba de alcohol.

Las *aflatoxinas* (producidas por *Aspergillus flavus*) indican la presencia de micotoxinas en la leche y productos lácteos. Es un indicador del consumo de alimentos contaminados con este hongo, se puede determinar la presencia de estas por la prueba de ELISA.

Cuenta total de Bacterias. Esta depende de la limpieza de los utensilios utilizados durante la ordeña, almacenamiento y transporte de la leche.

Cuenta de células cromáticas. Se utiliza como indicador de la calidad de la leche y de la salud de las ubres del hato.

Tabla 4. Especificaciones higiénico-sanitarias de la leche cruda de vaca

Parámetro	NOM-155-SCFI-2003	NMX-700-COFOCALEC-2004	Calidad Suprem,2007
Densidad a 15°C g/ml	1.0299 min	1.0295 min	1.030
Grasa butírica g/L	30 min	≥32 31 min 30 min	
Proteínas totales g/L	30 min	≥31 30 a 30.9 min 28 a 29.9 min	
Lactosa g/L	43 a 50	43 a 50	
Sólidos grasos g/L	no 83 min	83 min	
Punto Crioscópico (°H)	Entre -0.510 (-0,530) y -0.536 (-0.560)	-0.515 (-0,535) y -0.536 (-0.560)	-0.515 (-0,535) y -0.536 (-0.560)
Caseína % con relación a proteína total.	21 min		75 min

Densidad. Permite detectar adulteraciones como adición de agua. Cuando hay gran cantidad de grasa la densidad tiende a disminuir. Los inhibidores en la leche son un indicador de la presencia de: derivados clorados, sales cuaternarias de amonio, oxidantes, formaldehído, antibióticos, desinfectantes (tabla 5).

Tabla 5. Inhibidores en leche

Inhibidores	NOM-243-SSA1-210
Derivados clorados	Negativo
Sales cuaternarias de amonio	Negativo
Oxidantes	Negativo
Formaldehído	Negativo
Antibióticos	Negativo

Composición de la leche.

En la leche encontramos diferentes componentes, donde el principal es el agua que abarca entre 82% y 82.5% (Gómez y Oswaldo, 2005), proteínas, lactosa, grasa, vitaminas, minerales y enzimas. La diferencia entre ellos, por su tamaño y solubilidad, da lugar a una parte en estado coloidal (lípidos, proteínas y enzimas) y otra una solución verdadera (sales, lactosa y vitaminas hidrosolubles). (Zavala, 2005)

Agua

Es el medio de transporte de los componentes sólidos de la leche, se encuentra de dos formas: el agua libre siendo la de mayor cantidad, donde se mantiene en solución las sales y lactosa, es la que sale en el suero después de la cuajada; y el agua de enlace que está formada por la cohesión de los componentes no solubles, es decir, se encuentra en la superficie de estos compuestos, por lo tanto, su eliminación es difícil. (Escuela de ciencias UNAD, 2010)

Proteínas y enzimas

La fracción proteica se divide en proteínas del suero y caseínas, ambas son consideradas de alto valor biológico. (Uscanga-Domínguez *et al.*, 2019)

Caseína: Es una fosfo-proteína que constituye del 78 al 80% de proteína de toda la leche. Está asociada a un complejo de calcio y fósforo, se coagula por acción de los ácidos del cuajo o el alcohol, (Escuela de ciencias UNAD, 2010) a esta coagulación se le denomina cuajada, que, al ser tratada con calor, diferente pH, y concentraciones de sal se convierte en queso. (Zavala, 2005). Hay tres tipos: α , β y γ , donde la caseína- α es la más importante; es relativamente estable al

calor (Gómez and Oswaldo, 2005), además, son acarreadoras de calcio y fósforo (Uscanga-Domínguez *et al.*, 2019)

Proteínas del suero: Las proteínas del suero son:

- Albúmina. - Es la proteína que sigue en cantidad a la caseína con aproximadamente 0.5%. Se desnaturalizan con facilidad. (Gómez and Oswaldo, 2005).
- Alfa-lactoalbúmina
- Beta-lactoalbúmina. - Es un acarreador importante de retinol y tiene acción fijadora de ácidos grasos y capacidad antioxidante.
- Globulinas. - Son proteínas de alto peso molecular, se encuentran preformadas en la sangre, son las que más fluctuaciones experimentan desde 9-16% en el calostro y apenas unas milésimas en las últimas etapas de lactancia. Dentro de estas hay inmunoglobulinas que son anticuerpos, su función es neutralizar y ayudar a destruir bacterias y partículas extrañas. (Gómez and Oswaldo, 2005)
- Lactoferrina. - es importante para la absorción de hierro, con un efecto antioxidante y anticarcinógeno. (Uscanga-Domínguez *et al.*, 2019)

Las enzimas pueden llegar a la leche de dos maneras: por medio de la sangre o por medio de las células corporales, por su mecanismo de acción se clasifican en:

- Hidrolasas. Se caracterizan por un desdoblamiento hidrolítico. A este grupo pertenecen las esterasas (hay fosfatasas ácidas y alcalinas las alcalinas se encuentra principalmente en la membrana proteica de los glóbulos grasos y se inactiva al someter la leche a procesos de calentamiento).
- Lipasas. Se desnaturalizan a temperaturas mayores a 60°, por lo tanto, no son evidenciables después de la pasteurización.
- Carbohidratasas y proteasas.

- Oxido-reductasas: las más importantes son la catalasa y la peroxidasa, que se utilizan como indicadores de la calidad microbiológica de la leche. (Gómez and Oswaldo, 2005)

Carbohidratos

El carbohidrato principal de la leche es la lactosa representa el 97.5 % de los glúcidos en la leche (Escuela de ciencias UNAD, 2010), es un disacárido constituido por glucosa y galactosa. La glucosa llega a la ubre por la sangre. Es el principal agente osmótico de la leche, por lo que permite el transporte de agua desde la sangre. (Zavala, 2005). También pueden encontrarse otros glúcidos nitrogenados como L-glucosamina y N-acetilada.

Vitaminas

La leche contiene vitaminas como la A, D, E, K, B1, B2, B6, B12, C, carotenos, nicotinamida, biotina y ácido fólico, pero la presencia de estas depende de distintos factores, como: etapa productiva, época del año, tiempo atmosférico, ambiente y alimentación, por lo tanto, las cantidades de las vitaminas varían de forma constante. (Gómez and Oswaldo, 2005)

Minerales Cenizas y sales.

La leche de vaca contiene: sodio, potasio, magnesio, calcio, manganeso, hierro, cobalto, cobre, fósforo, fluoruros y yoduros. Además, se reconoce la presencia de otros en cantidades vestigiales, como: el aluminio, molibdeno, y plata. Se pueden encontrar en la membrana de los glóbulos grasos principalmente concentraciones de calcio, cobre, hierro, magnesio, manganeso, fósforo y zinc, también el calcio se encuentra en su mayor parte ligado a la caseína (Gómez y Oswaldo, 2005)

Lípidos.

La grasa láctea está presente como glóbulos microscópicos en una emulsión de lípidos y agua. (García, Montiel and Borderas, 2014). La grasa en la leche está formada por miles de glóbulos (Figura 2), que si se deja a la leche en reposo ascienden y forman una capa llamada nata. (Zavala, 2005). Estos glóbulos, formados en los alveolos del retículo endoplasmático, están compuestos por un

núcleo hecho de colesterol, vitaminas y en un 99.8% de triglicéridos (Juárez Dávila, 2017), y están envueltos en una capa protéica formada de fosfolípidos, proteínas como butirofilina y xantina oxidasa (Escuela de ciencias UNAD, 2010), Los lípidos son principal componente energético de la leche.

Figura 2. Estructura del glóbulo de grasa en la leche



Gran parte de los triglicéridos contiene entre 4 y 18 átomos de carbono. El resto se encuentran como mono y diglicéridos, en la leche bovina se encuentran estos tres grupos (Juárez Dávila, 2017):

- Fosfoglicéridos. Qué son los más abundantes.
- El segundo grupo son los esfingolípidos y glucolípidos.
- Ésteres de colesterol.

Un componente importante de la estructura de los lípidos son los ácidos grasos, que es una biomolécula hidrocarbonada con un grupo carboxilo en un extremo y en el otro extremo, átomos de hidrógeno (H₃C-), (Gonzales Gonzales, 2013). Se pueden clasificar por:

- La cantidad de carbonos:

De cadena corta (menos de 6 átomos de carbono), de cadena media (entre 6 y 12 átomos de carbono) y de cadena larga (más de 12 átomos de carbono). (Gonzales Gonzales, 2013)

- Enlaces Cis y Trans

Cis, Son aquellos que en donde los átomos de C contiguos están orientados hacia el mismo lado y generan un dobléz en la cadena del hidrocarburo. (Gonzales Gonzales, 2013)

Trans, en esta configuración los segmentos están orientados en posiciones opuestas, manteniendo la molécula recta, esta configuración es más rígida y ocupa menos espacio. (Barrera-Arellano, 1993)

- Saturados, insaturados, monoinsaturados y poliinsaturados.

Saturados, son ácidos carboxílicos de cadena larga y sin dobles enlaces; insaturados, poseen enlaces dobles separados por un grupo metileno (-CH₂-) generalmente y dependiendo la orientación en el espacio de estos dobles enlaces pueden clasificarse en *cis* o *trans* (Ballesteros-Vásquez *et al.*, 2012), el lugar en donde se indica el doble enlace está señalado con la letra griega omega (ω) seguida de un número -3, -5, -6, el número indica en qué enlace se encuentra el doble enlace o la insaturación, contando desde el final de la cadena; monoinsaturados estos poseen únicamente un doble enlace entre carbonos y poliinsaturados, tienen dobles enlaces separados por un metileno, se pueden dividir en 12 familias diferentes y los dobles enlaces pueden estar desde la posición n-1 hasta la n-12 y tienen configuración *cis*. (Gonzales Gonzales, 2013)

Ácidos grasos en la leche

Los ácidos grasos son cadenas hidrocarbonadas con longitud variable, con un grupo carboxilo en su extremo. Son constituyentes de triglicéridos y otros lípidos complejos, también pueden hallarse de forma libre; son una importante fuente de energía.

Los ácidos grasos presentes en la leche se clasifican en un 70% como saturados, 25% monoinsaturados, y 5% poliinsaturados, aunque estos porcentajes pueden verse afectados por factores ambientales y fenotípicos. (Juárez Dávila, 2017)

Se han encontrado aproximadamente 416 ácidos grasos diferentes en la fracción lipídica de la leche, la mayoría están en cantidades menores a 0.01% y solo unos pocos arriba del 1%, estos son: butírico, caproico caprílico, cáprico, láurico, mirístico, palmítico, esteárico, oleico, linoleico, linolénico, araquidónico (García, Montiel and Borderas, 2014) (Tabla 6).

Tabla 6. Principales ácidos grasos presentes en la leche de vaca.

Nombre común	Nomenclatura química	% ¹	Número de átomos			Enlaces dobles	Estado*
			C	H	O		
Ácidos grasos saturados							
Butírico	Butanóico	4.5	4	8	2	0	Líquido
Caproico	Hexanóico	2.2	6	12	2	0	
Caprílico	Octanóico	2.5	8	16	2	0	
Cáprico	Decanóico	3.8	10	20	2	0	Sólido
Láurico	Dodecanóico	5	12	24	2	0	
Mirístico	Tetradecanoico	11	14	28	2	0	
Palmítico	Hexadecanoico	25	16	32	2	0	
Esteárico	Octadecanoico	7	18	36	2	0	
Ácidos grasos monoinsaturados							
Oleico	Octadecanoico cis-9	3	18	34	2	1	
Ácidos grasos poliinsaturados							
Linoleico	Octadecanoico cos-9,12	2	18	32	2	2	Líquido
Linolénico	Octadecatrienoico cis-6,9,12	0.7	18	30	2	3	
Araquidónico	Eicosatetranóico cis-5,8,11,14	0.7	20	32	2	4	

¹Porcentaje aproximado. (Juárez Dávila, 2017)

*Estado a temperatura ambiente

Los ácidos grasos se sintetizan a partir de:

La dieta y el metabolismo ruminal. Por medio de la lipólisis donde diferentes cepas bacterianas del rumen hidrolizan los lípidos para obtener ácidos grasos, glicerol y galactosa a partir de los triglicéridos obtenidos en la dieta (Vargas-bello-pérez and Garnsworthy, 2013). El siguiente paso es la biohidrogenación, en donde se reduce el número de enlaces para transformar ácidos grasos insaturados a ácidos grasos saturados.

Reservas corporales que dan lugar a ácidos no esterificados, principalmente después del parto. (Juárez Dávila, 2017). Esto se debe a que existe un balance energético negativo, es decir, la cantidad de alimento que la vaca consume no alcanza para cubrir los requerimientos energéticos para la vaca y la producción de leche, por lo que existe una movilización de grasas de los tejidos. (Contreras and Phil, 1998)

En glándula mamaria por síntesis de *novo*, donde se sintetizan principalmente ácidos grasos de cadena corta (Juárez Dávila, 2017). A partir de precursores provenientes de la sangre. La síntesis de *novo* es inhibida por grandes cantidades de ácidos grasos de cadena larga.

Relación de los ácidos grasos con el ambiente y otros fenotipos

La fracción lipídica en leche de vaca es susceptible a presentar cambios en su composición química, debido a factores intrínsecos como: el estado de lactancia, raza (Gómez and Oswaldo, 2005), capacidad metabólica de cada vaca, interacción dieta-genotipo en la lipogénesis (García, Montiel and Borderas, 2014) y fase del ciclo estral en la que se encuentran; dentro de los factores extrínsecos están la nutrición y ambiente.

La alimentación en pastoreo y estabulación.

Algunos de los sistemas de producción manejan un sistema de alimentación mixto, es decir, pastoreo durante el verano, y la alimentación en el establo durante la época de invierno, en la primera se observa una diferencia significativa en la cantidad de ácidos grasos, ya que, durante el verano, cuando las vacas

están pastando, los ácidos grasos saturados son menos que en invierno donde generalmente las vacas se encuentran en el establo. (Lindmark Månsson, 2008)

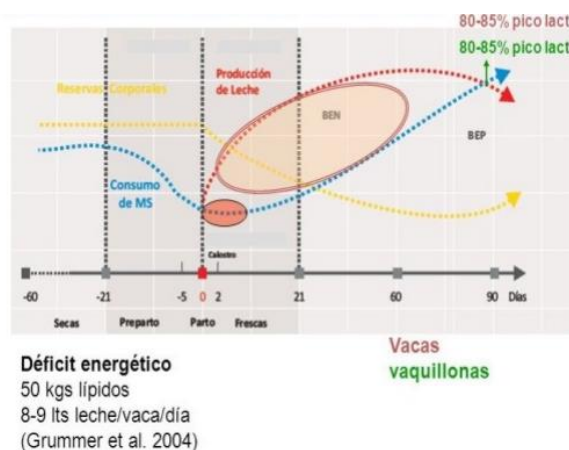
El postparto y la fertilidad.

Existe una relación entre la fertilidad y la cantidad de ácidos grasos en la lactancia temprana, se ha estudiado que, a mayor contenido de ácidos grasos de cadena larga en la lactación temprana, existe una disminución en la fertilidad (Bastin *et al.*, 2016).

La fase de lactación.

Al principio de la lactación la cantidad de ácidos grasos de cadena corta son menores debido a que se inhibe la síntesis de *novo* en el tejido de la glándula mamaria debido a la presencia de ácidos grasos de cadena larga (García, Montiel and Borderas, 2014), conforme va avanzando el tiempo aumentan los ácidos de cadena corta y disminuyendo los de cadena larga.

Durante la lactación temprana, el balance energético negativo (Figura 3), se provoca una movilización de reservas grasas, lo que aumenta el porcentaje de grasa en leche (Bastin *et al.*, 2016)

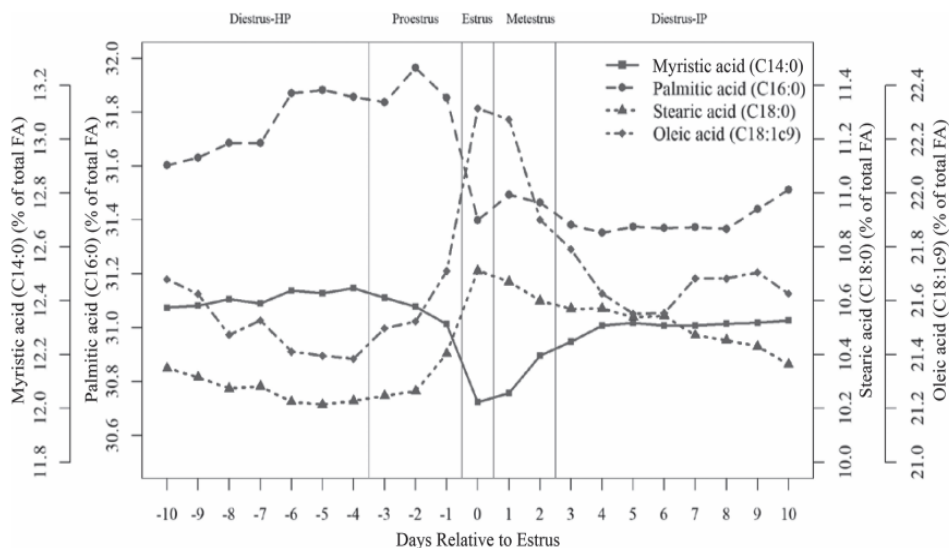


Adaptado de (Castaño and Pérez, 2016)

La fase del ciclo estral

Los valores de los ácidos grasos varían dependiendo la fase del ciclo estral en el que se encuentren, muy probablemente inducido por los cambios hormonales y de comportamiento de las vacas durante el ciclo estral (rumia y tiempo de actividad) en la figura 3 podemos observar los principales ácidos grasos (ácido mirístico (14: 0), ácido palmítico (16: 0), ácido esteárico (18: 0) y ácido oleico (18: 1 cis-9).

Figura 4. Ácidos grasos durante el ciclo estral.



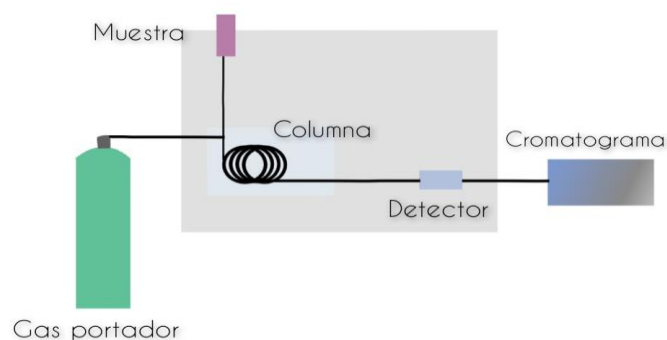
Principales ácidos grasos. Acido mirístico (14: 0), ácido palmítico (16: 0), ácido esteárico (18: 0) y ácido oleico (18: 1 cis-9). (Toledo-Alvarado *et al.*, 2018)

Cromatografía de gases para la medición de los ácidos grasos.

Debido a la variabilidad en la cantidad de grasa que podemos encontrar en la leche es importante contar con métodos previamente validados para identificarlos, una herramienta confiable es el gas cromatógrafo. (Schettino *et al.*, 2011)

En la cromatografía se requiere la derivatización de los ácidos grasos, que es la modificación química de los ácidos grasos para formar ésteres de metilo, este proceso mejora la sensibilidad, lo que hace de este método algo más preciso y exacto. Sin embargo, este procedimiento requiere tiempo, además de ocupar preparaciones y químicos lo que hace que esta prueba sea cara. (Hernández, 2010) (Anexo 3)

Figura 5. Diagrama del funcionamiento de un Gas-cromatógrafo.

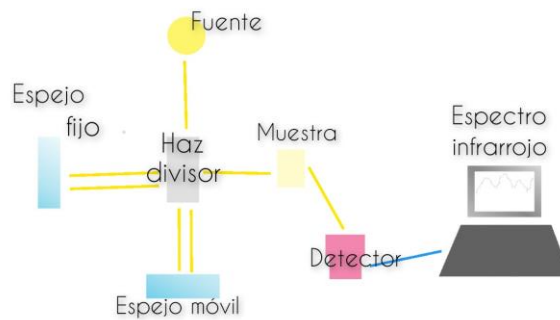


Espectroscopía FTIR para la predicción de la composición de los ácidos grasos.

La espectroscopia infrarroja estudia la interacción entre la radiación electromagnética infrarroja y la materia, entre las distintas técnicas de espectroscopía infrarroja para realizar análisis se encuentra el espectrofotómetro Infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR).

La técnica de espectroscopia FTIR es una herramienta utilizada para la investigación, control o laboratorios industriales, al ser una tecnología rápida, barata, sensible y no destructiva se ha utilizado para analizar componentes alimenticios, por ejemplo, aceites comestibles, mayonesa, margarina, productos de panificación, leche, carne de cerdo, entre otras (Hernández, 2010). (Anexo 4)

Figura 6 Diagrama de funcionamiento para la medición de analitos por medio de espectroscopia infrarroja



Justificación.

Actualmente en México existen pocos datos que pueden ayudarnos a evaluar la calidad de los ácidos grasos en la leche, esto se debe principalmente a que las pruebas con las que pueden hacerse estas mediciones son caras y poco accesibles para los productores, pero la obtención y uso de ecuaciones podría ayudar a disminuir los costos de evaluación de la calidad de la leche y aumentar el número de fenotipos (ácidos grasos) que se tienen para dicha evaluación.

Tener acceso a estos fenotipos nos ayuda a conocer mejor cual es la calidad de la leche en México, para implementar medidas que nos permitan mejorar las características de la leche por medio de programas de mejoramiento genético.

El desarrollo de las ecuaciones para el espectro FTIR a partir del perfil de ácidos grasos detallado utilizando gas cromatografía ayudará a disminuir los costos de evaluación de la calidad de la leche y aumentar el número de fenotipos que se tienen para evaluaciones genéticas y fenotípicas.

Objetivo general

El objetivo de este trabajo es predecir el perfil detallado de ácidos grasos en vacas Holstein de México, por medio de valores obtenidos por FTIR, desarrollando ecuaciones calibradas a partir de fenotipos medidos en laboratorio por gas-cromatografía, para obtener valores fenotípicos y genotípicos útiles para poder conocer y mejorar la calidad de la leche por medio de programas de mejoramiento genético.

Objetivos específicos

- Obtener el registro de las vacas Holstein que cuenten con la siguiente información: producción láctea, tarjeta de reproducción, información de la composición de la leche obtenida por espectros FTIR, información genotípica y genotipos.
- Muestrear vacas que cuenten con su registro completo y obtener el perfil detallado de ácidos grasos por medio de gas- cromatografía en laboratorio.
- Obtener las ecuaciones calibradas a partir de los datos con los que cuentan en la Asociación Holstein de México y los análisis del laboratorio.

MATERIAL Y MÉTODOS

Muestreo y análisis

Se obtuvieron 101 muestras de leche del Rancho Pio X ubicado en Obrajuelos, Guanajuato, bajo un sistema de estabulación, especializado en la producción de leche que se encuentra en el registro de la asociación Holstein de México. Los criterios que se utilizaron para la selección de muestras fueron: muestras proceden de vacas con registro de producción láctea, tarjeta de reproducción, información de la composición de la leche obtenida por espectros FTIR (Anexo 4), información genotípica y genotipos.

Para las muestras seleccionadas se obtuvo el perfil detallado de ácidos grasos usando cromatografía de gases bidimensional (Anexo 3), además se obtuvo la cantidad de grasa total de la leche por medio del método Gerber (Subsecretaría de Salubridad *et al.*, 1982), los análisis se realizaron en el laboratorio de Bromatología de la FMVZ. Otra parte de la muestra fue llevada a la Asociación Holstein de México donde se realizan los análisis por medio de FTIR.

A partir de los datos obtenidos del gas cromatógrafo, del espectro y los registros de la producción se calibraron las ecuaciones en el software "R" con el programa Bayes B y se verificaron por medio de validación cruzada.

Calibración de las ecuaciones con los espectros FTIR

Utilizando los ácidos grasos medidos en laboratorio se calibraron las ecuaciones de predicción usando los espectros-FTIR y se usaron regresiones lineares Bayesianas (Bayes-B), con un mínimo 100,000 iteraciones, se descartaron las primeras 20,000 cadenas.

A los espectros FTIR se les realizó un análisis de componentes principales, a partir de los primeros 5 componentes principales, se calcularon las distancias de Mahalanobis, además de sus niveles de probabilidad con una distribución de Ji-Cuadrada a partir de la función gamma incompleta con 5 grados de libertad, con ello se removieron espectros-FTIR anormales con una probabilidad menor a 0.01.

Para calibrar las ecuaciones utilizó el software “R” con el modelo estadístico de regresiones lineales Bayesianas (Bayes B), con la librería BGLR. *Citar la librería Modelos Bayesianos. El modelo lineal para la regresión de covarianzas estandarizadas de los espectros es:

$$y_i = \beta_0 \sum_{j=1}^n x_{ij} \beta_j + \varepsilon_i$$

Donde:

β_0 = Es el intercepto

x_{ij} =Espectro FTIR estandarizado

β_j = Efecto de cada longitud de onda

ε_i = Residual

El modelo Bayes B se basa en una regresión multivariada con información de priors $p(\beta_j|\Omega)$ que son una mezcla de un punto de masa cero y una densidad de t-escalada. (Pérez and de los Campos, 2014)

Validación de resultados

Para validar las ecuaciones se utilizó un sistema de validación cruzada (figura 7) dividiendo los datos en 10 subgrupos aleatoriamente (10-fold CV), se realizó calibración (9 grupos) y predicción (1 grupo) cada vez. Se estimó el coeficiente de correlación (R), coeficiente de determinación (R^2) y el RMSE, además se evaluó la confiabilidad y precisión de las predicciones.

Se realizó prueba de hipótesis para medias independientes para corroborar la igualdad de las medias entre valores observados y predichos, mediante la función *t.test()*, con una significancia de 0.05, planteando las siguientes hipótesis:

$H_0: \mu_1 = \mu_2$

$H_a: \mu_1 \neq \mu_2$

Donde μ_1 es la media de los valores observados en laboratorio para cada fenotipo y μ_2 es la media de los valores predichos para cada fenotipo.

La figura 8 es un resumen de este proceso.

Figura 7 Diseño de la validación cruzada de los modelos.

	Modelo ¹										
Observación	1°	2°	3°	4°	5°	6°	7°	8°	9°	10°	n
1	P	1	1	1	1	1	1	1	1	1	n
2	2	P	2	2	2	2	2	2	2	2	n
3	3	3	P	3	3	3	3	3	3	3	n
4	4	4	4	P	4	4	4	4	4	4	n
5	5	5	5	5	P	5	5	5	5	5	n
6	6	6	6	6	6	P	6	6	6	6	n
7	7	7	7	7	7	7	P	7	7	7	n
8	8	8	8	8	8	8	8	P	8	8	n
9	9	9	9	9	9	9	9	9	P	9	n
10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	P	n
n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	P _n

Validación cruzada con n folds, P es la partición predicha, el resto de las observaciones son usadas para calibrar el modelo (en rosa).

Figura 8. Proceso de toma de muestra, análisis y predicción del perfil detallado de ácidos grasos.



Se toma la muestra de leche y se envía una parte al laboratorio de bromatología de la FMVZ para realizar el cálculo de la grasa total (Método de Gerber) y obtener el perfil detallado de ácidos grasos por medio de gas cromatografía, otra parte de la muestra fue llevada a la Asociación Holstein de México donde se realizan los análisis por medio de FTIR y se encuentra la información de producción de las vacas. A partir de los datos obtenidos del gas cromatógrafo, del espectro y los registros de la producción se calibran las ecuaciones en el software "R" con el programa Bayes B y se verifican por medio de validación cruzada.

RESULTADOS

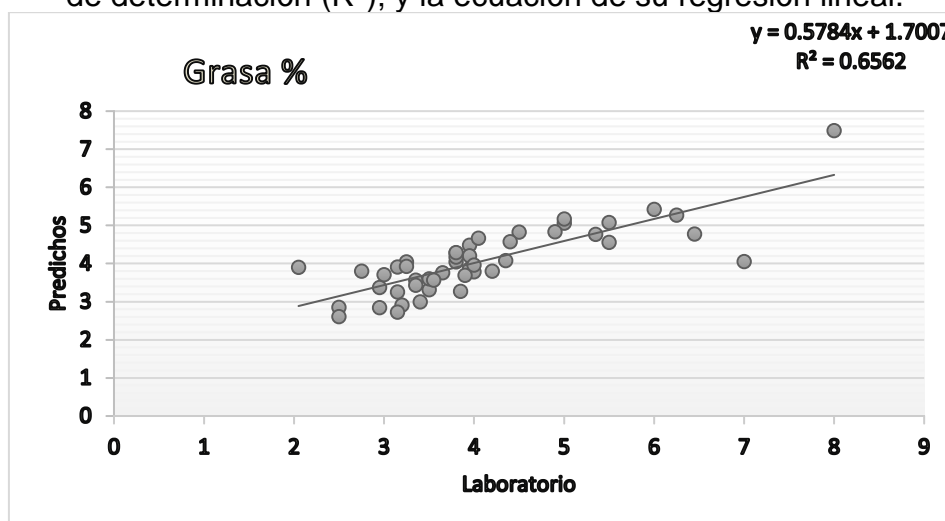
Resultados de los valores predichos vs los observados por método Gerber.

Las estadísticas para evaluar la validación cruzada para cada fenotipo fueron: Raíz del error medio cuadrático ($REMC_{VC}$), Coeficiente de determinación (R^2_{VC}) y Coeficiente de correlación (r). Anexo 1

Grasa

Para el fenotipo de grasa los valores observados fueron: un promedio de $4.25 \pm 1.21\%$, un rango de 6.5 y un coeficiente de variación de 28.5 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $4.15 \pm 1.08\%$, con un rango de 5.95 y un coeficiente de variación de 26.02 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.94$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el porcentaje de grasa se obtuvo un $REMC_{VC} = 0.71$, un $R^2_{VC} = 0.66$ (Figura 8) y una $r = 0.81$. (Tabla 8)

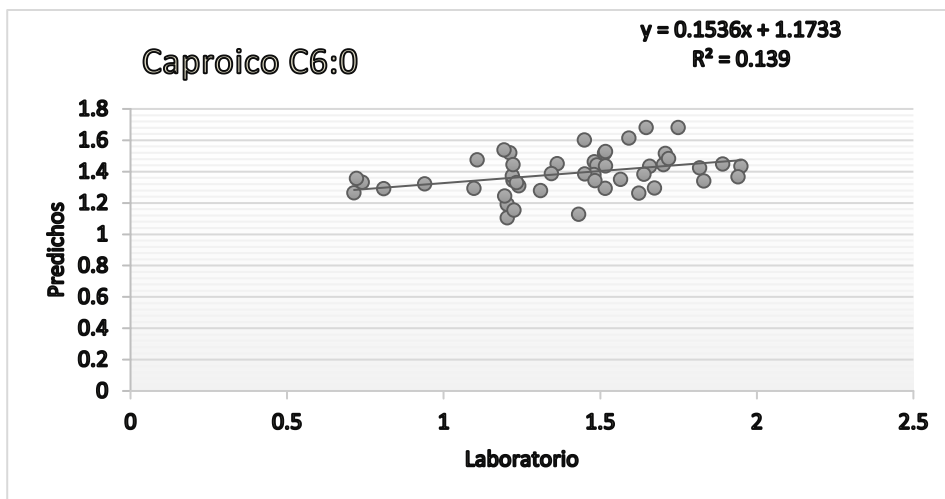
Figura 9 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para la grasa, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



Resultados de los valores predichos vs los observados por gas-cromatografía.

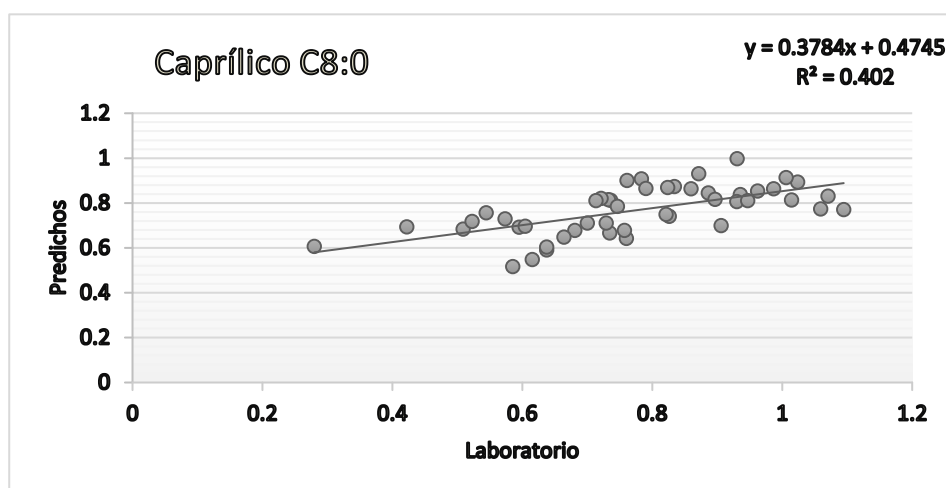
Para el fenotipo de C:6:0 (caprónico) los valores observados fueron: un promedio de $1.41 \pm 0.31\%$, un rango de 1.24 y un coeficiente de variación de 22.14 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $1.39 \pm 0.13\%$, con un rango de 0.57 y un coeficiente de variación de 22.42(Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.72$) (Tabla 9) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido caprónico C:6:0 se obtuvo: $REMC_{VC}$ de 0.29 un R^2_{VC} de 0.14 (Figura 9) y una r de 0.4. (Tabla 8)

Figura 10 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Caproico C6:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



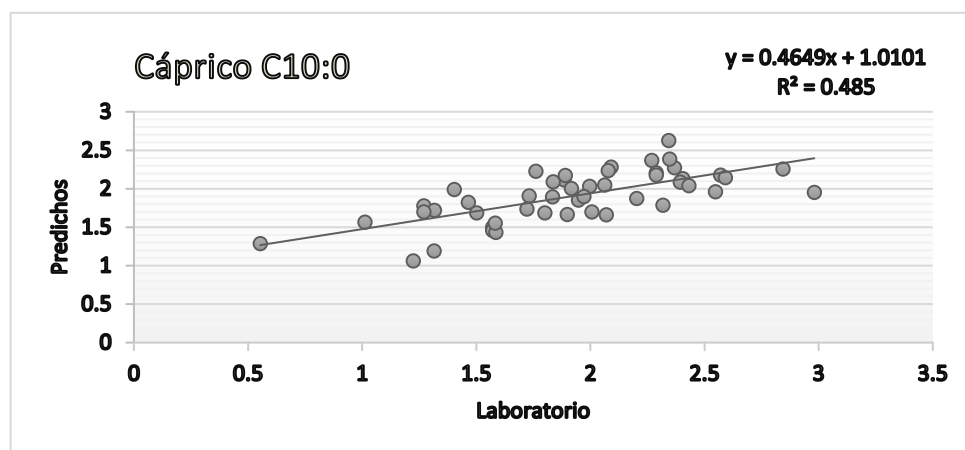
Para el fenotipo de C:8:0 (caprílico) los valores observados fueron: un promedio de $0.77 \pm 0.11\%$, un rango de 0.48 y un coeficiente de variación de 13.88 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $0.78 \pm 0.18\%$, con un rango de 0.81 y un coeficiente de variación de 23.03 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.80$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:8:0 (caprílico) se obtuvo: $REMC_{VC}$ de 0.14 un R^2_{VC} de 0.4 (Figura 10) y una r de 0.6. (Tabla 8)

Figura 11 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Caprílico C8:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



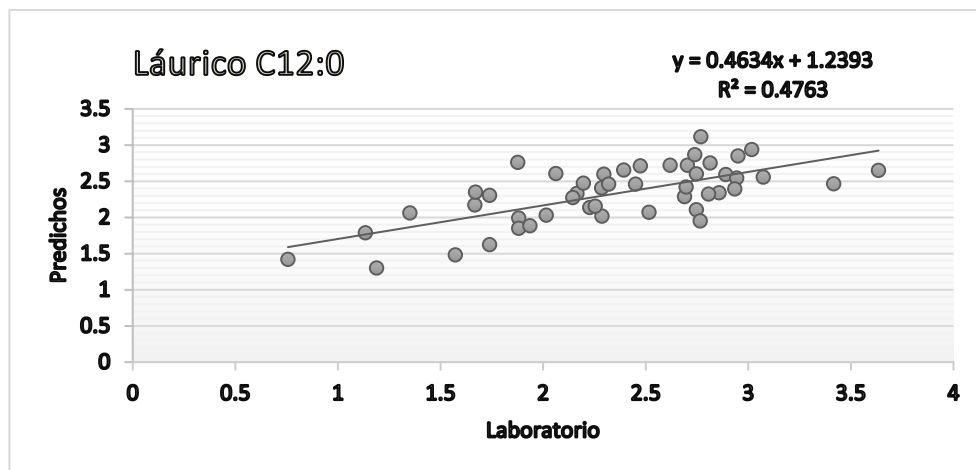
Para el fenotipo de C:10:0 (cáprico) los valores observados fueron: un promedio de $1.9 \pm 0.33\%$, un rango de 1.57 y un coeficiente de variación de 17.17 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $1.92 \pm 0.49\%$, con un rango de 2.43 y un coeficiente de variación de 25.46 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.82$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:10:0 (cáprico) se obtuvo: $REMC_{VC}$ de 0.35 un R^2_{VC} de 0.49 (Figura 11) y una r de 0.7. (Tabla 8)

Figura 12 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Cáprico C10.:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



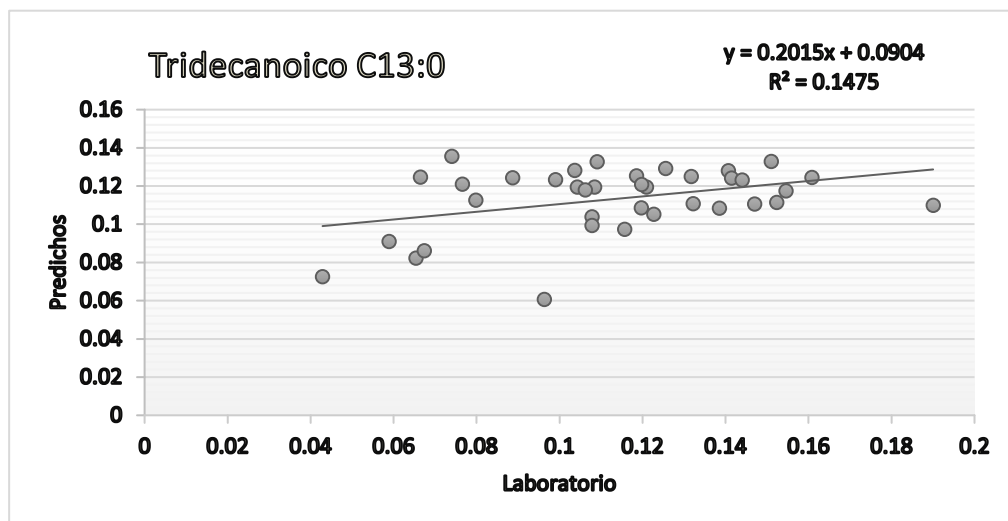
Para el fenotipo de C:12:0 (láurico) los valores observados fueron: un promedio de $2.32 \pm 0.4\%$, un rango de 1.82 y un coeficiente de variación de 17.32 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $2.34 \pm 0.6\%$, con un rango de 2.88 y un coeficiente de variación de 25.63 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.88$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:12:0 (láurico) se obtuvo: REMC_{VC} de 0.43 un R²_{VC} de 0.48 (Figura 12) y una *r* de 0.7. (Tabla 8)

Figura 13 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Láurico C:12.:0, %. Con su coeficiente de determinación (R²); y la ecuación de su regresión lineal



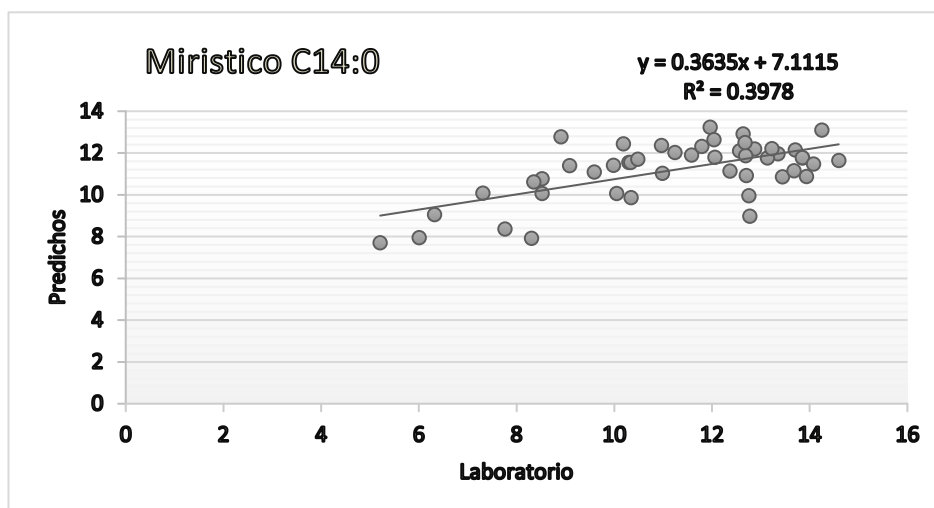
Para el fenotipo de C:13:0 (tridecanóico) los valores observados fueron: un promedio de $0.11 \pm 0.02\%$, un rango de 0.08 y un coeficiente de variación de 15.08 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $0.11 \pm 0.03\%$, con un rango de 0.15 y un coeficiente de variación de 28.73 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.99$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:13:0 (tridecanóico) se obtuvo: REMC_{VC} de 0.03 un R²_{VC} de 0.15 (Figura 13) y una *r* de 0.4. (Tabla 8)

Figura 14 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Tridecanóico C13:0, %. Con su coeficiente de determinación (R²); y la ecuación de su regresión lineal



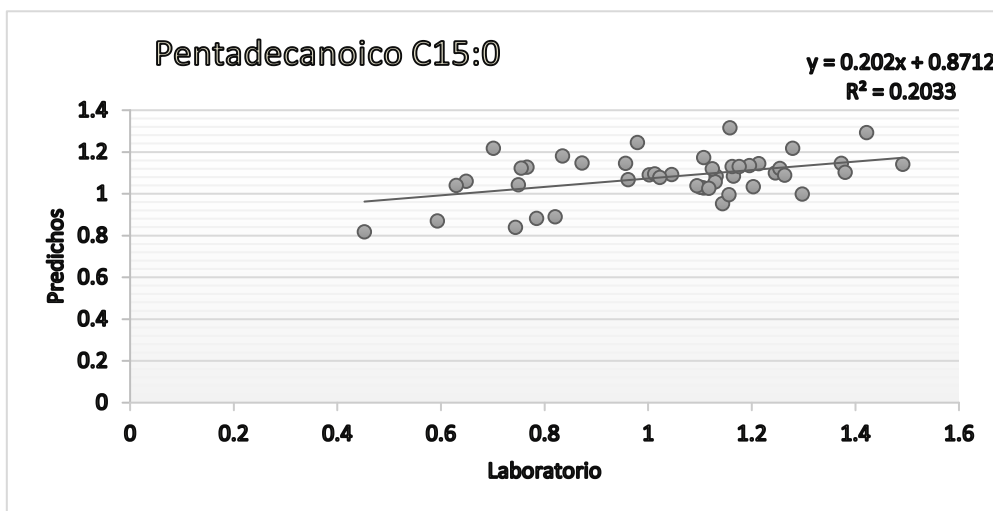
Para el fenotipo de C:14:0 (mirístico) los valores observados fueron: un promedio de $11.18 \pm 1.37\%$, un rango de 5.53 y un coeficiente de variación de 12.27 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $11.19 \pm 2.38\%$, con un rango de 9.38 y un coeficiente de variación de 21.26 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.97$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido de C:14:0 (mirístico) se obtuvo: $REMC_{VC}$ de 0.03 un R^2_{VC} de 0.15 (Figura 14) y una r de 0.4. (Tabla 8)

Figura 15 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Mirístico C14:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal



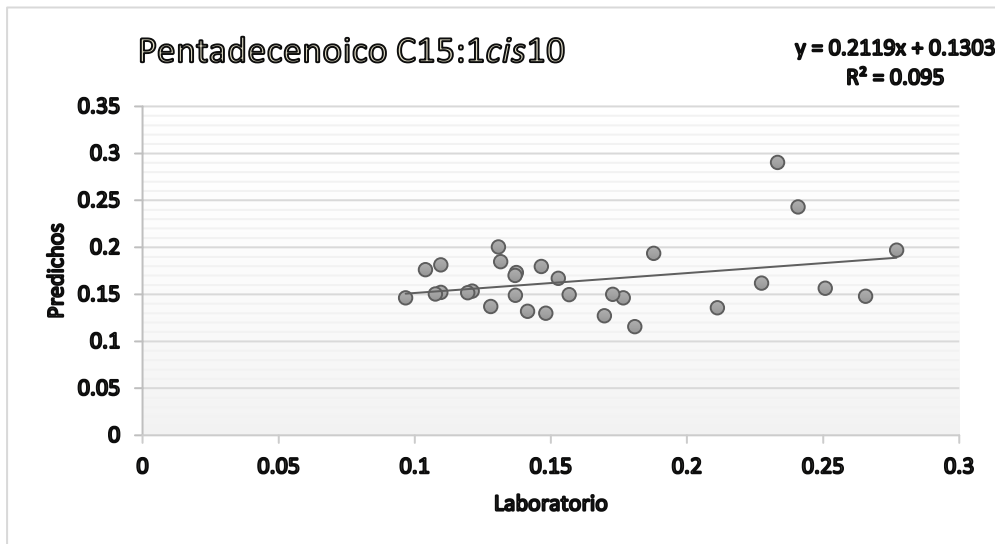
Para el fenotipo de C:15:0 (pentadecánico) los valores observados fueron: un promedio de $1.08 \pm 0.11\%$, un rango de 0.5 y un coeficiente de variación de 9.89 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de 1.04 ± 0.24 , con un rango de 1.04 y un coeficiente de variación de 22.95 (Tabla 7). En la prueba de t se encontraron diferencias significativas ($P=0.28$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:15:0 (pentadecánico) se obtuvo: $REMC_{VC}$ de 0.21 un R^2_{VC} de 0.2 (Figura 15) y una r de 0.5. (Tabla 8)

Figura 16 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Pentadecánico C15:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



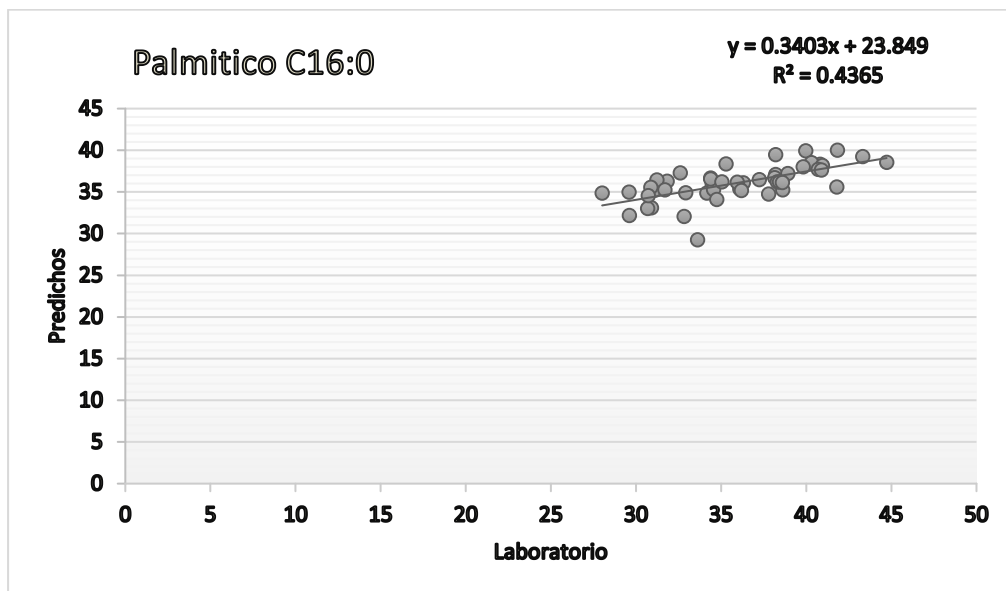
Para el fenotipo de C:15:1cis (pentadecenóico) los valores observados fueron: un promedio de $0.16 \pm 0.04\%$, un rango de 0.17 y un coeficiente de variación de 21.43 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $0.16 \pm 0.05\%$, un rango de 0.18 y un coeficiente de variación de 31.43 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.90$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:15:1cis (pentadecenóico) se obtuvo: REMC_{vc} de 0.05 un R^2_{vc} de 0.1 (Figura 16) y una r de 0.3. (Tabla 8)

Figura 17 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Pentadecenóico C15:1cis10, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



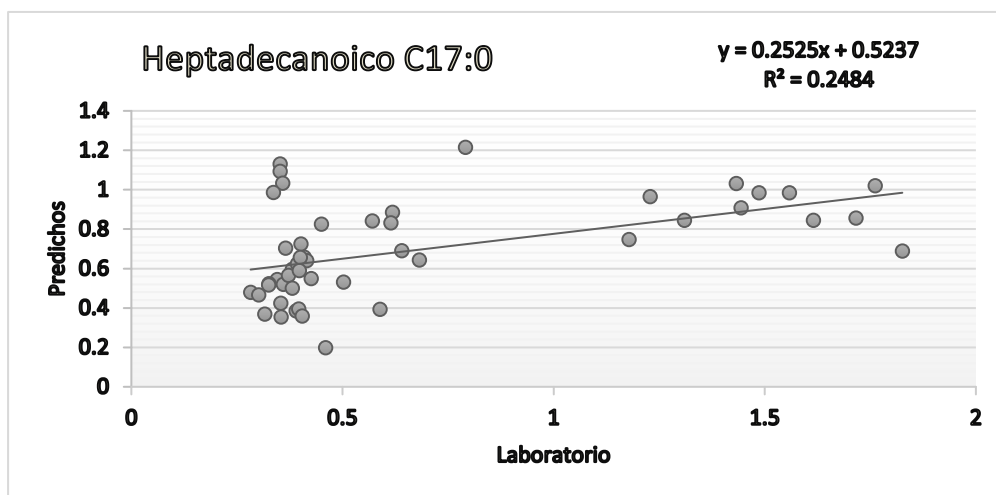
Para el fenotipo de C:16:0 (palmítico) los valores observados fueron: un promedio de $36.09 \pm 2.1\%$, un rango de 10.78 y un coeficiente de variación de 5.82 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $35.98\% \pm 4.08$, con un rango de 5.93 y un coeficiente de variación de 11.33 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.87$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:16:0 (palmítico) se obtuvo: $REMC_{vc}$ de 3.09 un R^2_{vc} de 0.44 (Figura 16) y una r de 0.7. (Tabla 8)

Figura 18 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Palmítico C16:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



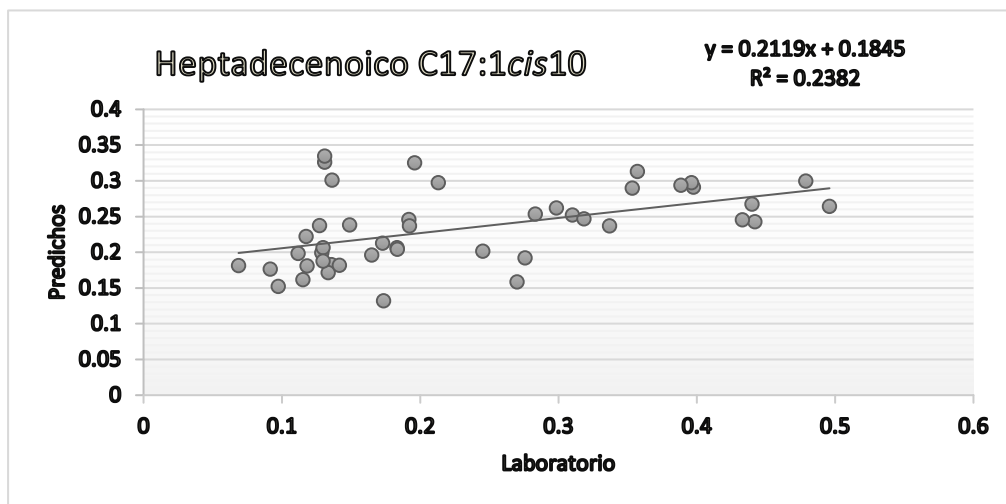
Para el fenotipo de C:17:0 (heptadecánico) los valores observados fueron: un promedio de $0.69 \pm 0.24\%$ un rango de 1.02 y un coeficiente de variación de 35.01 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $0.67 \pm 0.48\%$, con un rango de 1.55 y un coeficiente de variación de 71.12 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.80$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:17:0 (heptadecánico) se obtuvo: $REMC_{vc}$ de 0.41 un R^2_{vc} de 0.25 (Figura 18) y una r de 0.5. (Tabla 8)

Figura 19 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Heptadecanoico C17:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



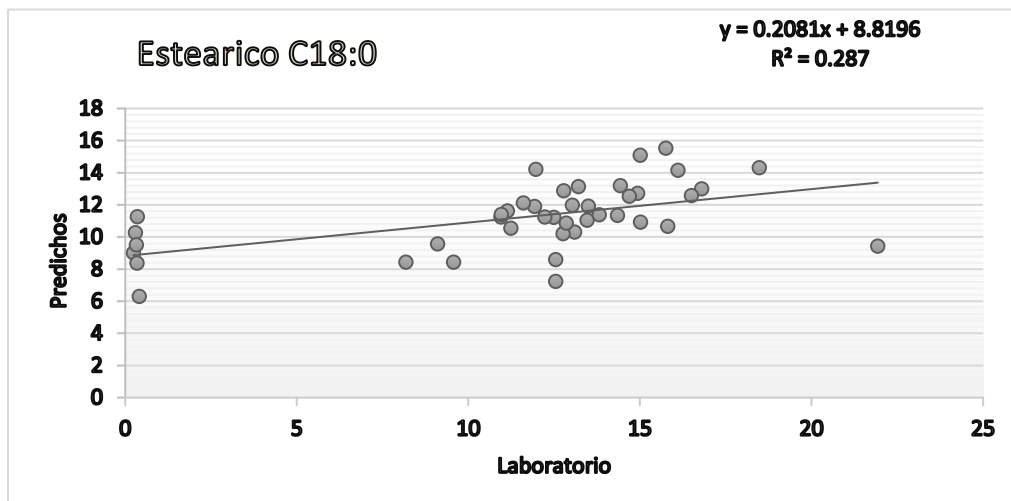
Para el fenotipo de C17:1cis10 (heptadecenoico) los valores observados fueron: un promedio de $0.23 \pm 0.05\%$, un rango de 0.2 y un coeficiente de variación de 22.58 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $0.23 \pm 0.12\%$, con un rango de 0.43 y un coeficiente de variación de 52.61 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.89$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C17:1cis10 (heptadecenoico) se obtuvo: $REMC_{vc}$ de 0.11 un R^2_{vc} de 0.24 (Figura 19) y una r de 0.5. (Tabla 8)

Figura 20 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Heptadecenoico C17:1cis10, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



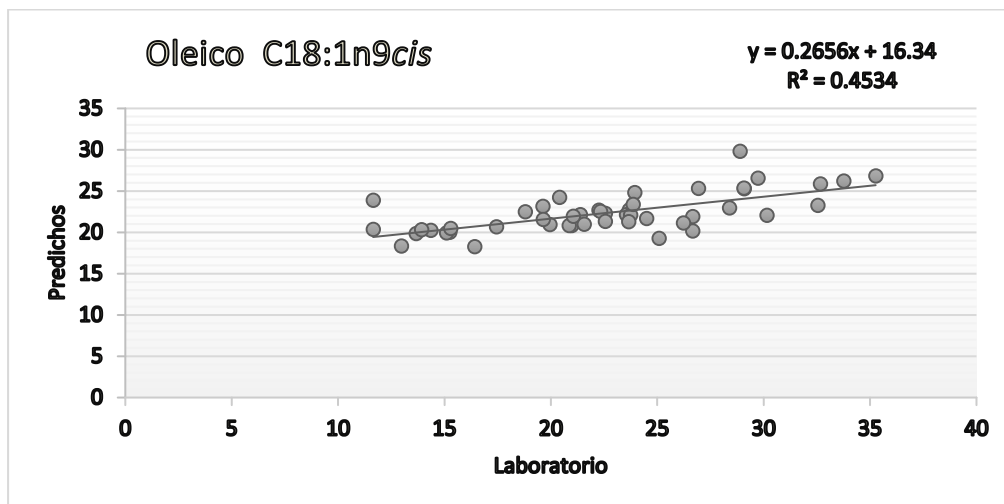
Para el fenotipo de C:18:0 (Esteárico) los valores observados fueron: un promedio de $11.23 \pm 2.04\%$, un rango de 9.22 y un coeficiente de variación de 18.18 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $11.59 \pm 5.25\%$, con un rango de 21.69 y un coeficiente de variación de 45.35 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.68$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:18:0 (Esteárico) se obtuvo: $REMC_{VC}$ de 4.46 un R^2_{VC} de 0.29 (Figura 20) y una r de 0.5. (Tabla 8)

Figura 21 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Esteárico C18:0, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



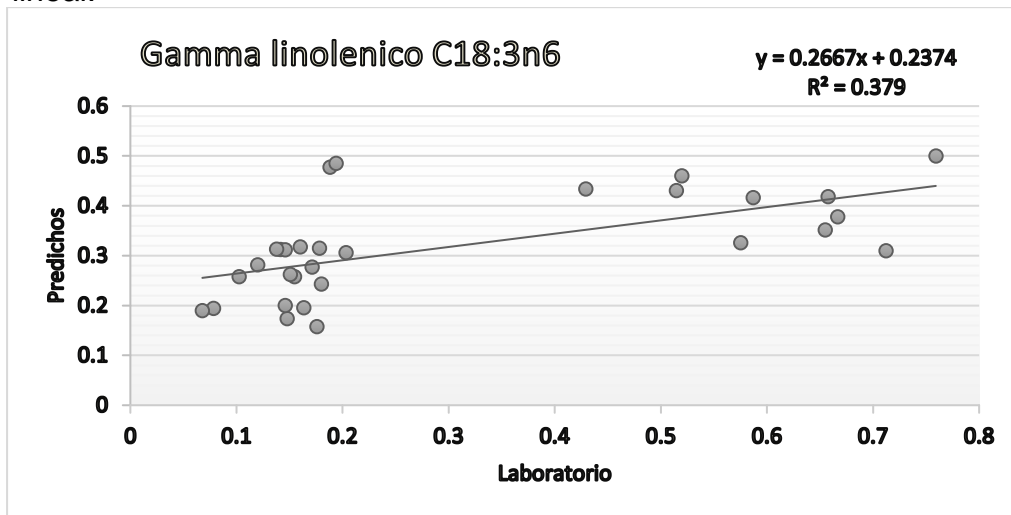
Para el fenotipo de C:18:1:n9c (Oléico) los valores observados fueron: un promedio de $22.33 \pm 2.38\%$, un rango de 11.56 y un coeficiente de variación de 10.65 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $22.55 \pm 6.03\%$, con un rango de 23.62 y un coeficiente de variación de 26.74 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.82$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:18:1:n9c (Oléico) se obtuvo: $REMC_{vc}$ de 4.72 un R^2_{vc} de 0.45 y una r de 0.7. (Tabla 8)

Figura 22 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Oléico C18:1n9cis, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



Para el fenotipo de C:18:3:n6c (Gamma linolénico) los valores observados fueron: un promedio de $0.32 \pm 0.1\%$, un rango de 0.34 y un coeficiente de variación de 31.07 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $0.3 \pm 0.23\%$, con un rango de 0.06 y un coeficiente de variación de 75.39. (Tabla 7) En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.73$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:18:3:n6c (Gamma linolénico) se obtuvo: $REMC_{vc}$ de 0.18 un R^2_{vc} de 0.29 (Figura 22) y una r de 0.6. (Tabla 8)

Figura 23 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Gamma linolénico C18:3n6, %. Con su coeficiente de determinación (R^2); y la ecuación de su regresión lineal.



Para el fenotipo de C:20:0 (araquídico) los valores observados fueron: un promedio de $0.28 \pm 0.1\%$, un rango de 0.51 y un coeficiente de variación de 37.41 y para los valores predichos tuvimos: un promedio de $0.27 \pm 0.23\%$, con un rango de 0.79 y un coeficiente de variación de 86.05 (Tabla 7). En la prueba de t no se encontraron diferencias significativas ($P=0.80$) entre los valores predichos y obtenidos (Tabla 7). Para el ácido C:20:0 (araquídico) se obtuvo: REMC_{VC} de 0.2 un R²_{VC} de 0.2 (Figura 23) y una *r* de 0.4. (Tabla 8)

Figura 24 Gráfico de los valores predichos vs valores obtenidos en laboratorio, con validación cruzada para Araquídico C20:0, %. Con su coeficiente de determinación (R²); y la ecuación de su regresión lineal.

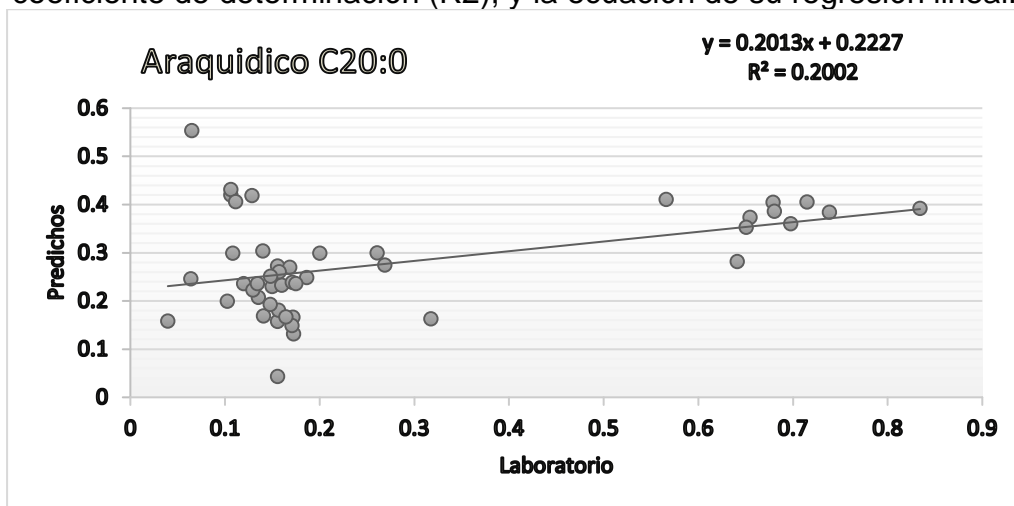


Tabla 7 Estadísticas descriptivas del perfil detallado de ácidos grasos

Fenotipo	Observadas						Predichas					P-value
	n	Prom	D.E	Min	Max	C.V.	Prom	D.E.	Min	Max	C.V.	
Grasa,%	101	4.25	1.21	1.5	8	28.5	4.15	1.08	2.61	8.56	26.02	0.94
Caprónico C6:0	48	1.41	0.31	0.71	1.95	22.14	1.39	0.13	1.11	1.68	22.42	0.72
Caprílico C8:0	48	0.77	0.11	0.52	1.00	13.88	0.78	0.18	0.28	1.09	23.03	0.80
Cáprico C10:0	48	1.90	0.33	1.06	2.63	17.17	1.92	0.49	0.55	2.98	25.46	0.82
Láurico C12:0	48	2.32	0.40	1.30	3.12	17.32	2.34	0.60	0.76	3.64	25.63	0.88
Tridecanóico C13:0	37	0.11	0.02	0.06	0.14	15.08	0.11	0.03	0.04	0.19	28.73	0.99
Mirístico C14:0	48	11.18	1.37	7.70	13.23	12.27	11.19	2.38	5.21	14.59	21.26	0.97
Pentadecanóico C15:0	48	1.08	0.11	0.82	1.32	9.89	1.04	0.24	0.45	1.49	22.95	0.28
Pentadecenoico C15:1 <i>cis</i> 10	30	0.16	0.04	0.12	0.29	21.43	0.16	0.05	0.10	0.28	31.43	0.90
Palmítico C16:0	48	36.09	2.10	29.24	40.02	5.82	35.98	4.08	28.01	44.72	11.33	0.87
Heptadecanóico C17:0	48	0.69	0.24	0.20	1.22	35.01	0.67	0.48	0.28	1.83	71.12	0.80
Heptadecenoico C17:1 <i>cis</i> 10	46	0.23	0.05	0.13	0.33	22.58	0.23	0.12	0.07	0.50	52.61	0.89
Esteárico C18:0	43	11.23	2.04	6.31	15.53	18.18	11.59	5.25	0.24	21.93	45.35	0.68
Oléico C18:1n9 <i>cis</i>	48	22.33	2.38	18.23	29.79	10.65	22.55	6.03	11.64	35.26	26.74	0.82
Gamma linoléico C18:3n6	31	0.32	0.10	0.16	0.50	31.07	0.30	0.23	0.07	0.76	75.39	0.73
Araquídico C20:0	46	0.28	0.10	0.04	0.55	37.41	0.27	0.23	0.04	0.83	86.05	0.80

Tabla 8 Resultados de la validación cruzada

	REMC _{vc}	R ² _{vc}	r
Grasa,%	0.71	0.66	0.77
Caproico C6:0	0.29	0.14	0.37
Caprilico C8:0	0.14	0.40	0.63
Caprico C10:0	0.35	0.49	0.70
Laurico C12:0	0.43	0.48	0.69
Tridecanoico C13:0	0.03	0.15	0.38
Miristico C14:0	1.83	0.40	0.63
Pentadecanoico C15:0	0.21	0.20	0.29
Pentadecenoico C15:1 <i>cis</i> 10	0.05	0.10	0.31
Palmitico C16:0	3.09	0.44	0.66
Heptadecanoico C17:0	0.41	0.25	0.50
Heptadecenoico C17:1 <i>cis</i> 10	0.11	0.24	0.44
Estearico C18:0	4.46	0.29	0.41
Oleico C18:1n9 <i>cis</i>	4.72	0.45	0.59
Gamma linolenico C18:3n6	0.18	0.29	0.54
Araquidico C20:0	0.20	0.20	0.45

REMC_{vc} = Raíz del error medio cuadrático de la validación cruzada.

R²_{vc} = Coeficiente de determinación de la validación cruzada.

r = Correlación de los observados vs los predichos.

DISCUSIÓN

Grasa total

Para el porcentaje total de Grasa Acosta Acosta *et al.*, (2020), reporta un valor para una población de bovinos de raza Holstein de 3.33% que es 0.92% menor al valor promedio obtenido por medio del método Gerber, esta diferencia se debe a efectos genéticos, fisiológicos o nutrimentales.

Referencias de ácidos grasos vs ácidos grasos observados por gas cromatografía.

Para los ácido grasos de cadena media, Soyeurt *et al.*, (2006) obtuvo promedios superiores a los observados en laboratorio, C:6:0 = $2.9 \pm 1.26\%$, C:8:0 = $1.54 \pm 0.68\%$, C10:0 = $3.06 \pm 1.31\%$ y C12:0 = $2.71 \pm 0.87\%$. Lindmark Månsson, (2008) reportó promedios diferentes para los ácidos grasos C:6:0 = $2.4 \pm 0.1\%$ y C:8:0 = $1.4 \pm 0.1\%$, mientras que para los ácidos grasos C10:0 = $2.07 \pm 0.2\%$ y C12:0 = $3.3 \pm 0.2\%$ fueron similares.

Al hacer la comparación con otros autores en los ácidos grasos de cadena larga se pudo encontrar que Juárez Dávila (2017) reportó valores similares para los ácidos grasos C:13:0 = $0.10 \pm 0.01\%$, C:14:0 = $10.6 \pm 1.02\%$ y C:17:1cis10 = $0.19 \pm 0.14\%$, reportó valores menores a los observados para C:15:0 = $0.86 \pm 0.25\%$, C:16:0 = $30 \pm 2.18\%$, C:17:0 = $0.48 \pm 0.15\%$, C:18:2n6cis = $1.48 \pm 0.44\%$ y C:20:0 = $0.01 \pm 0.03\%$ y valores superiores para C:18:0 = $13.38 \pm 2.15\%$ y C:18:1n9cis = $21.41 \pm 1.12\%$. Lindmark Månsson (2008) reportó valores similares para los ácidos grasos C:14:0 = $10.9 \pm 0.5\%$, C:15:0 = $0.9 \pm 0\%$ y C:20:0 = $0.2 \pm 0\%$, obtuvo valores inferiores para C:16:0 = $30.6 \pm 0.9\%$, C:17:0 = $0.4 \pm 0\%$ y C:18:2n6cis = $1.6 \pm 0.1\%$ y calculó un valor superior para C:18:0 = $12.2 \pm 0.2\%$. Soyeurt *et al.*, (2006) obtuvo valores similares para los ácidos grasos para

C:15:0 = $0.98 \pm 0.29\%$ y C:18:0 = $11.97 \pm 2.87\%$, y reportó valores inferiores para C:14:0 = $9.28 \pm 1.95\%$ y C:16:0 = $25.67 \pm 4.89\%$.

Para el ácido pentadecenoico C15:1cis10 y el ácido gamma linolénico C18:3n6 no se encontraron valores reportados.

Las diferencias entre los estudios realizados previamente y el presente pueden deberse a que en los estudios de Soyeurt *et al.*, (2006) se utilizaron 275 vacas de 6 razas diferentes de las cuales se obtuvieron 600 muestras y Lindmark Månsson, (2008), que realizó 4 muestreos de 7 producciones que tenían diferentes raza, en este caso se realizaron 4 muestreos de los cuales analizamos 48 muestras, de una producción de bovinos de la raza Holstein. Según uno de los factores que pueden modificar el contenido de grasa en leche es la raza, (Gómez and Oswald, 2005). Otra parte que puede arrojar diferencias importantes en el análisis de muestras son las características del alimento, de acuerdo a los estudios realizados por (Campabadal, 1999) factores como la calidad del forraje, el tamaño de la partícula, el tipo de concentrado, la estrategia de alimentación (ya sea en pastoreo o en estabulación), los aditivos y la relación concentrado/forraje pueden alterar significativamente la cantidad de ácidos grasos en cada muestra.

Se sabe que los ácidos grasos que tienen más de 18 átomos de carbono están relacionados con el balance energético negativo y por lo tanto con la etapa de lactación, los autores mencionados no especifican la etapa de lactación en la que se tomaron los muestreos, sin embargo, se reportan valores superiores a los observados, esto puede deberse a que los bovinos muestreados se encontraban en la etapa de “altas productoras”, donde la concentración de estos ácidos grasos disminuye.

Si se tiene un registro correcto, estas mediciones pueden ser útiles para poder detectar enfermedades subclínicas metabólicas en las vacas al momento de la ordeña como, por ejemplo, la cetosis en la que podríamos ver un aumento en los ácidos grasos de cadena con más de 16 átomos de carbono.

Valores predichos de los ácidos grasos comparados con otros autores

Los valores reportados por otros autores se encuentran resumidos en la tabla 9.

Para el fenotipo de C:6:0 (caprónico) Soyeurt *et al.*, (2006) reporta R^2_{VC} de 0.41 que es 0.27 superior al valor de referencia y Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{CV} = 0.88$ que es 0.74 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:8:0 (caprílico) Soyeurt *et al.*, (2006) reporta R^2_{VC} de 0.46 que es 0.06 superior al valor de referencia y Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{CV} = 0.89$ que es 0.49 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:10:0 Soyeurt *et al.*, (2006) reporta R^2_{CV} de 0.53 que es 0.04 superior al valor de referencia y Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{CV} = 0.91$ que es 0.87 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:12:0 (láurico) Soyeurt *et al.*, (2006) reporta R^2_{VC} de 0.64 que es 0.18 superior al valor de referencia y Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{VC} = 0.91$ que es 0.27 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:13:0 (tridecanóico) Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{CV} = 0.60$ que es 0.45 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:14:0 (mirístico) Soyeurt *et al.*, (2006) reporta $R^2_{VC} = 0.67$ que es 0.52 superior al valor de referencia; Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{VC} = 0.90$ que es 0.75 mayor al valor de referencia y Martin *et al.*, (2015) reporta $R^2_{VC} = 0.82$ que es 0.67 superior al valor reportado y un $REMC_{VC}$ de 0.5 que es 0.47 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:15:0 Soyeurt *et al.*, (2006) reporta R^2_{VC} de 0.74 que es 0.54 superior al valor de referencia

Para el fenotipo de C:16:0 (palmítico) Soyeurt *et al.*, (2006) reporta $R^2_{VC} = 0.5$ que es 0.06 superior al valor de referencia, Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{VC} = 0.91$ que es 0.47 mayor al valor de referencia y Martin *et al.*, (2015) $R^2_{VC} = 0.81$

que es 0.37 superior al valor reportado y un $REMC_{VC}$ de 1.1 que es 1.05 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:17:0 (heptadecanóico) Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{VC} = 0.54$ que es 0.29 mayor al valor de referencia.

Para el fenotipo de C:18:0 (Esteárico) Soyeurt *et al.*, (2006) reporta R^2_{VC} de 0.09 que es 0.2 menor al valor de referencia, Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{VC} = 0.82$ que es 0.53 mayor al valor de referencia y Martin *et al.*, (2015) reporta un $R^2_{VC} = 0.79$ que es 0.40 superior al valor reportado y un $REMC_{VC}$ de 0.7 que es 3.76 menor al valor de referencia

Para el fenotipo de C:18:1:n9c (Oléico) Soyeurt *et al.*, (2006) reporta R^2_{VC} de 0.53 que es 0.08 superior al valor de referencia, Eskildsen *et al.*, (2014) reporta $R^2_{VC} = 0.65$ que es 0.20 mayor al valor de referencia y Martin *et al.*, (2015) reporta un $R^2_{VC} = 0.92$ que es 0.47 superior al valor reportado y un $REMC_{VC}$ de 0.8 que es 3.92 menor al valor de referencia.

Respecto a los parámetros: raíz del error medio cuadrático ($REMC_{VC}$), coeficiente de determinación (R^2_{VC}) y coeficiente de correlación (r), los cambios observados pueden ser causados por la cantidad de muestras utilizadas. Soyeurt *et al.*, (2006) reporta que utilizó 600 muestras y Eskildsen *et al.*, (2014) reporta 237 muestras. (Tabla 9)

Comparación de valores observados vs valores predichos.

Ácidos grasos de cadena mediana.

Comparando los promedios de los valores observados y predichos podemos observar que son estadísticamente iguales, lo que quiere decir que las ecuaciones obtenidas están bien calibradas.

Los rangos obtenidos para los ácidos grasos de cadena media son similares y no superan 1.06% de diferencia.

En los coeficientes de variación tenemos valores similares para el fenotipo de la grasa y para C:6:0, con una diferencia de 2.48 y 0.28 respectivamente, pero

existe una diferencia para C:8:0=9.15, C:10:0=8.29, y C:12=8.31, esta diferencia en los coeficientes de variación puede deberse a la cantidad de muestras tomadas y al número de observaciones obtenidas de cada muestra.

Ácidos grasos de cadena larga.

Para los ácidos grasos de cadena larga podemos observar que los promedios de los observados y de los predichos son muy parecidos, respecto al rango se obtuvieron valores diferentes para el ácido pentadecanóico C15:0, palmítico C16:0, heptadecanóico C17:0, esteárico C18:0, Oleico C18:1n9cis y linoléico C18:2n6cis donde la diferencia fue mayor a 5.51%, y también se encontraron valores similares para los ácidos grasos: tridecanóico C13:0, mirístico C14:0, heptadecanóico C17:1cis10, Gamma linoléico C18:3n6 y araquídico C20:0, donde la diferencia no superó 3.85%

Al igual que en los ácidos grasos de cadena mediana, podemos observar que el coeficiente de variación de los predichos es mayor debido a que el número de muestras que obtuvimos para el análisis es menor a los que utilizamos para realizar la calibración de las ecuaciones.

Tabla 9 Cuadro comparativo de los resultados de valores predichos.

	(Soyeurt <i>et al.</i> , 2006)		(Eskildsen <i>et al.</i> , 2014)			(Martin <i>et al.</i> , 2015)		
	g/100 g de grasa		g/100g de leche			% del total de ácidos grasos		
n	49		890			422		
	R2CV	Prom	REMC _{cv}	R ² _{cv}	Prom	REMC _{cv}	R ² _{cv}	Prom
Caproico C6:0	0.41	2.9	0.01	0.88	0.13			
Caprilico C8:0	0.46	1.54	0.01	0.89	0.07			
Caprico C10:0	0.53	3.06	0.02	0.91	0.16			
Laurico C12:0	0.64	2.71	0.02	0.91	0.18			
Tridecanoico C13:0			0.01	0.60	0.01			
Mirístico C14:0	0.67	9.28	0.04	0.90	0.51	0.5	0.82	12.1
Pentadecanoico C15:0	0.53	0.98	0.01	0.74	0.05			
Palmitico C16:0	0.50	25.67	0.14	0.91	1.41	1.1	0.81	27.7
Heptadecanoico C17:0			0.01	0.54	0.02			
Estearico C18:0	0.09	11.97	0.08	0.82	0.53	0.7	0.79	10.8
Oleico C18:1n9cis	0.53	29.19	0.09	0.65	0.85	0.8	0.92	18.5

REMC_{vc}= Raíz del error medio cuadrático de la validación cruzada; R²_{vc}=Coeficiente de determinación de la validación cruzada; Prom=Promedio.

Durante el proceso de detección de ácidos grasos, en algunas muestras el gas cromatógrafo no detectó suficientes observaciones para poder realizar las predicciones o el coeficiente de correlación obtenido fue menor del 10%, por lo que decidimos excluir estas muestras de los resultados, este es el caso de los ácidos grasos: Butírico C4:0, Undecanoico C11:0, Miristoleico C14:1, Palmitoleico C16:1, Eláidico C18:1n9trans, Linoleláidico C18:2n6trans, Linoleico C18:2n6cis, Alfa linolenico C18:3n3, Eicosenoico C20:1, Heneicosenoico C21:0, Eicosadienoico C20:2cis, Eicosatrienoico C20:3n6, Araquidónico C20:4, Behénico C22:0, Euríico C22:1n9, Eicosatrienoico C20:3n3, Tricosanoico C23:0, Docosadienoico C22:2, Lignocerico C24:0, Eicosapentaenoico C20:5, Nervico C24:1 y Docosahexaenoico C22:6.

CONCLUSIONES

Es posible desarrollar ecuaciones con valores de confiabilidad aceptables para usarlos en la predicción de ácidos grasos de cadena media (ácido caprónico C6:0, ácido caprílico C8:0, ácido cáprico C:10:0 y ácido laúrico C:12:0) y ácidos grasos de cadena larga (tridecanóico C13:0, mirístico C14:0, pentadecenóico C15:1cis10, palmítico C16:0, heptadecanóico C17:0, heptadecenóico C17:1cis10, esteárico C18:0, oléico C18:1n9cis, gamma linolénico C18:3n6, araquídico C20:0), pues las medias observadas y predichas son estadísticamente iguales, excepto para el ácido pentadecanoico C15:0. La predicción del perfil detallado de ácidos grasos permitirá una evaluación genética y fenotípica de la población Holstein de México.

REFERENCIAS

Acosta Acosta, Y. et al. La composición de la leche, su variación según raza y la lactancia: Hombre, Ciencia y Tecnología. 2020; 24:93–97. Disponible en: <http://portal.amelica.org/ameli/jatsRepo/441/4411976012/4411976012.pdf>

Ballesteros-Vásquez, M. et al. Ácidos Grasos Trans: Un Análisis Del Efecto De Su Consumo En La Saludhumana, Regulación Del Contenido En Alimentos Y Alternativas Para Disminuirlos. Nutrición Hospitalaria. 2012;27(1):. 54–64. doi: 10.3305/nh.2012.27.1.5420.

Barrera-Arellano, D. Ácidos Grasos Trans En Aceites Hidrogenados: Implicaciones Técnicas Y Nutricionales. Grasas y Aceites. 1993; 44(4–5):. 286–293. doi: 10.3989/gya.1993.v44.i4-5.1082.

Bastin, C. et al. On the role of mid-infrared predicted phenotypes in fertility and health dairy breeding programs. Journal of Dairy Science. 2016; 99(5). 4080–4094. doi: 10.3168/jds.2015-10087.

Blanco Ochoa, Á. M. Calidad Sanitaria de la Leche. [Internet]. [Citado el 04 feb 2020]. Disponible en: <https://www.slideshare.net/carlosevazquez/13calidad-leche>.

Campabadal-Herrero, Carlos. Factores que afectan el contenido de sólidos de la leche. Organization for Tropical Studies. 1999; 5(1). 67-92. Disponible en: <http://www.sidalc.net/cgi-bin/wxis.exe/?IsisScript=oet.xis&method=post&formato=2&cantidad=1&expresion=mfn=022225>

canilec.org.mx [Internet] Canilec: Estadísticos. 2018. [Citado el 04 Feb 2021]. Disponible en: <https://sitio.canilec.org.mx/estadisticas/>

Castaño, M y Pérez, R. Balance energético negativo y su efecto sobre la producción y reproducción en vacas lecheras, [Tesis de pregrado]. Colombia Universidad Cooperativa de Colombia. 2021

cimat.mx [Internet] Teorema de Bayes: un resultado sencillo y un fundamento para hacer Estadística. 2013. [Citado el 04 Feb 2020]. Disponible en: <http://www.estadistica2013ciimat.mx/bayes>.

Contreras, P. A. y Phil, M. Síndrome de movilización grasa en vacas lecheras al inicio de la lactancia y sus efectos en salud y producción de los rebaños [Internet] 1998 [Citado el 12 Feb 2020]; 30 N.2. Disponible en: https://scielo.conicyt.cl/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0301732X1998000200002.

dof.gob.mx. [Internet] Diario Oficial de la Federación [Internet]. Reglamento de Control Sanitario de Productos y Servicios 1999 [Citado el 12 Feb 2020]. Disponible en: <http://www.salud.gob.mx/unidades/cdi/nom/compi/rcsps.html>

Eskildsen, C. E. et al. Quantification of individual fatty acids in bovine milk by infrared spectroscopy and chemometrics: Understanding predictions of highly collinear reference variables', *Journal of Dairy Science*. 2014; 97(12): 7940–7951. doi: 10.3168/jds.2014-8337.

fao.org [Internet]. Dairy production products: 2020 [Citado el 13 feb 2020]. Disponible en : <http://www.fao.org/dairy-production-products/products/es/>.

Fernández, E. F. et al. Documento de Consenso: Importancia nutricional y metabólica de la leche, *Nutrición Hospitalaria*, 2015; 31(1): 92–101. doi: 10.3305/nh.2015.31.1.8253.

García, C. A. C., Montiel, R. L. A. and Borderas, T. F. Grasa y proteína de la leche de vaca: componentes, síntesis y modificación. *Archivos de Zootecnia*, 2014; 63(241):. 85. doi: 10.21071/az.v63i241.592.

Gómez, D. A. A. and Oswaldo, B. M. Composición nutricional de la leche de ganado vacuno, *Revista Lasallista de Investigación* [Internet]. 2005 2(1):. 38–42. Disponible en: <https://www.redalyc.org/pdf/695/69520107.pdf>

Gonzales Gonzales, J. D. M. Determinación del contenido de ácidos grasos cis, trans, saturados, monoinsaturados y poliinsaturados en snacks mediante cromatografía de gases.[Tesis de Ingeniería] Lambayeque (Pe). Universidad

Nacional Pedro Ruiz Gallo. 2018

Hernández, D. M. Desarrollo de métodos quimiométricos mediante espectroscopia FTIR-HATR para cuantificar parámetros químicos y perfil de ácidos grasos cis y trans en margarina. [Tesis de maestría]. CDMX (MX): IPN Escuela Nacional De Ciencias Biológicas. 2010

Juárez Dávila, L. E. Impacto del Sistema de alimentación sobre el perfil de los ácidos grasos en la leche., [Tesis de licenciatura]. Toluca (Mx) Universidad Autonoma del Estado de México. 2017

Lindmark Månsson, H. Fatty acids in bovine milk fat, Food and Nutrition Research. 2008; 52. 1–3. doi: 10.3402/fnr.v52i0.1821.

Lucéro, C. Definición, composición, estructura y propiedades de la leche. [Internet]. Escuela de Ciencias Nacional Abierta y a distancia; 2017 [Citado el 12 Feb 2020]. Disponible en: <https://silo.tips/download/definicion-composicion-estructura-y-propiedades-de-la-leche>

Martin, A. D. et al. The relationship between fatty acid profiles in milk identified by Fourier transform infrared spectroscopy and onset of luteal activity in Norwegian dairy cattle. Journal of Dairy Science. 2015: 98(8):. 5374–5384. doi: 10.3168/jds.2015-9343.

microlabindustrial.com [Internet] Microlab Industrial Perfil de ácidos grasos por cromatografía de gases; 2014 [Citado el 20 Feb 2020] Disponible en: <http://www.microlabindustrial.com/blog/perfil-de-acidos-grasos-por-cromatografia-de-gases>.

ocla.org [Internet] 2019 [Citado el 20 Feb 2020] Disponible en: <http://www.ocla.org.ar/contents/welcome/>.

Pérez, P. and de los Campos, G. BGLR: A Statistical Package for Whole Genome Regression and Prediction, Genetics, 2014; 198(2): 483–495. Disponible en: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/25009151/>

gob.mx/agricultura [Internet] SADER and SIAP Inforural. 2018 [Citado el 25 Feb 2020] Disponible en: <https://www.inforural.com.mx/panorama-de-la-leche-en-mexico-6/>.

gob.mx/agricultura [Internet] SADER and SIAP Boletín de Leche. 2018 [Citado el 25 Feb 2020] Disponible en: <http://infosiap.siap.gob.mx/opt/boletlech/Bolet%C3%ADn%20de%20Leche%20abril-junio%202018.pdf>

Santillán, E., Méndez, M. and Vélez, J. Productos lácteos funcionales, fortificados y sus beneficios en la salud, Temas selectos de alimentos. 2014; 8(1): 5–14. Disponible en: <http://web.udlap.mx/tsia/files/2015/05/TSIA-81-Santillan-Urquiza-et-al-2014.pdf>.

Schettino, B. et al. Análisis De La Robustez En La Determinación De Ácidos Grasos Por Cromatografía Gaseosa En Leche De Cabra, Revista de Salud Animal. 2011; 33(2): 83–89. Disponible en: http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0253-570X2011000200003

Secretaría de Economía 2012, *NOM-155-SCOFI-2012*.

Soyeurt, H. et al. Estimating fatty acid content in cow milk using mid-infrared spectrometry, Journal of Dairy Science. 2006; 89(9): 3690–3695. doi: 10.3168/jds.S0022-0302(06)72409-2.

Subsecretaria de Salubridad. et al. 1982 NMX-F-387-1982

Toledo-Alvarado, H. et al. Changes in milk characteristics and fatty acid profile during the estrous cycle in dairy cows. Journal of Dairy Science. 2018; 101(10): 9135–9153. doi: 10.3168/jds.2018-14480.

Uscanga-Domínguez, L. F. et al. Technical position on milk and its derivatives in adult health and disease from the Asociación Mexicana de Gastroenterología and the Asociación Mexicana de Gerontología y Geriatria. Revista de Gastroenterologia de Mexico 2019; 84(3): 357–371. doi: 10.1016/j.rgm.2019.03.002.

Vargas-bello-pérez, E. and Garnsworthy, P. C. Trans Fatty Acids And Their Role

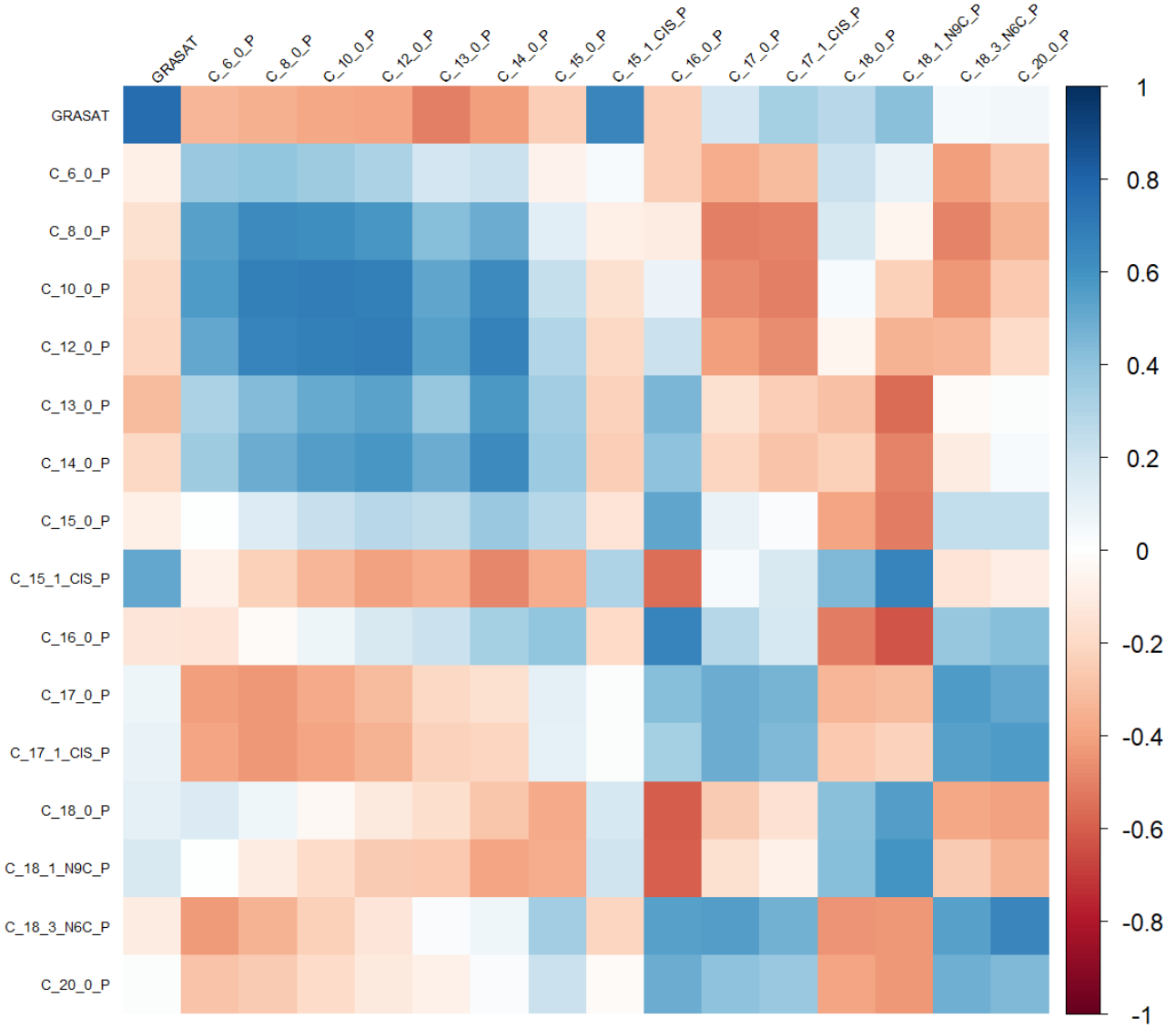
In The Milk Of Dairy Cows. *Cienc. Inv. Agr.* 2013; 40(3): 449–473. doi: 10.4067/S0718-16202013000300001.

es.wikipedia.org [Internet]. Teorema de Bayes; 2020 [Citado el 03 Mar 2020] Disponible en: https://es.wikipedia.org/wiki/Teorema_de_Bayes.

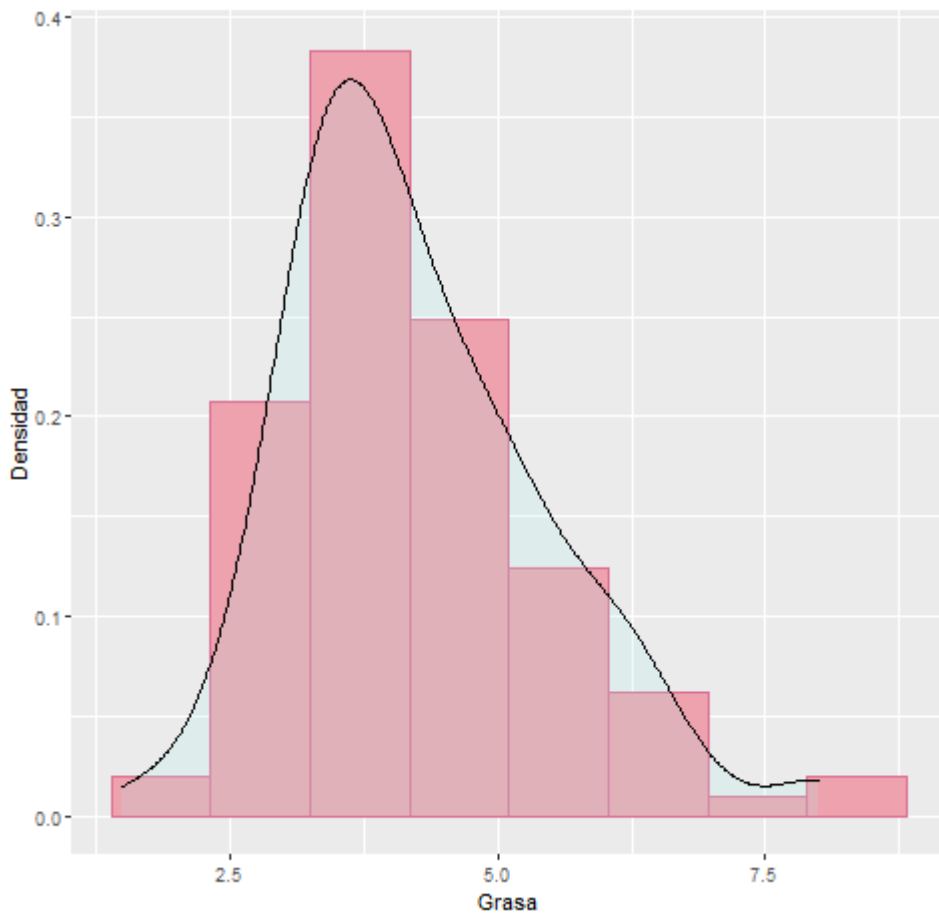
Zavala, J. Aspectos Nutricionales Y Tecnológicos de la leche, Ministerio De Agricultura. 2005; I. 60. Disponible en: [http://www2.congreso.gob.pe/sicr/cendocbib/con3_uibd.nsf/7AE7E7AB111562710525797D00789424/%24FILE/Aspectosnutricionalesytecnológicosdelaleche.pdf%0Ahttp://www2.congreso.gob.pe/sicr/cendocbib/con3_uibd.nsf/7AE7E7AB111562710525797D00789424/\\$FILE/Aspectosnut](http://www2.congreso.gob.pe/sicr/cendocbib/con3_uibd.nsf/7AE7E7AB111562710525797D00789424/%24FILE/Aspectosnutricionalesytecnológicosdelaleche.pdf%0Ahttp://www2.congreso.gob.pe/sicr/cendocbib/con3_uibd.nsf/7AE7E7AB111562710525797D00789424/$FILE/Aspectosnut).

Anexos

Anexo 1 Matriz de correlación a color de los valores de los ácidos grasos predichos.



Anexo 2 Histograma de la grasa total (%) en la leche obtenida por método de Gerber.



Anexo 3 Cromatografía de gases.

El proceso para obtener un análisis por cromatografía de gases (figura 4) es el siguiente:

- Se obtiene un extracto concentrado con los analitos en este caso los ácidos grasos.
- La muestra se inyecta en a la columna por medio de una microjeringa
- La muestra pasa a una cámara de vaporización instantánea situada en el cabezal de la columna
- El flujo continuo de gas de arrastre conduce la muestra en forma de vapor a través de la columna y la transporta hasta el detector.

- El horno mantiene a una temperatura constante a la columna para que los analitos sean arrastrados de una forma continua y uniforme.
- Cada soluto en la mezcla se mueve a cierta velocidad dependiendo sus propiedades físicas y químicas.
- La gráfica registra picos de diferentes alturas que corresponden a cada analito, en estos podemos ver representados la concentración de cada uno de ellos. (Microlab Industrial, 2014)

Anexo 4 Espectroscopía Infrarroja por transformada de Fourier.

En el espectrofotómetro FTIR, la fuente emite una luz, la cual se divide en dos por el espejo divisor, una parte se refleja en un espejo fijo y la otra mitad en el espejo móvil, esto forma un patrón de interferencia que refleja todas las radiaciones del haz, este patrón conocido como interferograma de la fuente se refleja hacia la muestra, la muestra absorbe ciertas frecuencias y el interferograma restante pasa al detector (figura 5). El interferograma resultante se interpreta por medio del análisis matemático de Fourier, para obtener el espectro infrarrojo.