



ESTIMACIÓN DEL COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD DURANTE EL TOSTADO DE CAFÉ EN UN LECHO FUENTE UTILIZANDO UN MODELO DIFUSO

DIFFUSIVITY COEFFICIENT ESTIMATION DURING COFFEE ROASTING IN A SPOUTED BED USING A FUZZY MODEL

L. Virgen-Navarro¹, E.J. Herrera-López¹, H. Espinosa-Andrews¹,
G.M. Guatemala-Morales¹, R.I. Corona-González², E. Arriola-Guevara^{2*}

¹Unidad de Tecnología Alimentaria, Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco, Av. Normalistas No. 800, Guadalajara, Jalisco, 44270, México.

²Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Guadalajara, Blvd. Marcelino García Barragán No. 1412, Guadalajara, Jalisco, 444230, México.

Received June 8, 2015; Accepted January 29, 2016

Resumen

Partiendo del mismo grano, el proceso de tostado de café (*Coffea arabica*) es esencial para obtener un café de calidad. Ya que el movimiento del agua es esencial, la cinética de secado permite modelar el proceso y obtener el coeficiente de difusividad efectiva, D_{eff} , parámetro clave para entender el transporte durante el tostado. Se compararon dos enfoques considerando que el coeficiente es función de la temperatura de la partícula, T_p , y de la humedad reducida, MR . En el primer enfoque se utilizó un modelo de parámetros ajustables y en el segundo se planteó un modelo difuso tipo Mamdani. Cada modelo se incluyó en la segunda ley de Fick para estimar los valores teóricos de MR , que se contrastaron con los valores experimentales obtenidos durante el tostado en un lecho fuente, a tres niveles diferentes de temperatura de aire de tostado, T_A (275, 300 y 325°C). Si bien el modelo de parámetros ajustables presentó un buen ajuste, el modelo tipo Mamdani fue mucho mejor ($R^2 > 0.999$ y $SEE < 0.001$), aunque las gráficas de contorno para D_{eff} muestran valores anómalos en las regiones sin puntos experimentales.

Palabras clave: modelo difuso tipo Mamdani, tostado de café, lecho fuente, parámetros ajustables, coeficiente de difusividad efectiva.

Abstract

Starting from the grain itself, the process of roasting coffee (*Coffea arabica*) is essential for a quality coffee. Since the movement of water is essential, drying kinetics allows modeling the process and obtain the effective diffusion coefficient, D_{eff} , key parameter to understand the water transport during the roasting process. Two approaches were compared considering that this coefficient is a function of particle temperature, T_p , and low humidity, MR . For the first model, adjustable model parameters were used, while for the second, a Mamdani fuzzy type of model was proposed. Each model was included in the Fick's second law to estimate theoretical values of MR . These values were compared with the experimental ones obtained during roasting coffee in a spouted bed at three different levels of air temperature, T_A (275, 300 and 325°C). Even though the adjustable parameters model showed a good fit, the Mamdani fuzzy model was much better ($R^2 > 0.999$ and $SEE < 0.001$), but plots showed anomalous values for those regions without experimental data.

Keywords: Mamdani fuzzy model, roasting coffee, spouted bed, adjustable parameters, effective diffusion coefficient.

1 Introducción

Partiendo del mismo grano, el proceso de tostado juega un papel importante en la obtención de café de alta calidad (Bottazzi y col., 2012). De manera general, el tostado de café consta de dos etapas: la fase de secado y la fase de tostado. La fase de secado sucede al inicio cuando la temperatura del grano se encuentra por debajo de los 160°C y se caracteriza

por una pérdida importante de humedad. Cuando el grano supera esa temperatura, el proceso pasa a la fase de tostado y, al alcanzar los 190°C, comienzan las reacciones de pirólisis que van acompañadas, tanto de los cambios físicos característicos (color, volumen y densidad), como de la pérdida de humedad (Buffo y Cardelli-Freire 2004; Hernández y col., 2007). Es en esta segunda etapa cuando el café desarrolla sus propiedades organolépticas específicas

* Corresponding author. E-mail: arriole@hotmail.com
Tel. (33) 3640-6394

en términos de sabor, aroma y color (Baggenstoss y col., 2007). Durante todo el proceso, el agua es el componente que se pierde en mayor cantidad; al finalizar el tostado, el grano ha perdido cerca del 90% de la cantidad de humedad inicial (Baggenstoss y col., 2008; Heyd y col., 2007). Por lo anterior, es posible considerar al tostado de café como una cinética de secado y modelarlo implementando modelos difusionales basados en la segunda ley de Fick. Dichos modelos han mostrado un ajuste razonable a los datos experimentales (Basile y Kikic 2009; Fabbri y col., 2011; Hernández y col., 2007; Robbins y Fryer 2003). La consideración común, en todos ellos, es que el coeficiente de difusividad de la humedad dentro del sólido es constante, a pesar de que éste puede variar de manera importante en función de la temperatura de la partícula y de la cantidad de humedad (Kiranoudis y col., 1995; Marinos-Kouris y Maroulis 2006).

Los procesos como el secado intermitente, que involucra tanto transferencia de calor como de masa, suelen ser altamente no-lineales y variantes en el tiempo. Por esta razón, su modelado fenomenológico se torna complejo (más aún, si se considera al Coeficiente de Difusividad como un parámetro variable). Una alternativa para modelar procesos es la lógica difusa que fue propuesta por Zadeh en 1965. La lógica difusa permite caracterizar relaciones funcionales no-lineales, toda vez que tiene la capacidad de manejar las variaciones propias de los sistemas dinámicos; admite una cierta incertidumbre entre la verdad o falsedad de sus proposiciones, a semejanza del raciocinio humano. Lo anterior se hace por medio “funciones de membresía” que asignan grados de pertenencia a las variables de entrada, a partir de las cuales se estima el valor de la variable de respuesta al someter a las primeras a un proceso de inferencia basado en un conjunto de reglas heurísticas previamente establecidas (Jumah y Mujumdar 2005). El grado de pertenencia de un elemento en un conjunto difuso no tiene un significado absoluto, su significado resulta de la comparación con otros grados de pertenencia, en el mismo conjunto difuso (Jang y col., 1997). Es así, que el modelado y control del secado mediante esta técnica, se ha utilizado ampliamente (Váquiro y col., 2008; Jumah y Mujumdar 2005; Zhang y Litchfield 1993).

Con respecto al equipo empleado para el tostado, se puede afirmar que los tostadores tradicionales (cilindros rotatorios) no son higiénicos, además de ser poco eficientes debido a que se emplean altas temperaturas y tiempos largos de tostado para obtener las características deseadas (Bonnländer y col., 2005).

Hoy en día, se utilizan tanto los lechos fluidizados como los lechos fuente, sobre todo para procesos a mayor escala, debido a que presentan mejor control de la operación, mayor uniformidad del producto y mejores tasas de transferencia de calor. En ambos tipos de lechos, el tostado a altas temperaturas y tiempos cortos se hace posible debido a la calidad del mezclado y al intenso contacto del gas con los sólidos (Hernández y col., 2007; Heyd y col., 2007; Sánchez-Ramírez y col., 2007; Murthy y col., 2008). En el caso de los lechos fuente, estos requieren menor consumo de energía que los lechos fluidizados y minimizan la tendencia a que se presente el golpeteo. Arriola (1997) empleó una configuración alternativa al lecho fuente convencional: se trata de la mitad de un lecho fuente rectangular, con tubo de arrastre (lo que permite operar a bajas caídas de presión), que se ha empleado con éxito para el tostado de café (Guatemala-Morales, 2007).

El objetivo del presente trabajo es proponer y analizar dos modelos para describir el comportamiento del Coeficiente de Difusividad efectiva, D_{eff} , en función de la temperatura de la partícula, T_p , y de la humedad reducida del mismo, MR . El primer modelo, es un modelo empírico de parámetros ajustables, mientras que el segundo es un modelo difuso; ambos modelos se incorporaron al modelo difusional de la ley de Fick para evaluar el ajuste de las curvas teóricas de secado a los datos experimentales.

2 Materiales y métodos

2.1 Materia prima

El café verde (*Coffea arabica*) utilizado corresponde a la variedad *Typica* y provino del municipio de Talpa de Allende en Jalisco. Fue cosechado en el año agrícola correspondiente al 2015.

2.2 Procedimiento experimental

Los granos de café verde (*Coffea arabica*) se alimentaron al lecho fuente (Figura 1) para ser tostados. Este dispositivo, como la mayoría de los lechos fuente, consta de dos regiones principales: el ánulo y la fuente. En la región del ánulo (fase densa) se concentra la mayor cantidad de sólidos y se lleva a cabo la transferencia de calor por conducción, en contraste con la región de la fuente (fase diluida) donde las pocas partículas son forzadas a subir por el aire de entrada que propicia la transferencia de calor y masa por convección (Arriola 1997).

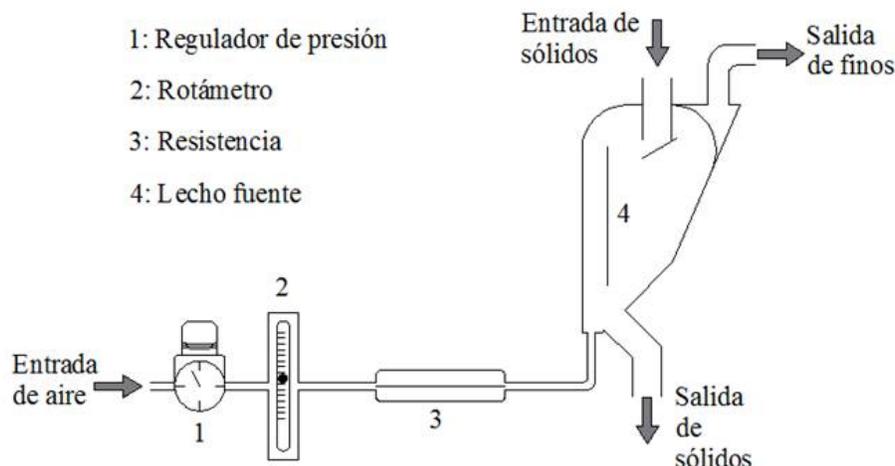


Fig. 1. Diagrama del lecho fuente empleado durante el procedimiento experimental.

Las condiciones iniciales fueron: humedad del grano, $H_0 = 9.87\%$ (base seca), y temperatura del mismo, $T_0 = 23^\circ\text{C}$. Por la parte inferior del lecho se hizo pasar un flujo de 120 L/min de aire caliente, a una presión de $2 \text{ kg}_f/\text{cm}^2$, con dirección principalmente a la fase diluida. Una vez que el grano alcanzó una temperatura superior a 180°C , se reajustó la presión a $1.5 \text{ kg}_f/\text{cm}^2$, ya que la disminución de la densidad de partícula hace más frágil al grano y lo predispone a pérdidas por desgaste. Se probaron tres niveles de temperatura de aire de entrada, T_A : 275, 300 y 325°C . Aproximadamente cada 2 minutos, se tomó una muestra para medir temperatura superficial de la partícula, T_p , por medio de un termómetro infrarrojo Raytek ST Pro (Raytek Corp., Santa Cruz, CA, USA) con precisión de $\pm 1\%$. El contenido de humedad, M , de la muestra se determinó según la norma (NMX-F-083 1986). Para cada temperatura del aire de entrada se realizaron 3 corridas experimentales.

2.3 Desarrollo del modelo difusional

Para la difusión del agua dentro de los granos de café, se utilizó la Segunda Ley de Fick en coordenadas esféricas (Ecuación 1), donde M es la humedad (kg agua/kg totales) en un tiempo determinado; D_{eff} , es el Coeficiente de Difusividad efectiva (m^2/s); t , denota el tiempo (s) y r es la posición radial (m).

$$\frac{\partial M(r,t)}{\partial t} = D_{eff} \left(\frac{\partial^2 M}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial M}{\partial r} \right) \quad (1)$$

A fin de modelar la transferencia de masa (agua) mediante este enfoque, es necesario establecer ciertas

consideraciones por medio de las condiciones inicial y de frontera. Como condición inicial se supuso que a $t = 0$ el contenido de humedad es uniforme e igual a M_0 (Ecuación 2). El contenido de humedad en la superficie de la partícula (en $r = R$) corresponde a la humedad de equilibrio, M_{eq} , con el aire caliente (Ecuación 3) cuando el efecto de la resistencia externa a la transferencia de masa es poco significativo (Simal y col., 2003). Asimismo, se tomó en cuenta que el fenómeno así modelado es simétrico en todos los granos de café (Ecuación 4).

$$M(r,0) = M_0 \quad (2)$$

$$M(R,t) = M_{eq} \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial M}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (4)$$

Con las condiciones mencionadas así establecidas, se tiene que la solución analítica está dada por la expresión siguiente (Crank 1975):

$$MR = \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp \left[-\frac{D_{eff} n^2 \pi^2 t}{R^2} \right] \quad (5)$$

Donde R se refiere al radio equivalente de esfera de la partícula de café. El término MR , denominado humedad reducida, se define como la razón entre la humedad que resta por ser retirada en el tiempo t y la humedad total capaz de ser retirada del sistema Ec. (6) (Hernández-Botello y col., 2014).

$$MR = \frac{M_t - M_{eq}}{M_0 - M_{eq}} \quad (6)$$

M_0 representa la humedad inicial, M_t representa la humedad en el tiempo t y M_{eq} la humedad de equilibrio (kg agua/kg masa seca). Considerando que el contenido de humedad de equilibrio, M_{eq} , es muy pequeño en comparación con el rango de humedad que se tiene durante el proceso de tostado, la ecuación anterior se puede simplificar (Diamante y Munro 1993):

$$MR = \frac{M_t}{M_0} \quad (7)$$

Cuando el coeficiente D_{eff} se considera constante en la Ecuación 5, es común que éste siga un comportamiento tipo Arrhenius respecto a T_A según la relación (Bottazzi y col., 2012; Heyd y col., 2007; Mohapatra y Rao 2005).

$$D_{eff} = D_0 \exp\left[\frac{E_a}{R'(T_A + 273.15)}\right] \quad (8)$$

Donde R' es la constante universal de los gases ($8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$). Cuando la temperatura del aire tiende a infinito la difusividad se acerca al factor pre-exponencial, D_0 . Por otra parte, la energía de activación, E_a , se define como la energía mínima por encima de la cual se lleva a cabo la difusión del agua en la partícula (Hii y col., 2009).

2.4 Estimación del coeficiente de difusividad efectivo

2.4.1 Modelo de parámetros ajustables

Para la estimación de las propiedades de transporte como D_{eff} , se asume que las condiciones de secado son relativamente constantes en el tiempo y que dichas propiedades son independientes de éstas. Por lo anterior, el coeficiente de difusividad efectivo se puede estimar por medio del ajuste de este parámetro a los datos experimentales. Por lo regular se propone un comportamiento tipo Arrhenius para este coeficiente respecto a la temperatura del aire (Bottazzi y col., 2012; Doymaz 2012). Sin embargo, también se ha observado que se puede modelar expresándolo en función de la temperatura de partícula y del contenido de humedad, con ecuaciones de la forma siguiente (Kiranoudis y col., 1995):

$$D_{eff} = D_0 \exp\left(\frac{E_{MR}}{MR}\right) \cdot \exp\left[\frac{E_T}{R'(T_p + 273.15)}\right] \quad (9)$$

Los parámetros a ajustar en la expresión anterior son el factor pre-exponencial, D_0 , y los coeficientes para

los términos exponenciales de humedad reducida y temperatura de partícula (E_{MR} y E_T respectivamente). Para contenidos de humedad altos es importante observar que la Ecuación 9 se simplifica a la expresión típica de Arrhenius (Ecuación 8), mientras que, a temperaturas de partícula altas, el valor de D_{eff} varía significativamente respecto al contenido de humedad es mayor.

Para ajustar los parámetros, se determinaron valores particulares de D_{eff} para cada punto experimental (T_A constante) a partir de valores iniciales para E_{MR} y E_T . Los valores de este coeficiente se incorporaron a la Ec. (5) para estimar un valor teórico de la humedad reducida (MR_{teo}) y contrastarlo con los valores experimentales (MR_{exp}) mediante la suma de errores cuadráticos (Ecuación 10).

$$SSE = \sum_{i=1}^N (MR_{teo,i} - MR_{exp,i})^2 \quad (10)$$

Los valores iniciales se modificaron de tal forma que el valor de SSE fuera el mínimo posible para cada T_A . Para lo anterior se utilizó el algoritmo de optimización evolutivo de Microsoft Excel.

2.4.2 Modelo difuso tipo Mamdani

El esquema general del modelo difuso tipo Mamdani empleado se muestra en la Figura 2. En él se puede apreciar que, para estimar el valor de D_{eff} , se utilizaron dos variables de entrada: MR y T_p . Dichas variables pasaron por un proceso de *fuzzificación* (pasar de variable nítida, o numérica, a variable lingüística). Para tal efecto, se propusieron cinco conjuntos difusos para cada variable, distribuidos a lo largo del rango de valores observado u universo del discurso (U). Este término designa al conjunto de todos los posibles valores que puede tomar una determinada variable. Lo anterior, expresado matemáticamente, queda como sigue:

$$\tilde{M} = \{\tilde{M}^j : j = 1, 2, 3, 4, 5\} \quad (11)$$

$$\tilde{T} = \{\tilde{T}^j : j = 1, 2, 3, 4, 5\} \quad (12)$$

Asimismo, para la variable de salida en su forma lingüística (\tilde{D}) se definió el mismo número de conjuntos difusos.

$$\tilde{D} = \{\tilde{D}^j : j = 1, 2, 3, 4, 5\} \quad (13)$$

Para determinar el grado de pertenencia (μ) de un elemento a cualquiera de los conjuntos difusos para una variable en particular es necesario definir una función de membresía que establezca dicha

pertenencia en términos del intervalo cerrado [0,1]. En el caso del presente trabajo, se propusieron funciones gaussianas a partir de la ecuación:

$$\mu_i^j = \exp \left[-\frac{(x_i - c_i)^2}{2\sigma_i^2} \right] \quad (14)$$

En la Ec. (14), c representa el valor de x_i (humedad reducida o temperatura de partícula) en el que el grado de pertenencia al conjunto en cuestión es la máxima posible (i.e. $\mu = 1$); mientras que σ^2 es la varianza que está asociada con el soporte del conjunto: el conjunto de valores de la variable independiente para los que la función de membresía es mayor a cero (Passino y Yurkovich 1998).

Para cada variable de entrada se propusieron los siguientes valores de c :

$$c_i = \begin{bmatrix} x_{i,min} \\ \frac{1}{4}d_i + x_{i,min} \\ x_{i,med} \\ \frac{3}{4}d_i + x_{i,min} \\ x_{i,max} \end{bmatrix} \quad (15)$$

donde d representa el rango de la variable (la diferencia entre el mayor y el menor dato experimental); mientras que los subíndices min , med y max designan los valores mínimo, medio y máximo, respectivamente.

Para σ se tomó la desviación estándar de la variable para los cinco conjuntos difusos. Tanto los valores de c como los de σ se multiplicaron por un factor de escala, $k_{a,b}$, el que se varió para ajustar el modelo a los datos experimentales. En el mencionado factor, el subíndice a , hace referencia a la variable asociada al conjunto difuso, mientras que el subíndice b , al parámetro que ajusta. De esta forma los conjuntos difusos quedaron definidos para MR y T_p :

$$\mu_i^j = \exp \left\{ -\frac{[x_i - k_{i,c}^j \cdot c_i(j)]^2}{2(k_{i,\sigma} \cdot \sigma)^2} \right\} \quad (16)$$

En la Ecuación 16, el factor de escala para c tomó el valor de 1 para los conjuntos 1 y 5 (i.e. $k_{i,c}^j = 1$ para $j = 1,5$). Lo anterior se hizo para mantener cubierto todo el universo del discurso y evitar que el modelo no contemplara los casos extremos de T_p y MR .

Dado que el modelo propuesto es del tipo Mamdani y como se desconocía el rango de U , se optó por utilizar los valores calculados de D_{eff} con el modelo de parámetros ajustables: 1×10^{-10} y 6×10^{-9} m²/s como límites inferior y superior respectivamente.

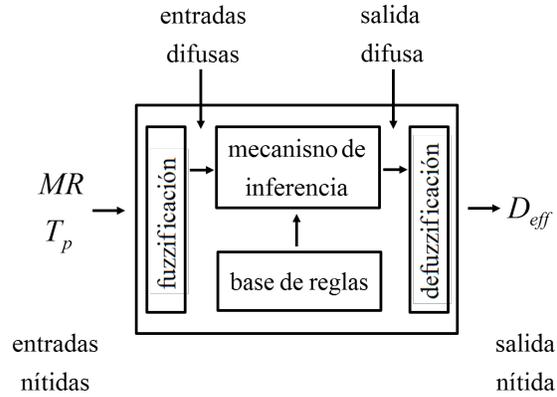


Fig. 2. Esquema general del modelo difuso empleado.

En cuanto a σ se tomó la desviación estándar de los datos antes mencionados. De esta forma los conjuntos difusos para D_{eff} quedaron:

$$\mu_D^j = \exp \left\{ -\frac{[D_{eff} - k_{D,c} \cdot c_D(j)]^2}{2(1.24 \times 10^{-9} \cdot k_{D,\sigma})^2} \right\} \quad (17)$$

Para valores de c_D definidos como:

$$c_D = \begin{bmatrix} 1.00 \times 10^{-10} \\ 1.58 \times 10^{-9} \\ 3.05 \times 10^{-9} \\ 4.53 \times 10^{-9} \\ 6.00 \times 10^{-9} \end{bmatrix} \quad (18)$$

El vector anterior se compone de los tres puntos equidistantes entre sí con los valores límite mencionados. Puesto que el sistema propuesto tiene múltiples entradas y una salida (MISO por sus siglas en inglés *multi-input single-output*), es posible representar la base de reglas como se muestra en la Tabla 1. En dicha tabla los superíndices hacen referencia al número de conjunto difuso del que se trata; mientras mayor sea éste número, mayores serán los valores numéricos asociados. La propuesta de este conjunto de reglas hace hincapié en la correlación existente entre la temperatura de la partícula y el contenido de humedad sobre la difusividad del agua en el grano: conforme la partícula aumenta de temperatura, el valor del coeficiente de difusividad aumenta (comportamiento tipo Arrhenius); mientras que conforme se pierde humedad, la difusividad del agua en la matriz del material es más lenta. Este fenómeno se ha reportado en la literatura para diversos productos alimenticios, tanto para procesos de secado como para procesos de tostado (Marinos-Kouris y Maroulis 2006). Las reglas planteadas en la Tabla 1

son del tipo SI-ENTONCES, donde el antecedente lo forma la disyunción de dos conjuntos difusos para las dos variables de entrada. De esta forma, a manera de ejemplo, se tiene para la casilla encontrada en la primera fila y primera columna la regla en su forma verbalizada de la siguiente manera:

SI M ES \tilde{M}^1 y T_p es \tilde{T}^1 ENTONCES D_{eff} es \tilde{D}^5 .

El método de inferencia para la disyunción de las dos variables de entrada fue la norma T definida como:

$$\mu_{M_i \cap T_i} = \min\{\mu_{M_i}, \mu_{T_i} : x_i \in U_i\} \quad (19)$$

Para el proceso de *defuzzificación* (convertir la variable lingüística a variable nítida) se utilizó el método del centroide. Los dos métodos antes mencionados fueron las opciones predeterminadas del comando *newfis* de Matlab (Mathworks, Inc.) en el que se planteó el modelo difuso. Una vez determinado el modelo, se ajustaron los factores de escala de tal manera que los valores de D_{eff} así estimados, e incorporados en la Ecuación 5, dieran la mínima diferencia entre los valores de humedad reducida teórica y la experimental (Ecuación 10). La optimización se realizó por medio del Método de Nelder-Mead (Lagarias y col., 1998) a través del comando *fminsearch* de Matlab con 1 como el valor inicial para cada factor de escala.

3 Resultados

La Figura 3 muestra el comportamiento de la temperatura de partícula respecto al tiempo de tostado para los tres niveles de temperatura de aire experimentados. En esta figura se puede apreciar un rápido incremento de la temperatura en la fase inicial del proceso de tostado. Para el nivel más bajo de T_A , el incremento de la temperatura de partícula disminuye considerablemente, llegando casi a una fase estacionaria, para $t > 1800$ s. Aunque se ha observado el mismo comportamiento para el tostado en lechos fluidizados (Bruchmüller y col., 2010) y en lechos fuente convencionales (Heyd y col., 2007), el intervalo de tiempo en el que se llega a la temperatura donde comienza el tostado ($T_p \sim 190^\circ\text{C}$) es mucho más amplio en el presente trabajo debido, principalmente, a que las partículas pasan más tiempo en la fase densa que en la diluida.

Con respecto al comportamiento del contenido de humedad en el tiempo, la Figura 4 muestra las cinéticas respectivas para las tres temperaturas de aire. La gráfica presenta las típicas curvas exponenciales

de secado para el periodo de rapidez de secado decreciente, en el que se aprecia que el contenido de humedad es prácticamente independiente de T_A para tiempos mayores a los 1800 segundos.

Tabla 1. Base de reglas para el modelo difuso del coeficiente de difusividad

	\tilde{T}^1	\tilde{T}^2	\tilde{T}^3	\tilde{T}^4	\tilde{T}^5
\tilde{M}^1	\tilde{D}^5	\tilde{D}^5	\tilde{D}^5	\tilde{D}^5	\tilde{D}^5
\tilde{M}^2	\tilde{D}^4	\tilde{D}^4	\tilde{D}^4	\tilde{D}^4	\tilde{D}^5
\tilde{M}^3	\tilde{D}^3	\tilde{D}^3	\tilde{D}^3	\tilde{D}^4	\tilde{D}^5
\tilde{M}^4	\tilde{D}^2	\tilde{D}^2	\tilde{D}^3	\tilde{D}^4	\tilde{D}^5
\tilde{M}^5	\tilde{D}^1	\tilde{D}^2	\tilde{D}^3	\tilde{D}^4	\tilde{D}^5

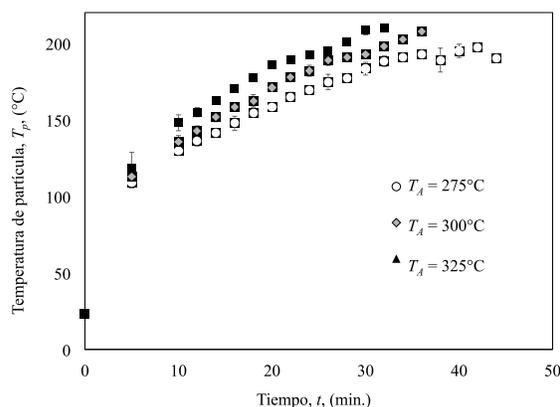


Fig. 3. Comportamiento de la temperatura de partícula (T_p) en función del tiempo de tostado para diferentes temperaturas de aire (T_A).

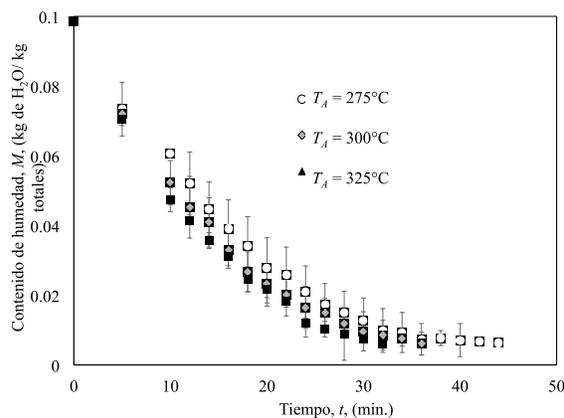


Fig. 4. Comportamiento del contenido de humedad de la partícula (M) en función del tiempo de tostado para diferentes temperaturas de aire (T_A).

La Tabla 2, muestra los valores de D_{eff} estimados para las cinéticas de tostado a cada una de las temperaturas de aire de tostado (T_A). Las columnas de R^2 y SSE muestran la bondad de ajuste del modelo difusivo (Ecuación 5) a los datos experimentales. Los valores de D_0 y E_a se refieren a los parámetros del Modelo de Arrhenius (Ecuación 8) para los que el coeficiente de determinación fue de 0.98110. Si bien el ajuste considerando D_{eff} constante explica en más del 95% la variabilidad del proceso, la suma de los errores cuadráticos es considerablemente alta para todos los niveles (> 0.01).

En contraste con lo anterior, la Tabla 3 muestra los valores de las constantes para la Ecuación 9, la cual, incorporada a la Ecuación 5, presenta mejores ajustes ($SSE < 0.01$). En los tres parámetros se puede observar una correlación negativa respecto a la temperatura del aire, lo que sugiere un comportamiento tipo Arrhenius tal como lo apuntan los datos experimentales recabados por Marinou-Kouris y Maroulis (2006) para diversos alimentos. Se puede notar asimismo, que el valor del factor pre-exponencial en la Tabla 2 es del mismo orden de

magnitud que el de los valores reportados en el Tabla 3 al igual que la energía de activación, E_a , y su parámetro análogo, E_T .

Con respecto al modelo difuso tipo Mamdani, la Tabla 4 detalla los valores optimizados para los factores de escala, así como los parámetros de la bondad del ajuste, pudiéndose apreciar un incremento considerable del coeficiente de determinación respecto a lo reportado en la Tabla 3 para el modelo de parámetros ajustables, a la vez que el valor de SEE disminuye, por lo menos, en dos órdenes de magnitud. Para la variable de salida del modelo, se encontró que los valores del factor de escala para la base de los conjuntos difusos ($k_{D,\sigma}$) aumentaron en promedio un 15%, en contraste con los respectivos para las variables de entrada que se estrecharon en un 80%. En cuanto a los valores de c se refiere, los conjuntos difusos para MR tuvieron un desplazamiento significativo respecto a la otra variable de entrada, lo que puede deberse a una mayor densidad de puntos experimentales en las regiones de menor humedad reducida.

Tabla 2. Estimación de valores constantes de D_{eff} y valores de los parámetros de Arrhenius (Ecuación 8) para los diferentes niveles de T_A probados

T_A (°C)	$D_{eff} \times 10^9$ (m ² /s)	R^2	SSE	$D_0 \times 10^8$ (m ² /s)	$E_a \times 10^{-3}$ (J/mol)
275	2.7139	0.97598	0.117370		
300	1.5614	0.98636	0.076417	2.6730	10.329
325	1.1161	0.99045	0.079977		

Tabla 3. Valores de los parámetros de la Ecuación 9 para los diferentes niveles de T_A probados

T_A (°C)	$D_0 \times 10^8$ (m ² /s)	$E_{MR} \times 10^6$ (-)	$E_T \times 10^{-3}$ (J/mol)	R^2	SSE
275	3.9322	189.517	26.458	0.99660	0.0044967
300	0.19653	13.5768	15.248	0.99391	0.0099968
325	0.040272	1.2206	9.2121	0.98336	0.024762

Tabla 4. Valores optimizados de los factores de escala del modelo difuso para los diferentes niveles de T_A probados y parámetros de bondad de ajuste

T_A (°C)	μ_{MR}^j		μ_T^j		μ_D^j		R^2	SSE
	$k_{MR,\sigma}$	$k_{MR,c}$	$k_{T,\sigma}$	$k_{T,c}$	$k_{D,\sigma}$	$k_{D,c}$		
275	0.24487	0.13126	0.19113	0.81646	1.1729	0.65472	0.99904	0.00124367
300	0.22540	0.12515	0.20341	0.92308	1.0775	0.68854	0.99978	0.00023537
325	0.21576	0.11373	0.20931	0.89711	1.1766	0.79201	0.99952	0.00045659

Las Figuras 5, 6 y 7 muestran los valores de D_{eff} que predice el modelo para $T_A= 275, 300$ y 325°C , respectivamente. En estas figuras se colocaron los puntos experimentales de coordenadas (MR, T_p) con el objeto de visualizar la evolución del coeficiente, D_{eff} , a lo largo del proceso de tostado. Se puede observar que el valor de D_{eff} exhibe un incremento desde el inicio del proceso (valores altos de MR y bajos de T_p) hasta el término del mismo (valores bajos de MR y altos de T_p). En las gráficas de contorno se aprecia que el efecto de T_p es más relevante, puesto que los valores del coeficiente aumentan durante el proceso de tostado aún cuando el contenido de humedad sea menor, lo que implicaría una disminución en la magnitud de éste.

Es importante señalar que existen regiones en las gráficas en las que se aprecia un comportamiento irregular (intervalo $320\text{K} < T_p < 380\text{K}$). Estas regiones coinciden con la ausencia de puntos experimentales puesto que se trata de la fase inicial del tostado en el que ocurre el mayor descenso de contenido de humedad acompañado de un aumento súbito de temperatura superficial. Asimismo, los valores para D_{eff} no tienen el comportamiento esperado, a diferencia de aquellas regiones en las que sí se tienen valores experimentales. Por lo demás, los valores estimados, empleados durante el proceso de tostado, sirven para predecir con muy buen ajuste ($R^2 > 0.999$ y $SEE < 0.001$) los valores de humedad reducida experimental.

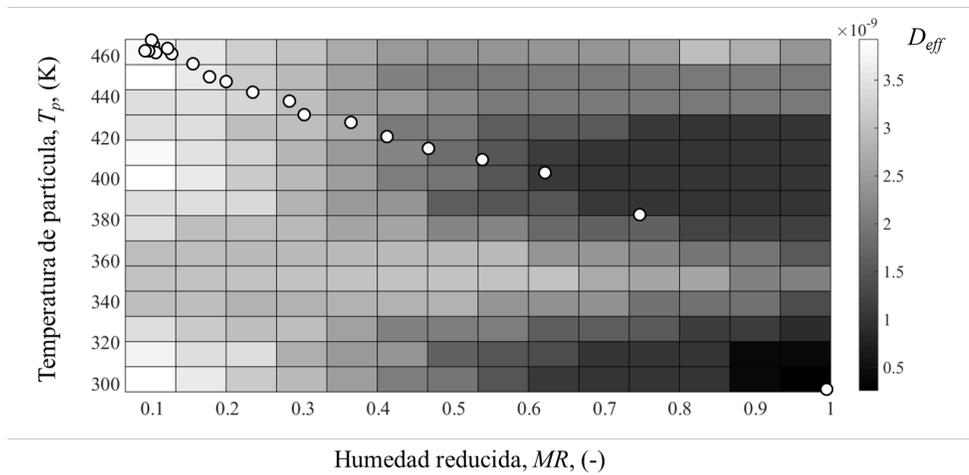


Fig. 5. Gráfica de contorno de D_{eff} en función de T_p y MR para una temperatura del aire de 275°C .

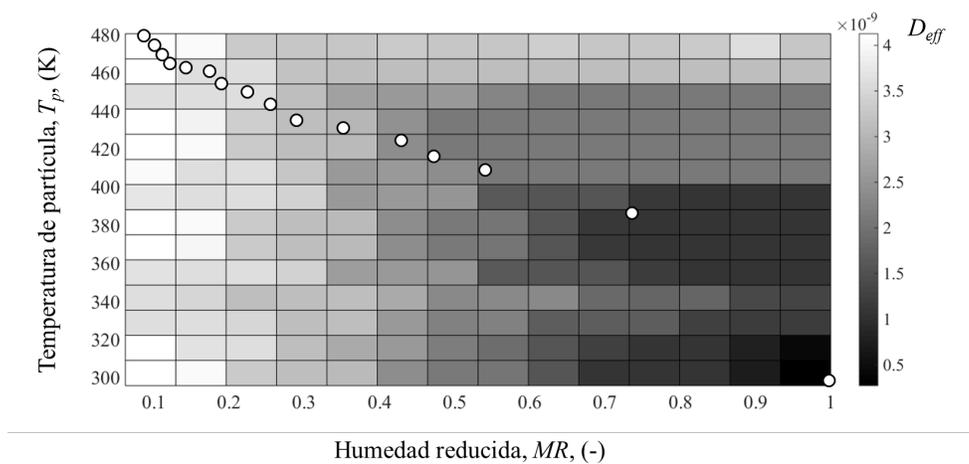


Fig. 6. Gráfica de contorno de D_{eff} en función de T_p y MR para una temperatura del aire de 300°C .

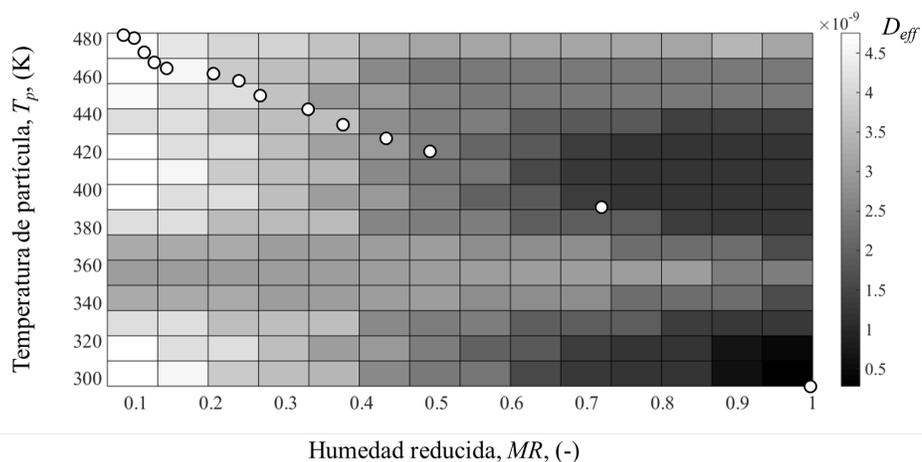


Fig. 7. Gráfica de contorno de D_{eff} en función de T_p y MR para una temperatura del aire de 325°C .

La Figura 8 muestra el ajuste entre la humedad reducida experimental y la humedad reducida teórica estimada a partir de los dos enfoques mencionados, junto con la consideración habitual de D_{eff} constante a lo largo del proceso (modelo 1). Para lo anterior, se emplearon los datos experimentales de las corridas de tostado a $T_A=300^{\circ}\text{C}$. La gráfica revela desviaciones importantes en las etapas tempranas del tostado ($MR > 0.4$) para la consideración del coeficiente constante y el modelo de parámetros ajustables (modelo 2), mientras que en las etapas finales se observa un mejor ajuste para los tres modelos, aunque el modelo 1 presenta mayor desviación que el resto. En contraste, el modelo difuso (modelo 3) no muestra diferencia alguna entre los datos experimentales y teóricos.

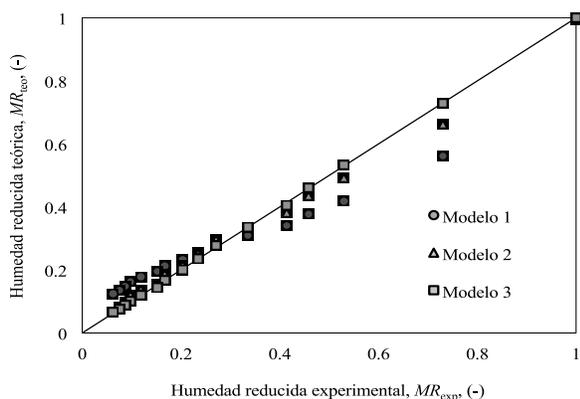


Fig. 8. Diferencia entre los valores de MR experimentales y teóricos a partir de los tres modelos propuestos para $T_A=300^{\circ}\text{C}$.

Conclusiones

En este trabajo se propusieron dos enfoques para modelar el Coeficiente de Difusividad efectiva, D_{eff} , durante el proceso de tostado de café en un lecho fuente. El modelo de parámetros ajustables, una extensión del modelo de Arrhenius, explica en más de un 98% la variabilidad de los datos experimentales; además, el ajuste del modelo fue el mejor entre menor es la temperatura del aire de la fuente. Adicionalmente, se comprobó el efecto de la inclusión del contenido de humedad para predecir el valor de D_{eff} . Los parámetros ajustados disminuyeron en un orden de magnitud de un nivel a otro de la temperatura del aire, T_A , lo que sugiere que en la Ecuación (9) se puede reducir el factor pre-exponencial, D_0 , para temperaturas mayores, puesto que el contenido de humedad se acercaría con mayor rapidez a la humedad de equilibrio, en tanto que la temperatura de la partícula, T_p , aumentaría de tal manera que el segundo factor de dicha ecuación tendiera a la unidad. Si se considera un valor constante para D_{eff} , los valores así calculados se encuentran dentro del rango de valores estimados mediante el mencionado enfoque.

El modelo difuso tipo Mamdani permitió obtener estimaciones para D_{eff} que, una vez incorporadas a la solución analítica de la Segunda Ley de Fick (Ecuación 5), presentaron el mejor ajuste a los datos experimentales del proceso de tostado desde el punto de vista de una cinética de secado. Sin embargo, las estimaciones que arrojó el modelo para dicho parámetro, no son del todo acertadas en las condiciones en las que se carece de puntos

experimentales. Puesto que este modelo es un modelo semi-empírico, existen regiones en el plano de T_p vs MR que presentan valores muy variables respecto a las zonas que sí describen la trayectoria del proceso de tostado. Si se busca modelar el comportamiento del tostado en el tiempo, el modelo difuso es una buena opción que, además, ilustra el comportamiento de la difusión del contenido de humedad a lo largo del proceso en el que la temperatura superficial del sólido tiene mayor peso. Es posible, además, mejorar el modelo por medio de más datos experimentales, de manera particular teniendo valores en las primeras fases de tostado.

Agradecimientos

Agradecemos el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca otorgada al primer autor para obtener el doctorado en Ciencia y Tecnología, opción terminal en Procesos Agroindustriales, dentro del programa de doctorado del Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco, A.C. (CIATEJ), incluido en el padrón de Posgrados de Excelencia, con el convenio 471-0.

Nomenclatura

c	parámetro de la función gaussiana en la ecuación 13, (-) °C o $m^2 \cdot s^{-1}$
d	rango de la variable x_i , (-) o (°C)
\tilde{D}^j	j -ésimo conjunto difuso para el coeficiente de difusividad efectiva
D_0	factor pre-exponencial, $m^2 \cdot s^{-1}$
D_{eff}	coeficiente de difusividad efectiva, $m^2 \cdot s^{-1}$
E_a	energía de activación, $J \cdot mol^{-1}$
E_{MR}	parámetro de ajuste para la ecuación 8
E_T	parámetro de ajuste para la ecuación 8, $J \cdot mol^{-1}$
k	factor de escala empleado en las ecuaciones (16)-(17)
M	contenido de humedad de la partícula, kg de H_2O (kg masa seca) $^{-1}$
\tilde{M}^j	j -ésimo conjunto difuso para la humedad reducida
MR	humedad reducida de la partícula
n	términos de la sumatoria para la ecuación 5
N	número de puntos experimentales
r	posición radial, m
R	radio equivalente de esfera, (m)
R'	constante universal de los gases, $8.314 J (mol \cdot K)^{-1}$

SEE	suma de errores cuadráticos, $(kg \text{ de } H_2O)^2 (kg \text{ masa seca})^{-2}$
t	tiempo, s
T	temperatura, °C
\tilde{T}^j	j -ésimo conjunto difuso para la temperatura de partícula
U	universo del discurso, (-), °C, o $m^2 \cdot s^{-1}$
x	posición en coordenadas rectangulares, m
x_i	variable de entrada para el modelo difuso, (-), °C o $m^2 \cdot s^{-1}$

Símbolos griegos

μ	grado de pertenencia de un valor a un conjunto difuso
σ	desviación estándar para el conjunto de valores de x , (-), °C o $m^2 \cdot s^{-1}$

Subíndices

0	inicial
A	aire
D	coeficiente de difusividad efectiva
eq	equilibrio
exp	experimental
máx	valor máximo
med	mediana
min	valor mínimo
MR	humedad reducida
p	partícula
T	temperatura de partícula
teo	teórico

Referencias

- Arriola, E. (1997). Residence time distribution of solids in staged spouted beds. PhD Thesis. Oregon State University.
- Baggenstoss, J., Poisson, L., Kaegi, R., Perren, R. y Escher, F. (2008). Coffee roasting and aroma formation: application of different time-temperature conditions. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 56, 5836-5846.
- Baggenstoss, J., Poisson, L., Luethi, R., Perren, R. y Escher, F. (2007). Influence of water quench cooling on degassing and aroma stability of roasted coffee. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 55, 6685-6691.
- Basile, M. y Kikic, I. (2009). A lumped specific heat capacity approach for predicting the non-stationary thermal profile of coffee during roasting. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly* 23, 167-177.

- Bonnländer, B., Eggers, R., Engelhardt, U.H. y Maier, H.G. (2005). Roasting. En: *Espresso Coffee: the Science of Quality*, (Illy, A. y Viani, R. Eds.), Pp. 179-214. Elsevier Ltd.
- Bottazzi, D., Farina, S., Milani, M. y Montorsi, L. (2012). A numerical approach for the analysis of the coffee roasting process. *Journal of Food Engineering* 112, 243-252.
- Bruchmüller, J., Gu, S., Luo y Van Wachem, B.G.M. (2010). Discrete element method for multiscale modeling. *Journal of Multiscale Modelling* 2, 147-162.
- Buffo, R.A. y Cardelli-Freire, C. (2004). Coffee flavour: an overview. *Flavour and Fragrance Journal* 19, 99-104.
- Crank, J. (1975). *The Mathematics of Diffusion*. Segunda edición. Editorial Oxford University Press, Oxford.
- Diamante, L. M. y Munro, P.A. (1993). Mathematical modelling of the thin layer solar drying of sweet potato slices. *Solar Energy* 51, 271-276.
- Doymaz, I. (2012). Evaluation of some thin-layer drying models of persimmon slices (*diospyros kaki* L.). *Energy Conversion and Management* 56, 199-205.
- Fabbri, A., Cevoli, C., Alessandrini, L. y Romani, S. (2011). Numerical modeling of heat and mass transfer during coffee roasting process. *Journal of Food Engineering* 105, 264-269.
- Guatemala-Morales, G.M. (2007). Tostado de café (*coffea arábica*) utilizando un sistema de lechos fuente en multietapa. Tesis de Doctorado en Ciencias en Ingeniería Química. Universidad de Guadalajara.
- Henry, V. (2008). Fuzzy logic application to drying kinetics modelling. Presentación. Pp. 2206-11. Seoul, Korea: 17th IFAC World Congress
- Hernández, J. A., Heyd, B., Irlas, C., Valdovinos, B. y Trystram G. (2007). Analysis of the heat and mass transfer during coffee batch roasting. *Journal of Food Engineering* 78, 1141-1148.
- Hernández-Botello, M.T., Chanona-Pérez, J.J., Mendoza-Pérez, J.A., Trejo-Valdez, M., Calderón-Domínguez, G., Barriada Pereira, J.L., Sastre de Vicente, M.E., Perea-Flores, M.J. y Terres-Rojas, E. (2014). Effect of the fluidized bed drying on the structure and biosorption capability of Pb^{+2} of agave epidermis. *Revista Mexicana de Ingeniería Química* 13, 865-885.
- Heyd, B., Broyart, B., Hernandez, J.A., Valdovinos-Tijerino, B. y Trystram, G. (2007). Physical model of heat and mass transfer in a spouted bed coffee roaster. *Drying Technology* 25, 1243-1248.
- Hii, C. L., Law, C.L. y Cloke, M. (2009). Modeling using a new thin layer drying model and product quality of cocoa. *Journal of Food Engineering* 90, 191-198.
- Jumah, R. y Mujumdar, A.S. (2005). Modeling intermittent drying using an adaptive neuro-fuzzy inference system. *Drying Technology* 23, 1075-1092.
- Kiranoudis, C. T., Maroulis, Z.B. y Marinou-Kouris, D. (1995). Heat and mass transfer model building in drying with multiresponse data. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 38, 463-480.
- Lagarias, J.C., Reeds, J.A., Wright, M.H. y Wright, P.E. (1998). Convergence properties of the nelder-meade simplex method in low dimensions. *SIAM Journal on Optimization* 9, 112-147.
- Marinou-Kouris, D. y Maroulis, Z.B. (2006). Transport properties in the drying of solids. En: *Handbook of Industrial Drying* (Mujumdar, A.S. Eds.). CRC Press. Pp. 81-119.
- Mohapatra, D. y Srinivasa Rao, P. (2005). A thin layer drying model of parboiled wheat. *Journal of Food Engineering* 66, 513-518.
- Murthy, K. V., Ravi, R., Bhat, K. K., y Raghavarao, K.S.M.S. (2008). Studies on roasting of wheat using fluidized bed roaster. *Journal of Food Engineering* 89, 336-342.
- NMX-F-083. (1986). Determinación de Humedad En Productos Alimenticios. Dirección General de Normas Mexicanas.
- Passino, K. y Yurkovich, S. (1998). *Fuzzy control*. Addison-Wesley. EEUU.

Robbins, P. T. y Fryer, P.J. (2003). The spouted-bed roasting of barley: development of a predictive model for moisture and temperature. *Journal of Food Engineering* 59, 199-208.

Simal, S., Femenia, A., Garcia-Pascual, P. y Rosselló, C. (2003). Simulation of the drying curves of

a meat-based product: effect of the external resistance to mass transfer. *Journal of Food Engineering* 58, 193-199.

Zhang, Q., y Litchfield, J.B. (1993). Fuzzy logic control for a continuous crossflow grain dryer. *Journal of Food Process Engineering* 16, 59-77.