



CARTA DE AUTORIZACIÓN

CÓDIGO

AP-BIB-FO-06

VERSIÓN

1

VIGENCIA

2014

PÁGINA

1 de 1

Neiva, 15 de enero de 2018

Señores

CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN

UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA

Ciudad

El suscrito

Gentil Andres Collazos Escobar con C.C. No. 1075264931, autor del trabajo de grado titulado: Desarrollo y modelado de las isotermas de sorción y del calor isoterico de sorción en café (*Coffee arabica*), presentado y aprobado en el año 2018 como requisito para optar al título de Ingeniero Agrícola; autorizo al CENTRO DE INFORMACIÓN Y DOCUMENTACIÓN de la Universidad Surcolombiana para que con fines académicos, muestre al país y el exterior la producción intelectual de la Universidad Surcolombiana, a través de la visibilidad de su contenido de la siguiente manera:

- Los usuarios puedan consultar el contenido de este trabajo de grado en los sitios web que administra la Universidad, en bases de datos, repositorio digital, catálogos y en otros sitios web, redes y sistemas de información nacionales e internacionales “open access” y en las redes de información con las cuales tenga convenio la Institución.
- Permita la consulta, la reproducción y préstamo a los usuarios interesados en el contenido de este trabajo, para todos los usos que tengan finalidad académica, ya sea en formato Cd-Rom o digital desde internet, intranet, etc., y en general para cualquier formato conocido o por conocer, dentro de los términos establecidos en la Ley 23 de 1982, Ley 44 de 1993, Decisión Andina 351 de 1993, Decreto 460 de 1995 y demás normas generales sobre la materia.
- Continúo conservando los correspondientes derechos sin modificación o restricción alguna; puesto que de acuerdo con la legislación colombiana aplicable, el presente es un acuerdo jurídico que en ningún caso conlleva la enajenación del derecho de autor y sus conexos.

De conformidad con lo establecido en el artículo 30 de la Ley 23 de 1982 y el artículo 11 de la Decisión Andina 351 de 1993, “Los derechos morales sobre el trabajo son propiedad de los autores”, los cuales son irrenunciables, imprescriptibles, inembargables e inalienables.

EL AUTOR/ESTUDIANTE: Gentil Andres Collazos Escobar

Firma:

Vigilada Mineducación

La versión vigente y controlada de este documento, solo podrá ser consultada a través del sitio web Institucional [www.usco.edu.co](http://www.usco.edu.co), link Sistema Gestión de Calidad. La copia o impresión diferente a la publicada, será considerada como documento no controlado y su uso indebido no es de responsabilidad de la Universidad Surcolombiana.



<b>CÓDIGO</b>	<b>AP-BIB-FO-07</b>	<b>VERSIÓN</b>	<b>1</b>	<b>VIGENCIA</b>	<b>2014</b>	<b>PÁGINA</b>	<b>1 de 3</b>
---------------	---------------------	----------------	----------	-----------------	-------------	---------------	---------------

**TÍTULO COMPLETO DEL TRABAJO:** Desarrollo y modelado de las isotermas de sorción y del calor isostérico de sorción en café

**AUTOR O AUTORES:**

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Collazos Escobar	Gentil Andres

**DIRECTOR Y CODIRECTOR TESIS:**

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Gutierrez Guzman	Nelson
Vaquiرو Herrera	Henry Alexander

**ASESOR (ES):**

Primero y Segundo Apellido	Primero y Segundo Nombre
Cortes Macias	Erika Tatiana

**PARA OPTAR AL TÍTULO DE:** Ingeniero Agrícola

**FACULTAD:** Ingeniería

**PROGRAMA O POSGRADO:** Ingeniería Agrícola

**CIUDAD:** Neiva

**AÑO DE PRESENTACIÓN:** 2018

**NÚMERO DE PÁGINAS:** 20

**TIPO DE ILUSTRACIONES** (Marcar con una X):

Diagramas\_\_\_ Fotografías\_\_\_ Grabaciones en discos\_\_\_ Ilustraciones en general\_x\_ Grabados\_\_\_  
Láminas\_\_\_ Litografías\_\_\_ Mapas\_\_\_ Música impresa\_\_\_ Planos\_\_\_ Retratos\_\_\_ Sin ilustraciones\_\_\_ Tablas  
o Cuadros\_x\_

**SOFTWARE** requerido y/o especializado para la lectura del documento:

Vigilada mieducación

La versión vigente y controlada de este documento, solo podrá ser consultada a través del sitio web Institucional [www.usco.edu.co](http://www.usco.edu.co), link Sistema Gestión de Calidad. La copia o impresión diferente a la publicada, será considerada como documento no controlado y su uso indebido no es de responsabilidad de la Universidad Surcolombiana.



<b>CÓDIGO</b>	<b>AP-BIB-FO-07</b>	<b>VERSIÓN</b>	<b>1</b>	<b>VIGENCIA</b>	<b>2014</b>	<b>PÁGINA</b>	<b>2 de 3</b>
---------------	---------------------	----------------	----------	-----------------	-------------	---------------	---------------

**MATERIAL ANEXO:**

**PREMIO O DISTINCIÓN** (*En caso de ser LAUREADAS o Meritoria*):

**PALABRAS CLAVES EN ESPAÑOL E INGLÉS:**

<u>Español</u>	<u>inglés</u>
1. Actividad de agua	Water activity
2. Propiedades de sorción	Sorption properties
3. Contenido de humedad de equilibrio	Equilibrium moisture content
4. Higroscopicidad	Hygroscopicity

**RESUMEN DEL CONTENIDO:** (Máximo 250 palabras)

El café es uno de los productos básico más valiosos que exportan los países en desarrollo. Las prácticas y condiciones de producción, procesamiento y almacenamiento determinan las características físicas y sensoriales para clasificar el café como producto de alta calidad. Las isoterms de sorción representan la relación entre la actividad de agua y el contenido de humedad en un alimento a una temperatura constante; el conocimiento de estas relaciones permite un adecuado manejo, conservación, transformación y consumo en alimentos. El objetivo de este trabajo fue evaluar y modelar las curvas de equilibrio higroscópico obtenidas de los procesos de adsorción y desorción en café verde y tostado para diferentes temperaturas (25°, 30° y 40°C) y un amplio rango de actividad de agua (0,1-0,8), mediante el método de la isoterma dinámica de punto de rocío (DDI). Los datos experimentales de sorción fueron ajustados a 12 modelos matemáticos frecuentemente utilizados para representar la dependencia del contenido de humedad de equilibrio con la actividad de agua y la temperatura. Los resultados presentaron que el modelo de DLP para café verde y el modelo de Weibull para café tostado resultaron la mejor opción para representar la higroscopicidad de los granos de café verde y tostado y permiten predecir el contenido de humedad de equilibrio en un amplio rango de actividad de agua y diferentes temperaturas experimentales. El calor de sorción neto isostérico aumenta con el aumento del contenido de humedad, lo que indica una fuerte energía de enlace entre las moléculas de agua y los componentes del producto.



**ABSTRACT:** (Máximo 250 palabras)

Coffee is one of the most valuable commodities exported by developing countries. The practices and conditions of production, processing and storage determine the physical and sensory characteristics to classify coffee as a high quality product. Sorption isotherms represent the relationship between water activity and moisture content in a food at a constant temperature; the knowledge of these relationships allows the proper management, conservation, transformation and consumption in food. The objective of this work was to evaluate and model the hygroscopic balance curves of the adsorption and desorption processes in green and roasted coffee for different temperatures (25 °, 30 ° and 40 ° C) and a wide range of water activity 0, 1-0.8), by means of the dynamic dew point isotherm (DDI) method. The experimental sorption data were adjusted to 12 mathematical models used to represent the dependence of equilibrium moisture content with water activity and temperature. The results presented the model of DLP for green coffee and the model of Weibull for roasted coffee were the best option to represent the hygroscopicity of green and roasted coffee beans and allow to predict the equilibrium moisture content in a wide range of activity of water and different experimental temperatures. The net sorption heat is an increase with the increase of the moisture content, which indicates a strong binding energy between the water molecules and the components of the product.

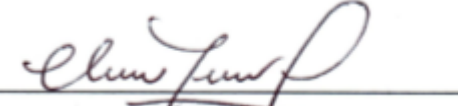
**APROBACION DE LA TESIS**

Nombre Presidente Jurado: Nelson Gutiérrez Guzmán

  
Ph. D. NELSON GUTIÉRREZ GUZMÁN  
Director

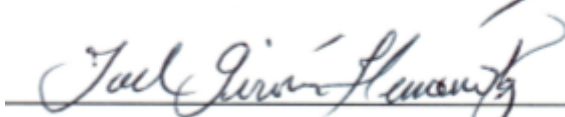
Firma:

Nombre Jurado: Claudia Milena Amorocho Cruz

  
Firma:

Nombre Jurado: Joel Lunier Giron Hernández

Firma:



**DESARROLLO Y MODELADO DE LAS ISOTERMAS DE SORCIÓN Y DEL CALOR ISOSTERICO DE  
SORCIÓN EN CAFÉ**

**GENTIL ANDRES COLLAZOS ESCOBAR**

**UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA**

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**INGENIERIA AGRICOLA**

**NEIVA – HUILA**

**2018**

**DESARROLLO Y MODELADO DE LAS ISOTERMAS DE SORCIÓN Y DEL CALOR ISOSTERICO DE  
SORCIÓN EN CAFÉ**

**GENTIL ANDRES COLLAZOS ESCOBAR**

**Proyecto presentado a la Facultad de Ingeniería como requisito parcial para optar al título de Ingeniero  
Agrícola**

**Director:**

**NELSON GUTIERREZ GUZMAN**

**Dr. CIENCIA Y TECNOLOGIA DE ALIMENTOS**

**Co-director:**

**HENRY ALEXANDER VAQUIRO HERRERA**

**Dr. CIENCIA Y TECNOLOGIA DE ALIMENTOS**

**UNIVERSIDAD SURCOLOMBIANA**

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**INGENIERIA AGRICOLA**

**NEIVA – HUILA**

**2018**

**NOTA DE ACEPTACIÓN**

---

---

---

---

---

---

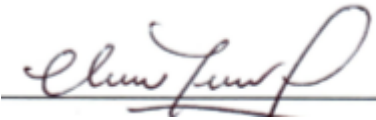
---

---

---

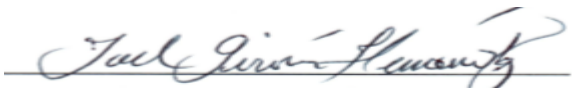
---

---



---

**CLAUDIA MILENA AMOROCHO CRUZ**  
Jurado



---

**JOEL LUNIER GIRON HERNANDEZ**  
Jurado



---

Ph. D. NELSON GUTIÉRREZ GUZMÁN  
Director

**NELSON GUTIÉRREZ GUZMÁN**  
Director

# Desarrollo y modelado de las isotermas de sorción y del calor isostérico de sorción en café (*Coffea arabica*)

## Development and modeling of sorption isotherms and isosteric heat in coffee (*Coffea arabica*)

Gentil Andres Collazos-Escobar<sup>1</sup>., Erika Tatiana Cortes Macias<sup>1</sup>., Nelson Gutiérrez-Guzmán<sup>1</sup> y Henry Alexander Váquiro Herrera<sup>2</sup>

---

### Resumen

El café es uno de los productos básicos más valiosos que exportan los países en desarrollo. Las prácticas y condiciones de producción, procesamiento y almacenamiento determinan las características físicas y sensoriales para clasificar el café como producto de alta calidad. Es un producto altamente higroscópico y durante las operaciones de manejo puede ganar o perder humedad del ambiente. Mediante las isotermas de sorción, la transferencia de masa desde y hacia el alimento se puede predecir, asimismo su consecuente probabilidad de deterioro. Las isotermas de sorción representan la relación entre la actividad de agua y el contenido de humedad en un alimento a una temperatura constante; el conocimiento de estas relaciones permite un adecuado manejo, conservación, transformación y consumo en alimentos. El objetivo de este trabajo fue evaluar y modelar las curvas de equilibrio higroscópico obtenidas de los procesos de adsorción y desorción en café verde y tostado para diferentes temperaturas (25°, 30° y 40°C) y un amplio rango de actividad de agua (0,1-0,8), mediante el método de la isoterma dinámica de punto de rocío (DDI). Se realizaron isotermas de trabajo con intervalo de actividad de agua en adsorción 0,01aw y desorción 0,05aw. Los datos experimentales de sorción fueron ajustados a 12 modelos matemáticos frecuentemente utilizados para representar la dependencia del contenido de humedad de equilibrio con la actividad de agua y la temperatura. Los resultados presentaron que el modelo de DLP para café verde y el modelo de Weibull para café tostado resultaron la mejor opción para representar la higroscopicidad de los granos de café verde y tostado y permiten predecir el contenido de humedad de equilibrio en un amplio rango de actividad de agua y diferentes temperaturas experimentales.

**Palabras clave:** actividad de agua; propiedades de sorción; contenido de humedad de equilibrio; higroscopicidad

### Abstract

Coffee is one of the most valuable commodities exported by developing countries. The practices and conditions of production, processing and storage determine the physical and sensory characteristics to classify coffee as a high quality product. It is a highly hygroscopic product and with the control operations can gain or lose moisture from the environment. Through the sorption isotherms, the mass transfer to and from the food can be predicted, as well as the probability of deterioration. Sorption isotherms represent the relationship between water activity and moisture content in a food at a constant temperature; the knowledge of these relationships allows the proper management, conservation, transformation and consumption in food. The objective of this work was to evaluate and model the hygroscopic balance curves of the adsorption and desorption processes in green and roasted coffee for different temperatures (25°, 30° and 40°C) and a wide range of water activity (0, 1-0.8), by means of the dynamic dew point isotherm (DDI) method. Work isotherms with water activity interval in 0.01aw adsorption and 0.05aw desorption were performed.



The experimental sorption data were adjusted to 12 mathematical models used to represent the dependence of equilibrium moisture content with water activity and temperature. The results presented the model of DLP for green coffee and the model of Weibull for roasted coffee were the best option to represent the hygroscopicity of green and roasted coffee beans and allow to predict the equilibrium moisture content in a wide range of activity of water and different experimental temperatures

**Keywords:** water activity, sorption properties, equilibrium moisture content, hygroscopicity

## 1. Introducción

El café es una bebida antigua que tiene una relación inseparable con el desarrollo de la civilización humana (Tsai, *et al.*, 2016), es considerado uno de los productos más importantes en el mundo debido a los ingresos de industrialización y exportación además de los directos e indirectos relacionados con este producto (Corrêa, *et al.*, 2014), además es el segundo producto legal más valioso del mundo (Ramírez-Martínez, *et al.*, 2013). El café (*Coffea arabica*) es una bebida popular en todo el mundo (Nilnont, *et al.*, 2011); es uno de los productos agrícolas más valiosos que representa dos tercios del mercado mundial del café (Aerts, *et al.*, 2013). El café es una planta tropical que crece a 600-1800 m sobre el nivel del mar; es originaria de Etiopía, desde donde se extendió primero a India y luego a Indonesia, Brasil, Colombia y América Central (Özdestan, *et al.*, 2013). El café pertenece a la familia de las rubiáceas (Rubiaceae), grupo que engloba unos 500 géneros y más de 6.000 especies, la mayoría árboles y arbustos tropicales. Dentro del género *Coffea* hay más de 100 especies, todas ellas autóctonas de África tropical y de algunas islas de Océano Índico, como Madagascar. Todas son leñosas, pero comprenden desde arbustos hasta árboles de 5 a 10 metros de altura. Sus hojas son elípticas, acabadas en punta y aparecen por pares. Los frutos son tipo drupa, con epicarpio carnoso y doble semilla. Las flores aparecen en inflorescencias (Rojo y Pérez-Urria, 2014).

La planta de café es un arbusto con hojas de color verde oscuro que puede ser sembrado desde los valles que están a 750 msnm, hasta las más pronunciadas montañas superando los 1800 msnm; a pesar de que algunos autores aseguran que existen más de 30 especies del género *Coffea*, por tradición e importancia comercial, se destacan la Arábica (*Coffea Arábica*) y la Robusta (*Coffea Robusta*). Por sus características de material higroscópico, el café en los estados de almendra verde y tostada es muy susceptible al intercambio de humedad con el ambiente, con la posibilidad de acelerar reacciones de deterioro (De Oliveira, *et al.*, 2009). Los sistemas alimentarios pueden presentar cambios físicos, químicos y biológicos, que pueden causar transiciones de fase debidas a efectos de temperatura y presión. El agua es un factor relevante porque afecta las propiedades físicas de los productos; por lo tanto, se puede establecer una relación entre la conservación de los alimentos y el contenido de agua de los alimentos mediante la actividad del agua, que es igual a la humedad relativa en equilibrio con el producto a la misma temperatura (Coronel, *et al.*, 2016).

Para una adecuada gestión y manejo del café en sus estados de almendra verde y tostado, es necesario conocer, entre otras propiedades, sus isoterms de sorción de agua, que implica el conocimiento de la relación de la actividad de agua ( $A_w$ ) en función del contenido de humedad en equilibrio. La actividad de agua es uno de los parámetros más importantes en la ingeniería de los alimentos, ya que está relacionada con la cantidad de agua del material alimenticio disponible para las reacciones físicas, químicas y bioquímicas, así como para el crecimiento microbiológico. Se relaciona directamente con la estabilidad y vida útil del producto (Staudt, *et al.*, 2013). La actividad de agua ( $A_w$ ) es la cantidad de agua perdida por una sustancia en equilibrio con una presión de vapor igual a cero, de tal manera que se evite cualquier reacción que eventualmente posibilite la interacción del agua en procesos de oxidación; es un parámetro termodinámico definido como el potencial químico de los granos al estado de energía que se expresa la disponibilidad de agua en el sistema para el desarrollo de actividades que deterioran el alimento (Meira-Borem, *et al.*, 2008). Los alimentos presentan una relación inherente entre el contenido de humedad de equilibrio y la actividad de agua, dicha relación se conoce como isoterma de sorción; la cual depende de la estructura, composición del material alimenticio y de parámetros como la presión y temperatura (Eim, *et al.*, 2011); las cuales se utilizan en

grandes áreas del procesado de alimentos: secado, almacenamiento entre otros (Soteras, *et al.*, 2014). Las isoterms de sorción son de gran importancia en los procedimientos pos-cosecha de productos agrícolas, en especial para predecir los procesos de secado y almacenamiento los cuales ayudan a establecer el contenido de humedad final del producto en determinada condición ambiental (Goneli, *et al.*, 2012); (Sormoli & Langrish, 2015).

La determinación experimental de las isoterms de sorción es siempre asociado con el uso de modelos matemáticos para correlacionar estos datos; existe una gran cantidad de ecuaciones de sorción para la caracterización del comportamiento de la humedad en los alimentos, según la literatura más de 200 (Staudt, *et al.*, 2013). Un número de estos modelos son totalmente empíricos o semi-empíricos mientras que algunos se basan en teorías de sorción. Las isoterms de sorción representan características higroscópicas generales de los diversos componentes y la unión del agua; por lo tanto, no existe un modelo de sorción empírico o teórico que sea capaz de predecir con precisión la isoterma de todas las matrices de alimentos en diferentes rangos de actividad de agua (Mousa, *et al.*, 2012).

Con el objetivo de expresar matemáticamente la relación entre la actividad de agua de los alimentos y su humedad los modelos desarrollados (lineales, regresionales, no lineales) construidos con dos, tres, cuatro y seis parciales coeficientes de regresión que explican cada una de las tres zonas de la isoterma de sorción de humedad, en muchos casos el modelo adecuado para ciertos productos no es adecuado para otro diferente, de la misma manera algunos modelos presentan gran capacidad predictiva de actividad de agua y otros un rango limitado (Andrade, *et al.*, 2011). Por lo tanto, los fenómenos de sorción dependen de la composición del alimento, para modelizar las isoterms de sorción en café verde y tostado conviene ajustar dichos modelos empíricos, semi-empíricos y teóricos reportados en la literatura para granos de café en almendra verde, tostado, molido, granos enteros y diversos productos agrícolas.

Los modelos matemáticos comúnmente empleados para describir las isoterms de sorción en café son el modelo de GAB Oswin, Halsey, Chung Pfost, Sigma-Copace, Copace (Machado, *et al.*, 2017); (Goneli, *et al.*, 2012); Henderson (Corrêa, *et al.*, 2014); (Corrêa, *et al.*, 2010), Smith, Harkins-Jura, Aguerre y Roa (Meira-Borem, *et al.*, 2008). Para granos enteros: Curie (Zapata, *et al.*, 2015); Polynomial (Mousa, *et al.*, 2012), de otros productos y en general el modelo DLP (Double Log Polynomial), Peleg Iglesias y Chirife, Kunh (Shittu, *et al.*, 2015); (Aqualab Decagon Device, 2016); (Sormoli & Langrish, 2015); (Rosa, *et al.*, 2013); (AGUIRRE-LAREDO, *et al.*, 2016),

Ajustar matemáticamente los modelos para expresar las isoterms de sorción en café es interesante, pero el hecho de la determinación experimental por el método tradicional (gravimétrico) induce a que los modelos se relacionen al comportamiento de un número limitado de datos experimentales. En el presente trabajo se determinaron experimentalmente las isoterms de sorción en café verde y tostado; con el método de la isoterma de punto de rocío dinámica (DDI) para diferentes condiciones de temperatura y un amplio rango de actividad de agua, ajustando 12 modelos matemáticos al comportamiento de los datos experimentales.

## **2. Metodología**

### ***Materia prima y preparación de las muestras***

Se recolectaron muestras de café en pergamino de 2000 Gramos (gr), obtenidas directamente en productores de 10 fincas cafeteras del sur del departamento del Huila-Colombia, cuyo perfil sensorial permita la definición de cafés especiales. Las muestras se trillaron y tostaron a media tostión (ML) (SCAA#65) (Corrêa, *et al.*, 2016); (Horta de Oliveira, *et al.*, 2015b). En el Laboratorio de Análisis Sensorial de Café del Centro de Surcolombiano de Investigación en Café (CESURCAFÉ) de la Universidad Surcolombiana

### ***Análisis físico***

El análisis físico del café pergamino seco y del café almendra se realizó bajo los estándares de la Federación Nacional de Cafeteros de Colombia para la comercialización de café pergamino seco y las normas técnicas Colombianas 2323; 2324; 3566 (NTC 2323; NTC 2324; NTC 3566). Según las normas establecidas para el análisis físico de café, se

realizó la determinación del contenido de humedad de las muestra con el equipo marca KETT PM-450 por triplicado asegurando un rango de humedad de 10-12 %, se realizó la homogenización de cada muestra mediante el equipo Boerner, se tomaron 250 gramos de CPS (Café pergamino seco); se realizó la trilla de las muestras con el equipo ING-C-200 pesando la almendra en la balanza digital OHAUS Scout Pro 2000g. Posteriormente, se llevó a zaranda eléctrica ING-Z-TAMIZ-E, se realizó la clasificación de defectos con el respectivo registro de la masa para la obtención del factor de rendimiento, porcentaje de merma, porcentaje de pasilla y porcentaje de broca (Ladino-Garzón, *et al.*, 2017).

### Analisis sensorial

El análisis sensorial se realizó en Centro Surcolombiano de Investigación en Café (CESURCAFE), mediante un panel conformado por cuatro evaluadores entrenados en dos secciones de catación; siguiendo el protocolo de la Asociación de Cafés Especiales de América (SCAA) acorde a los parámetros establecidos por las normas técnicas colombianas 2758 y 3566 (NTC 2758; NTC 3566) (Ladino-Garzón, 2017).

Las isotermas de sorción se realizaron por el método de la Isoterma de Punto de Roció Dinamico (DDI); por triplicado haciendo uso del Vapor Sorption Analyzer (VSA) Aqualab Decagon; resolución de la balanza  $\pm 0,1$ mg; reservorio de agua, 20 ml; volumen de la muestra, 10 cc; peso de la muestra, 500 a 5,000 mg. Previo a la obtención de las curvas DDI, el sensor de punto de rocío se verifico empleando cuatro soluciones acuosas insaturadas 13.41 molal LiCl ( $0.250 \pm 0.003$  aw), 8.57m LiCl ( $0,50 \pm 0.003$  aw), 6.0 m NaCl ( $0.760 \pm 0.003$  aw) y 2.33m NaCl ( $0,92 \pm 0.003$  aw). Se realizaron Isotermas de trabajo; adsorción (current-0,8) con intervalo de 0,01aw y desorción (current-0,1) con intervalo de 0,05 y un flujo de 100ml/min (Aqualab Decagon Device, 2016), un amplio rango de actividad de agua (0,1-0,8Aw) a temperaturas ( $25^\circ$ ,  $30^\circ$  y  $40^\circ$ C) para café verde y tostado.

### Modelado matemático de las isotermas de sorción

Los datos experimentales obtenidos se ajustaron al modelo matemático teórico de Guggenheim-Anderson-de-Boer (GAB), a los modelos empíricos Oswin, Smith, Chung Pfof, White and Eiring, Caurie, Kunh, Iglesias and Chirife, Peleg, Polynomial, Weibull y DLP para el modelado de las isotermas de café verde y tostado.

Los modelos matemáticos ajustados a los datos experimentales de café verde y tostado se presentan en la siguiente tabla.

**Tabla 1.** Modelos matemáticos teóricos y empíricos para modelización de café verde y tostado

Models	Reference	Model expression	Equation
GAB	(Machado, <i>et al.</i> , 2017); (Ferreira de Souza, <i>et al.</i> , 2014)	$X = \frac{XmCKGaw}{(1 - Kaw)[1 - Kaw + CKaw]}$	(1)
		$C = Co \exp\left(\frac{Hm - Hn}{RT}\right)$	(2)
		$K = Ko \exp\left(\frac{\lambda - Hn}{RT}\right)$	(3)
Oswin	(AGUIRRE-LOREDO, <i>et al.</i> , 2016); (Shigehisa, <i>et al.</i> , 2015)	$M = A \left[ \frac{aw}{1 - aw} \right]^B$	(4)
Smith	(Mousa, <i>et al.</i> , 2012); (Shigehisa, <i>et al.</i> , 2015)	$M = A + [B \ln(1 - aw)]$	(5)

Chung-Pfost	(Mousa, <i>et al.</i> , 2012)	$M = A + B \ln(-\ln aw)$	(6)
Kunh	(Sormoli & Langrish, 2015)	$Xe = \frac{A}{\ln aw} + B$	(7)
Caurie	(Sormoli & Langrish, 2015); (Khawas & Chandra, 2016)	$Xe = \text{Exp}(A + Baw)$	(8)
Iglesias y Chirife	(Sormoli & Langrish, 2015) (Caballero-Cerón, <i>et al.</i> , 2017)	$Xe = A + B \left( \frac{aw}{1 - aw} \right)$	(9)
White and Eiring	(Sormoli & Langrish, 2015)	$Xe = \frac{1}{(A + Baw)}$	(10)
Peleg	(Shittu, <i>et al.</i> , 2015); (Khawas & Chandra, 2016)	$M = k1aw^{n1} + k2aw^{n2}$	(11)
DLP	(Shittu, <i>et al.</i> , 2015); (Aqualab, 2016)	$Xe = bo + b1x + b2x^2 + b3x^3$ $x = \ln(-\ln aw)$	(12)
Polynomial	(Mousa, <i>et al.</i> , 2012)	$M = A + Baw + Caw^2 + Daw^3$	(13)
Weibull	(Uribe, <i>et al.</i> , 2009)	$M = \text{Exp}\left[-\left(\frac{t}{B}\right)^A\right]$ o $M = A + \text{Exp}^{B(1-aw)^c}$	(14)

El modelo teórico Guggenheim-Anderson-de Boer (GAB) describe el contenido de agua de equilibrio experimental ( $X$ ,  $\text{kg kg}^{-1}$ , base seca) de las muestras de café verde y tostado en función de la actividad del agua ( $aw$ ) y temperatura ( $T$ ). En la ecuación (1) el contenido de humedad de equilibrio medio de la mono-capa describe la cantidad de agua que se adsorbe fuertemente en los sitios específicos de la estructura superficial de adsorbente durante el proceso de desorción y adsorción; los parámetros del modelo de GAB pueden escribirse de acuerdo con las ecuaciones (2) y (3) e indican la diferencia de energía existente entre las capas superiores y la monocapa ( $C$ ) y los grados de libertad de las moléculas de agua ( $K$ ) (AGUIRRE-LOREDO, *et al.*, 2016),  $H_m$  y  $H_n$  son las cantidades de sorción de agua de la monocapa y multicapa ( $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ) respectivamente,  $\lambda$  es la energía de vaporización del agua pura ( $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ),  $T$  es la temperatura absoluta (K), y  $R$  es la constante de gas ideal ( $8,314 \text{ kJ} \cdot \text{k}^{-1} \cdot \text{kmol}^{-1}$ ) (Cano-Higueta, *et al.*, 2015); (Ferreira de Souza, *et al.*, 2014); (Rosa, *et al.*, 2013); (Lavoyer, *et al.*, 2012); (Kartira, *et al.*, 2012); (Sormoli & Langrish, 2015); (Bon, *et al.*, 2012); (Horta de Oliveira, *et al.*, 2015a).

En función de los modelos empíricos se describe  $A$  y  $B$  para las ecuaciones (4), (5), (6), (7), (8), (9) y (10);  $k_1$ ,  $n_1$ ,  $k_2$  y  $n_2$  (11),  $b_0$ ,  $b_1$ ,  $b_2$  y  $b_3$  (12);  $A$ ,  $B$ ,  $C$  y  $D$  (13),  $A$ ,  $B$  y  $C$  para (14) son parámetros del modelo y  $M$ ,  $X$  o  $X_e$  es el contenido de humedad de equilibrio ( $\text{kg kg}^{-1}$ , base seca). Cabe mencionar que la ecuación (14) es un modelo que atiende a una distribución Weibull es decir una expresión exponencial.

### **Estimación de parámetros y análisis estadístico**

Para el ajuste de los modelos matemáticos se realizó análisis de regresión no lineal obteniendo los valores de los parámetros del modelo e intervalos de confianza del 95% utilizando los métodos de regresión de la herramienta Curve Fitting de Matlab® R2017b (The MathWorks Inc., Natick, MA, EE. UU.). Para el grado de ajuste de los modelos se consideró las magnitudes del error medio relativo (MRE), el coeficiente de determinación ajustado ( $R^2_{adj}$ ); se

utilizaron para evaluar la precisión del modelo. El  $R^2_{ajs}$  define con éxito el modelo y explica la variación de los datos mientras que MRE (%) es una medida del error relativo de la estimación (Ferreira de Souza, *et al.*, 2014), evalúa la bondad de ajuste del modelo, en general valores pequeños indican un mejor ajuste del modelo a los datos experimentales (Horta de Oliveira, *et al.*, 2015a). La raíz del error cuadrático medio (RMSE) evidencia que en cuanto menores sean las magnitudes de estos índices mejor es el ajuste del modelo a los datos observados (Corrêa, *et al.*, 2014); (Koua, *et al.*, 2012); el coeficiente de determinación (R2) (Caballero-Cerón, *et al.*, 2017); (Maleki, *et al.*, 2013) y el ajuste del coeficiente de determinación (R2ajs) (Villa-Vélez, *et al.*, 2015); pueden determinarse con las siguientes ecuaciones.

$$MRE = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|Y_i - \hat{Y}_i|}{Y_i} \quad (17)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{N}} \quad (18)$$

$$R^2 = \frac{[\sum_{i=1}^n (Y_{iex} - \hat{Y}_{ex.prom})(Y_{ipre} - \hat{Y}_{ipre.prom})]^2}{\sum_{i=1}^n (Y_{iex} - \hat{Y}_{ex.prom})^2 (\sum_{i=1}^n (Y_{ipre} - \hat{Y}_{ipre.prom})^2)} \quad (19)$$

$$R2adj = 1 - (1 - R2) \frac{n-1}{n-m} \quad (20)$$

Donde  $Y_i$  ( $Y_{iex}$ ) y  $\hat{Y}_i$  ( $\hat{Y}_{ipre}$ ) son los datos experimentales y la predicción del contenido de humedad de equilibrio y N es el número de datos de la serie. En la ecuación (20) n es el número de valores experimentales y m es el número de parámetros estimados. Los coeficientes (R2) y (R2ajs) > 0,98 son considerados como ajustes razonables (Sormoli & Langrish, 2015); (AGUIRRE-LAREDO, *et al.*, 2016). Se acepta generalmente que los valores de MRE por debajo de 10% dan un buen ajuste (Eim, *et al.*, 2011); (Martínez-Las Heras, *et al.*, 2014); (Červenka, *et al.*, 2015). Según Bastioğlu *et al* (2017) se considera que un modelo es aceptable si RMSE se encuentra por debajo del 10% y  $R^2$  mayor a 0,9. De manera general altos valores de  $R^2$  y  $R^2_{ajs}$  y bajos valores de RMSE se considera como bondad de ajuste alta (Yang, *et al.*, 2015).

### 3. Resultados y discusión

En la siguiente tabla se presentan los modelos matemáticos de mejor ajuste para los datos experimentales de café verde y tostado sin efecto de la temperatura; los modelos fueron seleccionados bajo los criterios estadísticos de buen ajuste.

**Tabla 2.** Modelos matemáticos de mejor ajuste en isotermas de sorción café verde y tostado

Café verde				Café tostado			
Modelo	T(°C)	MRE	R <sup>2</sup> ajs	Modelo	T(°C)	MRE	R <sup>2</sup> ajs
GAB	25	0,011	0,970	Weibull	25	0,0027	0,935
	30	0,014	0,943		30	0,0018	0,888
	40	0,021	0,894		40	0,004	0,935
Weibull	25	0,074	0,944	DLP	25	0,047	0,950
	30	0,069	0,919		30	0,037	0,950
	40	0,080	0,903		40	0,026	0,991
Peleg	25	0,018	0,949	Polynomial	25	0,066	0,894
	30	0,020	0,931		30	0,055	0,885
	40	0,020	0,908		40	0,047	0,954
DLP	25	0,003	0,998	-	-	-	-
	30	0,003	0,996		-	-	-
	40	0,006	0,993		-	-	-
Polynomial	25	0,004	0,996	-	-	-	-
	30	0,005	0,994		-	-	-
	40	0,008	0,988		-	-	-

Los modelos matemáticos empleados tradicionalmente para representar la higroscopicidad de los productos agrícolas como es el caso de los modelos de Smith, Chung pfof, WhiteAndEiring, Caurie, IglesiasAndChirife y Kunh en café verde y GAB, Oswin, Peleg y los anteriormente enunciados para café tostado, no representan el comportamiento de los valores experimentales en el rango de actividad de agua y temperaturas descritas; el MRE supera el 10% siendo inadecuados para describir el contenido de humedad de equilibrio (Corrêa, *et al.*, 2010); el R<sup>2</sup>ajs es inferior al 0,8. En la tabla 2 se observan los modelos sin dependencia de la temperatura que evidencian un buen ajuste, se observan valores de MRE (inferiores al 10%) indicando una buena adecuación de los modelos para fines prácticos (Machado, *et al.*, 2017). Los modelos considerados reúnen las condiciones de a buen ajuste y ajuste razonable. En la siguiente tabla se presentan los resultados de la generalización del modelado para granos de café verde vinculando el efecto de la temperatura.

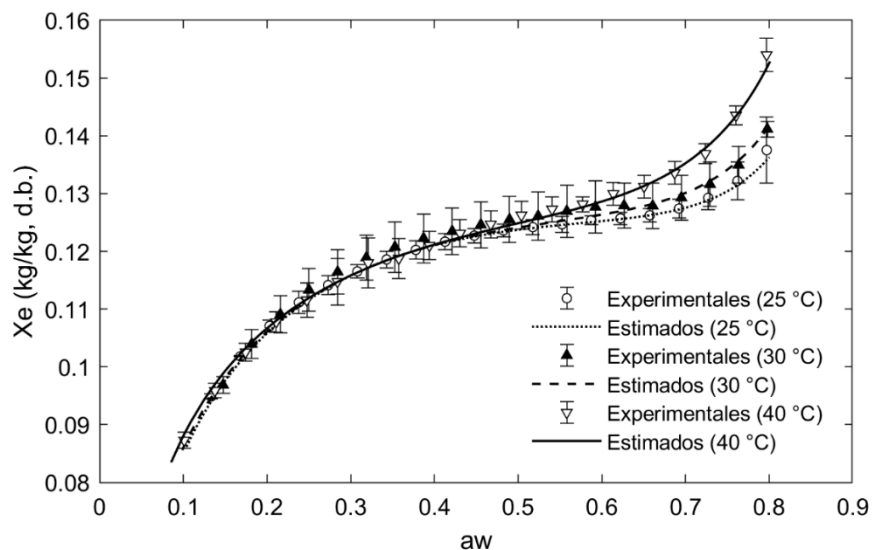
**Tabla 3.** Modelos matemáticos generalizados para granos de café almendra verde

Café verde					
Modelo	Expresión	Parámetros	Intervalos de confianza 95%	R <sup>2</sup> ajs	RMSE
Polynomial General	$M=A0+A1T_{abs}+B0a_w+B1a_wT_{abs}+C0a_w^2+C1a_w^2T_{abs}+D0a_w^3$	A0= 0.04713 A1= 0.0003423k <sup>-1</sup> B0= 0.4319 B1= -0.002382 k <sup>-1</sup> C0= -0.7945 C1= 0.003787 k <sup>-1</sup> D0= 0.4502	[0.04104, 0.05323] [0.0001582, 0.0005264] [0.399, 0.4648] [-0.003287, -0.001478] [-0.8461, -0.7428] [0.002825, 0.004749] [0.419, 0.4814]	0,9679	0,00233

DLP General	$X_e = b_0 + b_1 T_{abs} x + (b_2 T_{abs} + b_3) x^2 + b_4 T_{abs} x$	$b_0 = 0.1197$ $b_1 = -5.694 \times 10^{-5} \text{ k}^{-1}$ $b_2 = 0.0003899 \text{ k}^{-1}$ $b_3 = -0.1366$ $b_4 = -3,675 \times 10^{-5} \text{ k}^{-1}$	$[0.1193, 0.1201]$ $[-5.878 \times 10^{-5}, -5.509 \times 10^{-5}]$ $[0.0003571, 0.0004227]$ $[-0.1467, -0.1266]$ $[-3,934 \times 10^{-5}, -3.41 \times 10^{-5}]$	0,9719	0,002179
Peleg General	$M = (k_1 T_{abs} + k_2) a w^{n_1} + (k_3 T_{abs} + k_4) a w^{n_2}$	$k_1 = 0.0002029 \text{ k}^{-1}$ $k_2 = 0,07697$ $k_3 = 0,06105 \text{ k}^{-1}$ $k_4 = -18,16$ $n_1 = 0,1678$ $n_2 = 17,13$	$[(0.0001438, 0.0002619)]$ $[0,05912, 0,09483]$ $[0.008086, 0,114]$ $[-33,95, -2,382]$ $[0,1625, 0,1731]$ $[13,54, 20,73]$	0,9522	0,00284
Weibull General	$M = (A_1 T_{abs} + A_2) + \exp B(1 - w a)^{(C_1 T_{abs} + C_2)}$	$A_1 = 0.0009865 \text{ k}^{-1}$ $A_2 = -1.166$ $B = -0.05851$ $C_1 = -0.156 \text{ k}^{-1}$ $C_2 = 50.56$	$[(0.0008345, 0.001138)]$ $(-1.212, -1.12)$ $(-0.06055, -0.05647)$ $(-0.1789, -0.1332)$ $(43.53, 57.58)$	0.9336	0.003348
GAB General	$X = \frac{X_m C K G a w}{(1 - K a w)(1 - K a w + C K a w)}$ $C = C_0 \exp \frac{(H_m - H_n)}{R T_{abs}}$ $K = K_0 \exp \frac{(\lambda - H_n)}{R T_{abs}}$	$H_m = 1.33 \times 10^5$ $H_n = 9,99510^4$ $c_0 = 365,2$ $k_0 = 372,3$ $X_m = 0.1439 \text{ (d.b.)}$	$[-7.137 \times 10^8, 7,139 \times 10^8]$ $[-3.568 \times 10^8, 3.57 \times 10^8]$ $[-5,316 \times 10^7, 5,316 \times 10^7]$ $[-5,42 \times 10^7, 5,42 \times 10^7]$ $[0.1392, 0.1486]$	0,9252	0,00355

Los modelos con efecto de la temperatura permiten vincular todas las repeticiones para obtener una expresión general, permitiendo predecir el contenido de humedad de equilibrio para café verde y tostado en las condiciones evaluadas. Los límites de confianza de los parámetros del modelo indican la significancia de los mismos en la expresión, la bondad de ajuste de los modelos a las curvas de equilibrio higroscópico describen el grado de relación y la precisión con la cual describen los fenómenos de sorción. La tabla 3 presenta los coeficientes de los modelos ajustados que representaron de mejor manera los datos experimentales vinculando el efecto de la temperatura. Se evidencia que el modelo teórico de GAB general modelizado para café verde presenta un coeficiente de determinación ajustado de 0,9252; los parámetros  $c_0$ ,  $k_0$ ,  $H_m$ ,  $H_n$  no son estadísticamente significativos en el modelo. Los modelos DLP, Polynomial, Peleg y Weibull son adecuados para describir la higroscopicidad y pueden emplearse para predecir el

comportamiento de los granos de café verde debido a sus valores elevados de  $R^2_{aj}$  > 0,90 y bajos valores de  $RMSE < 10\%$ ; presentan un buen ajuste y parámetros significativos en el modelo. Sin embargo, el modelo DLP general presenta bondad ajuste próximo a razonable con  $R^2_{aj} = 0,9719$  y  $RMSE = 0,002179$  (0,217%). En la siguiente figura se presenta la modelización de las isotermas de sorción en café verde a diferentes condiciones de temperatura y amplio rango de actividad de agua.



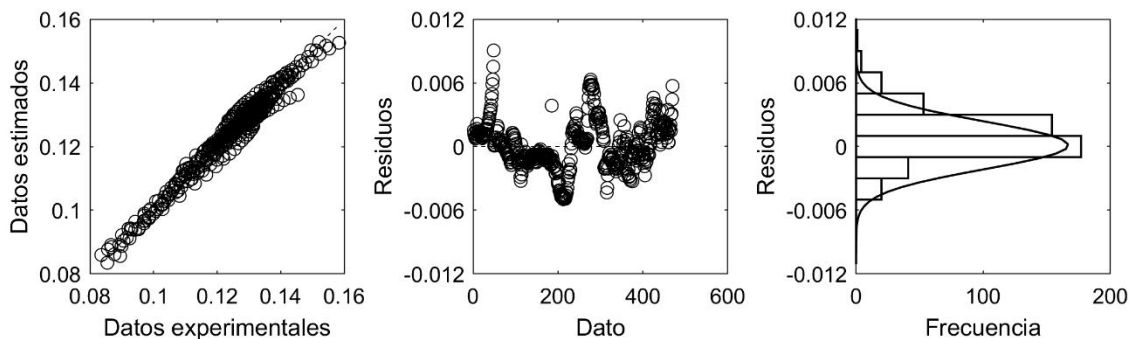
**Figura 1.** Isotermas de sorción experimentales de 25° a 40°C y estimado con el modelo DLP general

La figura 1 presenta las isotermas de sorción en café verde experimentales y modelizadas con DLP general, se observan las medias y desviación estándar del contenido de humedad de equilibrio a actividad de agua constante. Se observa que el efecto de la temperatura tiene influencia en regiones de actividad de agua alta (Agua libre) a partir de actividades de agua de 0,71 aproximadamente. En términos generales un fuerte aumento del contenido de humedad de equilibrio con el incremento de la actividad de agua; pronunciado en 0,1-0,4 aw y 0,55-0,8w característico en la tendencia de las isotermas. Labuza & Altunakar (2007) explican el fuerte aumento del contenido de humedad en los rangos descritos; la isoterma de tipo II es causada por los efectos aditivos de la ley de Raoult, los efectos capilares y las interacciones del agua superficial. Se observan dos regiones de flexión en este tipo de isotermas, un alrededor de una actividad de agua de 0.2 a 0.4 y otra de 0.6 a 0.7, los resultados de los cambios en magnitud de los efectos físicos y químicos separados, por consiguiente, la acumulación de multicapas y relleno de pequeños poros en la región inferior, seguidos de hinchazón, llenado de poros dilatados y disolución de solutos en la región superior. Se observa que las isotermas de café verde presentan un comportamiento sigmoide (curva ‘S’) tipo II con decrecimiento e incremento del contenido de humedad de equilibrio en actividades de agua bajas y altas respectivamente atendiendo a la clasificación de Brunauer et al (1940). Corrêa et al (2010); Laccheri et al (2015); Pittia, et al (2006) reportaron la misma tendencia en isotermas de sorción de café verde. La adsorción en actividades de agua altas aumento con la temperatura; se puede inferir que a medida que la temperatura se incrementa los granos de café verde se hacen más higroscópicos, tendencia y comportamiento inverso a lo reportado por Mousa et al (2012) en arroz, donde los mayores contenidos de humedad de equilibrio se presentaron a menor temperatura, por lo tanto, el comportamiento de sorción asociado al contenido de humedad de equilibrio disminuía con el aumento de la temperatura. De igual manera Ferreira de Souza et al (2014) para semillas de maracuyá, Corrêa et al (2010) en café verde. De manera paralela Eim et al (2011) reportaron que los resultados experimentales de isotermas de sorción en zanahoria; en una actividad de agua constante, el contenido de humedad de equilibrio aumento cuando la temperatura aumento, lo que indica que la



zanahoria se está volviendo más higroscópica. Debido a los antecedentes de las isothermas generadas en café verde con el método de las soluciones salinas saturadas; es necesario enfatizar que el método DDI es fundamentalmente diferente a los métodos tradicionales de medición; genera isothermas sin el requisito de equilibrio higroscópico real de las muestras (Zhang, *et al.*, 2015). Es posible que el hecho de la higroscopicidad en actividades de agua alta para los granos de café verde pueda atribuirse al método de obtención de las isothermas de sorcion. Laccheri *et al* (2015) desarrollaron isothermas DDI comparadas con el DES (método gravimétrico) a 25°C, reportaron diferencias importantes en el contenido de humedad de equilibrio, siendo altos en el DES respecto al DDI conservando la tendencia de la isoterma, atribuyendo el hecho a la lenta difusión del agua en la matriz de café verde que evidencio la diferencia de las isothermas obtenidas con el método DDI (rápido) y DES (lentamente). Es conveniente realizar estudios a fondo en café para el generado de isothermas DDI y DES vinculando la temperatura; de esta manera se podría concretar el posible argumento planteado.

Normalmente se realiza un análisis de los residuos para garantizar que un modelo seleccionado pueda describir el fenómeno evaluado (Horta de Oliveira, *et al.*, 2015a). En la figura 2 se presentan los resultados del análisis de los residuos del modelo DLP general modelizado para granos de café verde.



**Figura 2.** Análisis de residuos modelo DLP general

Las estadísticas mostraron que el modelo DLP general logro un ajuste satisfactorio entre los datos experimentales y los estimados, sin embargo el análisis de residuos del modelo DLP presento residuos entre -0.0049645 y 0.0090628 y porcentaje de residuos entre -0.003 y 0.003; permite inferir que el 0.79149 (79,14%) de los residuos están distribuidos en el rango descrito, como resultado de *p*-valor test de Lilliefors es 0.001, se rechaza la hipótesis nula (los residuos provienen de una distribución normal) al 95%. La violación del supuesto de normalidad no es importante si el objetivo es sólo realizar estimaciones, porque los estimadores siguen siendo insesgados. Sí es importante para pruebas de hipótesis y predicción, ya que en éstas se usa el valor de *t*. Sin embargo, aunque no se presente normalidad en los desvíos, los estimadores CMO tienden a distribuirse normalmente a medida que el tamaño de la muestra aumenta. la violación de la suposición de normalidad del error por sí sola no es un asunto tan serio dada la robustez, hasta cierta medida del método MCO (Mínimos Cuadrados Ordinarios), aunque es deseable que por lo menos el error tenga una distribución simétrica. Ello demuestra que la anomalía de los residuos no es por sí sola un problema, pero cuando va acompañada de otras situaciones irregulares (bajo coeficiente de determinación, heterocedasticidad o tendencias entre las variables del modelo y los residuos) puede ser indicio de una regresión fallida. En este caso el  $R^2_{aj}$  y el RMSE son 0,9719 y 0,002179 respectivamente; por lo tanto, se considera una regresión exitosa.

La tabla 4 presenta los parámetros, intervalos de confianza y estadísticos de ajuste de los modelos generalizados de mejor ajuste en granos de café tostado.

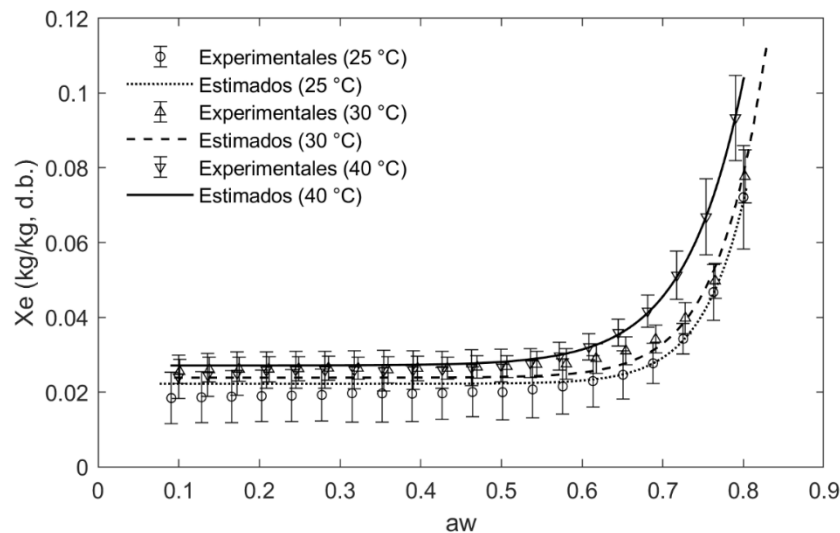
**Tabla 4.** Modelos matemáticos generalizados granos de café tostado

Café tostado					
Modelo	Expresión	Parámetros	Intervalos de confianza 95%	R <sup>2</sup> ajs	RMSE
Polynomial General	$M=A0+A1T_{abs}+B0a_w+B1a_wT_{abs}+C0a_w^2+C1a_w^2T_{abs}+D0a_w^3$	A0 = -0.02831 A1= 0.0009488 k <sup>-1</sup> B0 = 0.3964 B1 = -0.004753 k <sup>-1</sup> C0 = -0.9754 C1 = 0.007201 k <sup>-1</sup> D0 = 0.6772	[-0.04424, -0.01238] [0.0004761, 0.001421] [0.3135, 0.4794] [-0.006883, -0.002622] [-1.11, -0.8407] [0.004972, 0.00943] [0.5966, 0.7578]	0.8814	0,006055
DLP General	$X_e=b_0T_{abs}+b_1x+(b_2T_{abs}+b_3)x^2+b_4x^3$ *x=ln(-ln a <sub>w</sub> )	b4 = -0.01616 b2 = 0.0009784 k <sup>-1</sup> b3 = -0.2968 b1 = 0.005263 b0 = 8.071x10 <sup>-5</sup> k <sup>-1</sup>	(-0.01814, -0.01417) (0.0008903, 0.001066) (-0.3238, -0.2699) (0.003739, 0.006787) (7.718x10 <sup>5</sup> ,8.425x10 <sup>-5</sup> )	0,8956	0,005679
Weibull	$M=(A1T_{abs}+A2)+\exp B(1-w_a)^{(C1T_{abs}+C2)}$	A1 = 0.000325 A2 = -0.07464 B1 = 0.4704 B2 = -162.1 C1 = -0.009532 C2 = 4.071	(0.0002198,0.0004301) (-0.1066, -0.04268) (0.2509, 0.69) (-230.3, -93.84) (-0.01712, -0.001941) (1.731, 6.41)	0,9021	0,005501
GAB General	$X_e=\frac{X_mCKGaw}{(1-Kaw)(1-Kaw+CKaw)}$ $C=Co \exp \frac{(Hm-Hn)}{RT_{abs}}$ $K=Ko \exp \frac{(\lambda-Hn)}{RT_{abs}}$	Hm = 3.243x10 <sup>4</sup> Hn = 4.501x10 <sup>4</sup> c0 = 1.983x10 <sup>4</sup> k <sup>-1</sup> k0 = 1.032 k <sup>-1</sup>	(-1.849x10 <sup>5</sup> ,2.498x10 <sup>5</sup> ) (3.696x10 <sup>4</sup> , 5.305x10 <sup>4</sup> ) (-1.649x10 <sup>6</sup> ,1.689x10 <sup>6</sup> ) (-2,372, 4.436)	0,661	0,009671

		$X_m = 0.01916(\text{d.b})$	(0.01597, 0.02235)		
--	--	-----------------------------	--------------------	--	--

Las expresiones generalizadas vinculan el efecto de la temperatura y su influencia en los parámetros del modelo para la predicción del contenido de humedad de equilibrio en un amplio rango de actividad de agua. Los modelos que presentaron los mejores ajustes son el modelo Polynomial, DLP y Weibull. Los estadísticos de ajuste presentaron para el modelo de Weibull la mejor opción para representar la higroscopicidad de los granos de café tostado, el valor del coeficiente de determinación ajustado ( $R^2_{\text{ajs}} = 0,9021$ ) y la raíz del error medio cuadrático (RMSE) inferiores al 1% indicando un buen ajuste; permitiendo inferir que el modelo describe de manera adecuada el proceso de sorción para fines prácticos (Machado, *et al.*, 2017). Por lo tanto, los modelos DLP y Polynomial no son adecuados debido a que su coeficiente de determinación ajustado es inferior al 90% a pesar que los residuos sean inferiores al 1%.

El modelo de GAB es el más aceptado para representar el proceso de sorción en alimentos debido a su validez física y su precisión en un rango amplio de actividad de agua. Los resultados obtenidos presentaron que los parámetros del modelo de GAB general ajustado para café tostado no son estadísticamente significativos en el modelo, debido a que los intervalos de confianza contemplan magnitudes del dominio negativo al positivo; pudiendo tomar valores de 0 eliminado de esta manera los términos ponderantes en la ecuación general, por lo cual se descarta el modelo de GAB para el ajuste de los datos experimentales.

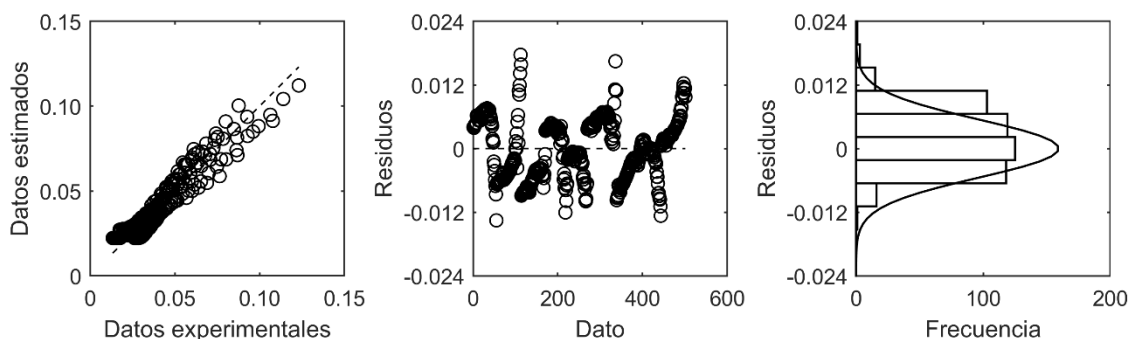


**Figura 3.** Isotermas de sorción experimentales de 25° a 40°C y estimado con modelo Weibull en café tostado

En la figura 3 se observa que las isotermas de sorción de café tostado mostraron una forma tipo III atendiendo a la clasificación de Brunauer *et al* (1940). Las isotermas tipo III corresponden principalmente a alimentos que consisten en componentes cristalinos; estado caracterizado por la disposición tridimensional regular de las moléculas en función de su orientación (Horta de Oliveira, *et al.*, 2015a), puede atribuirse el fenómeno a la disolución del azúcar que produce lixiviación completa del azúcar en solución, el cambio en la estructura cristalina del azúcar al estado amorfo (Eim, *et al.*, 2011). Labuza & Altunakar (2007) mencionan que los sistemas alimentarios compuestos de principalmente componentes cristalinos tales como azúcar y sal están representados por una isoterma tipo III. Dicha

tendencia la reportaron Horta de Oliveira *et al* (2015a) para granos de café tostado, y Machado *et al* (2017) café tostado molido. El efecto de la temperatura sobre las isothermas de sorción en café tostado promueve la higroscopicidad en actividades de agua alta. Con un aumento de la temperatura a un valor de actividad de agua constante el contenido de humedad de equilibrio aumenta. Horta de Oliveira *et al* (2015a) reportaron que la temperatura afecta la higroscopicidad de las muestras de café tostado independiente de la especie y tamaño de partícula; “A una humedad relativa constante, el contenido de agua en equilibrio disminuye con una disminución en la temperatura de almacenamiento” pero mencionan que el aumento de la temperatura promueve el incremento de las vibraciones moleculares, aumentando la distancia entre las moléculas y en consecuencia la disminución de las atracciones entre moléculas. Machado *et al* (2017) reportaron comportamiento análogo para las isothermas café tostado molido; evidencian que al incrementar la temperatura a una actividad de agua constante el contenido de humedad de equilibrio se reduce, debido al efecto que ejerce la temperatura para volver inestables las moléculas de agua favoreciendo su ruptura y reduciendo el contenido de humedad. Las isothermas de sorción de café tostado presentaron aumento pronunciado en el contenido de humedad de equilibrio a valores de actividad de agua alta, dichos incrementos se evidencian en un rango (0,55-0,8aw) y un comportamiento asintótico en actividades de agua bajas; se observó una buena correspondencia entre los datos estimados ajustando el modelo de Weibull, sin embargo, debe considerarse que es una expresión exponencial por lo tanto la inflexión de la isoterma no debe usarse para predecir valores de contenido de humedad debido a que la actividad de agua tiende a permanecer constante en el rango de (0,1-0,5 aw). Horta de Oliveira *et al* (2015a) presentaron un comportamiento similar con el modelado de Sigma-Copace en café tostado. El efecto del incremento de la temperatura al promover la higroscopicidad de los granos de café tostado se evidencia en actividades de agua de 0,70-0,80aw para la isoterma de 40°C, es importante mencionar que dicho efecto no es significativo para las isothermas de 25°C y 30°C. Eim *et al* (2011) reportaron tendencias similares de incremento de higroscopicidad con aumento de la temperatura; en una actividad de agua constante, el contenido de humedad de equilibrio aumento cuando la temperatura aumento, lo que indica que la zanahoria se está volviendo más higroscópica. Es posible que el hecho de la higroscopicidad en actividades de agua alta para los granos de café tostado pueda ser atribuido al método de obtención de las isothermas de sorción. Laccheri *et al* (2015) desarrollaron isothermas DDI comparadas con el DES a 25°C, reportaron similitud entre los contenidos de humedad de equilibrio obtenidas con los dos métodos; la rehidratación no afecto las conductas isotérmicas, se atribuye el hecho al aumento relevante de la presión interna y el volumen del grano durante el tostado conduce a una alteración completa de su microestructura convirtiéndola en homogénea. Debido a los antecedentes de las isothermas generadas en granos de café tostado con el método estático sobre la disminución de la higroscopicidad con aumento de la temperatura, es conveniente realizar estudios a fondo en café para el generado de isothermas DDI y DES vinculando la temperatura; de esta manera se podría concretar la influencia del método de obtención de isothermas en el equilibrio.

Para obtener una mejor evaluación de la bondad de ajustes del modelo de Weibull general para café tostado, la figura 4 representa los residuos versus los valores simulados.



#### Figura 4. Análisis de residuos modelo Weibull general café tostado

Las estadísticas mostraron que el modelo Weibull general logro un ajuste satisfactorio entre los datos experimentales y los estimados, sin embargo el análisis de residuos del modelo Weibull generalizado para café tostado presenta residuos entre -0,0135 y 0,0177 porcentaje de residuos entre -0,0135 y 0,0177 lo que permite inferir que el 0,723 (72,3%) de los residuos están distribuidos en el rango descrito, como resultado de  $p$ -valor test de Lilliefors es 0.001, se rechaza la hipótesis nula (los residuos provienen de una distribución normal) al 95%. De la misma manera para los residuos obtenidos del modelo DLP general para café verde; la violación del supuesto de normalidad no es importante si el objetivo es sólo realizar estimaciones, porque los estimadores siguen siendo insesgados. Sí es importante para pruebas de hipótesis y predicción, ya que en éstas se usa el valor de  $t$ . Sin embargo, aunque no se presente normalidad en los desvíos, los estimadores CMO tienden a distribuirse normalmente a medida que el tamaño de la muestra aumenta. la violación de la suposición de normalidad del error por sí sola no es un asunto tan serio dada la robustez, hasta cierta medida del método MCO (Mínimos Cuadrados Ordinarios), aunque es deseable que por lo menos el error tenga una distribución simétrica. Ello demuestra que la anormalidad de los residuos no es por si sola un problema, pero cuando va acompañada de otras situaciones irregulares (bajo coeficiente de determinación, heterocedasticidad o tendencias entre las variables del modelo y los residuos) puede ser indicio de una regresión fallida. En este caso el  $R^2$ ajs y el RMSE son 0,9021 y 0,005501 respectivamente; por lo tanto, se considera una regresión exitosa.

#### 4. Conclusiones

Los resultados experimentales ilustraron que el contenido de humedad de equilibrio aumento con el aumento de la temperatura a una actividad de agua constante; evidenciada en café verde y tostado en valores de actividad de agua altos (0,75 y 0,70 aw). La temperatura ejerce su efecto al promover el aumento de la higroscopicidad de los granos de café verde y tostado. Entre las ecuaciones teóricas como (GAB) y empíricas (Oswin, Smith, Chung Pfof, White and Eiring, Caurie, Kunh, Iglesias and Chirife, Peleg, Polynomial, Weibull y DLP) utilizadas para modelar las isothermas de sorción, el modelo DLP y Weibull se consideraron la mejor expresión para describir las isothermas de sorción en café verde y tostado respectivamente debido a la alta bondad de ajuste de los modelos a los datos experimentales. El modelo de GAB es el más aceptado para la predicción del contenido de humedad de equilibrio en alimentos, debido a su valides física y precisión en un amplio rango de actividad de agua, sin embargo, no es capaz de representar con éxito la higroscopicidad de los granos de café verde y tostado, debido a que los intervalos de confianza del modelo tienen amplio dominio (positivo y negativo).

#### 5. Referencias bibliográficas

- Aerts, F., Berecha, G., Gijbels, P., Hundera, K., 2013. Genetic variation and risks of introgression in the wild *Coffea arabica* gene pool in south-western Ethiopian montane rainforests. DOI: 10.1111/j.1752-4571.2012.00285.x
- AGUIRRE-LAREDO, R. Y., RODRIGUEZ-HERNANDEZ, A. I., VELAZQUEZ, G., 2016. Modelling the effect of temperature on the water sorption isotherms of chitosan films. Food Science and Technology. D <http://dx.doi.org/10.1590/1678-457X.09416>
- Andrade, R. D., Lemus, M. R., Pérez, C. E. C., 2011. MODELS OF SORPTION ISOTHERMS FOR FOOD: USES AND LIMITATIONS. Consultado el 7 de septiembre de 2017. <https://aprendeenlinea.udea.edu.co/revistas/index.php/vitae/article/view/10682>
- Aqualab Decagon Devices, 2016. Vapor Sorption Analyzer: Isotherms Models. NE Hopkins Court. Consultado el 10 de septiembre de 2017. <http://www.aqualab.com/education/manual-aqualab-vapor-sorption-analyzer/>
- Bastioğlu, A. Z., Koç, M., Ertekin, F. G., 2017. Moisture sorption isotherm of microencapsulated extra virgin olive oil by spray drying. Food Measure DOI 10.1007/s11694-017-9507-4

Bon, J., Vaquiro, H. A., Mulet, A., 2012. MODELING SORPTION ISOTHERMS AND ISOSTERIC HEAT OF SORPTION OF MANGO PULP CV. TOMMY ATKINS. *Biología en el Sector Agropecuario y Agroindustrial*. Vol 10 No. 2 (34 - 43). Consultado el 10 de septiembre de 2017. [http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1692-35612012000200005](http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1692-35612012000200005)

Brunauer, S., Deming, S. L., Deming, E. W., Teller, E., 1940. On a Theory of the van der Waals Adsorption of Gases. *J. Am. Chem. Soc.* DOI: 10.1021/ja01864a025

Caballero-Cerón, C., Serment-Moreno, V., Velazquez, G., Torres, J. A. Welti-Chanes, J., 2017. Hygroscopic properties and glass transition of dehydrated mango, apple and banana. *J Food Sci Technol* <https://doi.org/10.1007/s13197-017-2963-3>

Cano-Higuaita, D. M., Villa-Vélez, H. A., Telis-Romero, J., Váquiro, H. A., Nicoletti, T. V. R., 2015. Influence of alternative drying aids on watersorption of spray dried mango mix powders: A thermodynamic approach. *Food and Bioprocess Processing* 9 3 ( 2 0 1 5 ) 19–28. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fbp.2013.10.005>

Červenka, L., Hloušková, L., Žabčíková, S., 2015. Moisture adsorption isotherms and thermodynamic properties of green and roasted Yerba mate (*Ilex paraguariensis*). *Food Bioscience*. <https://doi.org/10.1016/j.fbio.2015.10.001>

Coronel, D. A. Y., Ciro, V. H. J., Restrepo, M. D. A., 2016. Thermal and thermodynamic characterization of a dye powder from liquid turmeric extracts by spray drying. *Rev.Fac.Nal.Agr.Medellín vol.69 no.1 Medellín Jan./June 2016*. DOI: <http://dx.doi.org/10.15446/rfna.v69n1.54752>

Corrêa, P.C, Botelho, M. F., Botelho, C. Silva de C., Goneli, D. L. André., 2014. Isotermas de sorção de água de frutos de Coffea canephora. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, Campina Grande, PB, UAEA/UFCG. DOI: <http://dx.doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v18n10p1047-1052>

Corrêa, P.C, Goneli, L. A., Junior, A. Oliveira, H. G., Valente, D., 2010. Moisture sorption isotherms and isosteric heat of sorption of coffee in different processing levels. *International Journal of Food Science and Technology*. doi:10.1111/j.1365-2621.2010.02373.x

Corrêa, P.C, H de Oliveira. H. G., R de Oliveira, P. L. A., Vargas-Elias, G. A., Santos, L. F., Baptestini, F. M., 2016. Preservation of roasted and ground coffee during storage Part 1: Moisture content and repose angle. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*. Campina Grande, PB, UAEA/UFCG. DOI: <http://dx.doi.org/10.1590/1807-1929/agriambi.v20n6p581-587>

De Oliveira, P. D., Isquierdo, E. P., Ribeiro, F. C., Figueiredo, L. P., Barbosa, J. N., Borém, F. M., 2009. Caracterização das isotermas de desorção do exocarpo e endocarpo de café arábica. *Simpósio de Pesquisa dos Cafés do Brasil (6. : 2009 : Vitória, ES)*. Anais Brasília, D.F.

Ferreira de Souza, S. J., Váquiro, H. A., Villa-Vélez, H. A., Polachini, T. C., Telis-Romero, J., 2014. Physical, Thermal and Water-Sorption Properties of Passion Fruit Seeds. *International Journal of Food Engineering* 2014; 10(4): 785–798. DOI: doi 10.1515/ijfe-2014-0138

Goneli, A. L. D., Corrêa. P.C., Oliveira, G.H.H., Afonso-Junior, P. C., 2013. Water sorption properties of coffee fruits, pulped and green coffee. *LWT - Food Science and Technology*. <http://dx.doi.org/10.1016/j.lwt.2012.09.006>

Horta de Oliveira, G. H., Corrêa, P. C., Rodrigues de Oliveira, A. P., Baptestini, F. M., Vargas-Elías, G. A., 2015a. ROASTING, GRINDING, AND STORAGE IMPACT ON THERMODYNAMIC PROPERTIES AND ADSORPTION ISOTHERMS OF ARABICA COFFEE. *Journal of food processing and preservation*. doi:10.1111/jfpp.12779

Horta de Oliveira, G. H., Corrêa, P.C., Rodriguez de Oliveira, A. M. L., Dos Reis, R. C., Devilla, I. A., 2015b. APPLICATION OF GAB MODEL FOR WATER DESORPTION ISOTHERMS AND THERMODYNAMIC

ANALYSIS OF SUGAR BEET SEEDS. Journal of Food Process Engineering ISSN 1745-4530. doi:10.1111/jfpe.12278

Kartika, I. A., Yuliani, S., Kailaru, S. I., Rigal, L., 2012. Moisture sorption behaviour of jatropha seed (*Jatropha curcas*) as a source of vegetable oil for biodiesel production. *bio mass and bio energy* 36 ( 2 0 1 2 ) 2 2 6 e2 3 3. doi:10.1016/j.biombioe.2011.10.026

Khawas, P., Chandra, D. S., 2016. Moisture sorption isotherm of underutilized culinary banana flour and its antioxidant stability during storage. *Journal of Food Processing and Preservation* ISSN 1745-4549. doi:10.1111/jfpp.13087

Koua, B. K., Ekoun, K. P. M., Gbaha, P., Toure, S., 2012. Thermodynamic analysis of sorption isotherms of cassava (*Manihot esculenta*). *J Food Sci Technol*. DOI 10.1007/s13197-012-0687-y

Labuza, P. T., Altunakar, B., 2007. Water Activity Prediction and Moisture Sorption Isotherms. *Water Activity in Foods: Fundamentals and Applications*. Gustavo V. Barbosa-Cánovas<sup>1</sup>, Anthony J. Fontana Jr.<sup>2</sup>, Shelly J. Schmidt., Theodore P. Labuza. Chapter 5. DOI: 10.1002/9780470376454.ch5

Laccheri, E., Laghi, L., Cevoli, C., Berardinelli, A., Ragni, L., Romani, S., Rocculi, P., Different analytical approaches for the study of water features in green and roasted coffee beans. *Journal of Food Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2014.08.016>

Ladino-Garzón, W. L., Cortés-Macias, E. T., Gutiérrez-Guzman, N., Amorocho-Cruz, C. M., 2016. Calidad de taza de café (*Coffea arabica* L.) procesado en fermentación semi-seca. *Agronomía Colombiana* 34(1Supl.), S281-S283, 2016. DOI: 10.15446/agron.colomb.v34n1supl.57773

Lavoyer, G. F. C., Gabas, A. L., Oliveira, W. P., Telis-Romero, J., 2012. Study of adsorption isotherms of green coconut pulp. *Food Science and Technology*. DOI: <http://dx.doi.org/10.1590/S0101-20612013005000017>

Machado, B. F., Corrêa, P. C., Horta de Oliveira, Cecon, P. R., Ferreira, S. F., 2017. Kinetic modeling of water sorption by roasted and ground coffee. *Acta Scientiarum Agronomy*. Doi: 10.4025/actasciagron.v39i3.32576

Maleki, M. K., Hossein, K. S., Farahnaky, A., Jafarpour, K., Thermodynamic of Water Sorption of Grape Seed: Temperature Effect of Sorption Isotherms and Thermodynamic Characteristics. *Food Biophysics*. DOI 10.1007/s11483-012-9274-z

Martínez-Las Heras, R. A., Heredia, M. L., Castelló, A. A., 2014. Moisture sorption isotherms and isosteric heat of sorption of dry persimmon leaves. *Food Bioscience-ScienceDirect*. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fbio.2014.06.002>

Meira-Borem, F., Garcia, S. T., Amaral da Silva, A. E., Tavares, E., Afonso-Junior, P. C., Corrêa, P. C., Teixeira de Matos, A., Rodrigues, R. C., Nogueira da Silva, J., Precci, L. R., Castro, M. E., Pedroza, I. E., Miranda, F. S., Fernandes, M., Gomes, C. F., Teixeira, V. H., Rebelles, R. P., Andrade, C. G., Chauflon, S. M., Chippie, P. F., Almeida, N., Toledo, P. J., Piagentini, A., Rabelo, G. F., Siqueiraa de Carvalho, C. C., Correa, C. C. A., 2008. Pós-Colheita do Café. Editora UFLA-Lavras-MG, ISBN 978-85-87692-42-9, Univerdidade Federal de Lavras, p 40-118

Moreira, R., Chenlo, F., Sineiro, J., Arufe, S., Sexto, S., 2016. WATER SORPTION ISOTHERMS AND AIR DRYING KINETICS OF FUCUS VESICULOSUS BROWN SEAWEED. *Journal of food processing and preservation*. doi:10.1111/jfpp.12997

Mousa, W., Mohamad, F., Jinap, S. G., Mohd, H., Radu, S., 2012. Sorption isotherms and isosteric heats of sorption of Malaysian paddy. *J Food Sci Technol* DOI 10.1007/s13197-012-0799-4

- Nilnont, W., Thepa, S., Janjai, S., Kasayapanand, N., Thamrongmas, C., Bala, B. K., 2011. Finite Element simulation for coffee (*Coffea arabica*) drying. Food and Bioproducts Processing. DOI:10.1016/j.fbp.2011.06.007
- Özdestan, Ö., van Ruth, S. M., Alewijn, M., Koot, A., Romano, A., Cappellin, L., Biasioli, F., 2013. Differentiation of specialty coffees by proton transfer reaction-mass spectrometry. Food Research International. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.05.013>
- Pittia, P., Nicoli, M. C., Sacchetti, G., 2007. EFFECT OF MOISTURE AND WATER ACTIVITY ON TEXTURAL PROPERTIES OF RAW AND ROASTED COFFEE BEANS. Journal of Texture Studies. DOI: 10.1111/j.1745-4603.2007.00089.x
- Ramírez-Martínez, A., Salgado-Cervantes, M. A., Rodríguez-Jimenes, G. C., García-Alvarado, M. A., Cherblanc, F., Bénet, J. C., 2013. Water transport in parchment and endosperm of coffee bean. Journal of Food Engineering. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2012.08.028>
- Rojo, J. E., Pérez-Urria, C. E., 2014. Café I (G. Coffea). Reduca (Biología). Serie Botánica. 7 (2): 113-132. Consultado el 7 de septiembre de 2017. <http://eprints.ucm.es/27835/1/1757-2066-1-PB.pdf>
- Sangeeta, Singh, H. B., 2016. Sorption behavior, thermodynamic properties and storage stability of ready-to-eat Elephant Foot Yam (*Amorphophallus spp.*) product: physic-chemical properties, minerals, total dietary fiber and phenolic content of stored product. Food Measure. DOI 10.1007/s11694-016-9408-y
- Schmidt, S. J., Lee, W. J., 2012. Comparison Between Water Vapor Sorption Isotherms Obtained Using The New Dynamic Dewpoint Isotherm Method and those Obtained Using The Standard Saturated Salt Slurry Method. International Journal of Food Properties 15(1-2):236-248. DOI: 10.1080/10942911003778014
- Shigehisa, T., Inoue, T., Kumagai, H., 2015. Mathematical model of water sorption isotherms of UBC. Fuel Processing Technology. DOI <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2014.11.023>
- Shittu, T. A., Idowu-Adebayo, F., Adedokun, I. I., Alade, O., 2015. Water vapor adsorption characteristics of starch-albumen powder and rheological behavior of its paste. Nigerian Food Journal. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.nifoj.2015.04.014>
- Sormoli, M. E., Langrish, T. A.G., 2015. Moisture sorption isotherms and net isosteric heat of sorption for spray-dried pure orange juice powder. LWT - Food Science and Technology. <http://dx.doi.org/10.1016/j.lwt.2014.09.064>
- Soteras, E. M., Gil, J., Yacanto, P., Muratona, S., Abaca, C., Sustersic, M., 2014. ISOTERMAS DE ADSORCIÓN Y DESORCIÓN DE AGUA EN LECHE EN POLVO: II. LECHE ENTERA. Revista Avances en Ciencias e Ingeniería - ISSN: 0718-8706. Consultado el 10 de septiembre de 2017. [http://www.exeedu.com/publishing.cl/av\\_cienc\\_ing/](http://www.exeedu.com/publishing.cl/av_cienc_ing/)
- Staudt, P. B., Kechinski, C. P., Tessaro, I. C., Marczak, L. D. F., Soares, R de P., Cardozo, N. S. M., 2013. A new method for predicting sorption isotherms at different temperatures using the BET model. Journal of Food Engineering. DOI <http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2012.07.016>
- Tsai, S-Y., Hwang, S-P., Lin, C-P., 2016. A KINETICS STUDY OF COFFEE BEAN OF ROASTING AND STORAGE CONDITIONS. Journal of Food Processing and Preservation ISSN 1745-4549. doi:10.1111/jfpp.13040
- Uribe, L., Vega-Gálvez, A., Di Scala, K., Oyanadel, R., Torrico, S. J., Miranda, M., 2011. Characteristics of Convective Drying of Pepino Fruit (*Solanum muricatum* Ait.): Application of Weibull Distribution. Food Bioprocess Technol. DOI 10.1007/s11947-009-0230-y



