Propiedades físicas de alimentos y modelización

Apellidos, nombre	Talens Oliag, Pau (pautalens@tal.upv.es)
Departamento	Tecnología de Alimentos
Centro	Universitat Politècnica de València

1 Resumen de las ideas clave

En el área de la tecnología de alimentos es muy habitual estudiar y analizar la relación que tiene lugar entre distintas propiedades físicas entre sí o como se ve afectada una propiedad física por distintas variables (tiempo, temperatura, contenido en humedad, cambios en la composición, etc). El uso de modelos matemáticos es necesario para analizar estas relaciones.

En este artículo docente vamos a describir qué es un modelo matemático y los pasos que debemos llevar a cabo para aplicar un modelo matemático a unos resultados experimentales.

2 Introducción

En ciencias aplicadas y en tecnología, podemos definir un modelo matemático como un modelo que utiliza fórmulas matemáticas para representar la relación entre distintas variables. Los modelos matemáticos proporcionan una de las herramientas básicas para describir procesos fisicoquímicos que tienen lugar dentro de la industria alimentaria, así como para poder explicar y predecir el comportamiento de un proceso o un alimento, en condiciones variadas.

La primera fase del método científico consiste en formular, a partir de las observaciones, las ecuaciones matemáticas que permite describir las observaciones realizadas. Estas ecuaciones, en una segunda fase, nos deberían permitir predecir los resultados de futuras observaciones. En el caso de que no fuera así, las ecuaciones obtenidas deberían desecharse y buscar nuevas ecuaciones hasta obtener aquella relación que sea la adecuada y nos permitan predecir correctamente los resultados.

¿Cómo podemos encontrar estas ecuaciones? En eso consiste la modelización matemática. De una manera muy sencilla y simplificada, la modelización consta de 3 pasos:

Paso 1: Estudiar la relación que hay entre las observaciones (en nuestro caso generalmente se trataran de las medidas experimentales realizadas). Una forma sencilla de llevar a cabo este paso es graficar la relación que hay entre las variables de estudio situando en dicha gráfica los puntos experimentales obtenidos.

Paso 2: Postular las ecuaciones que relacionan las variables. En otras palabras, se trata de encontrar la fórmula matemática que las relaciona entre sí.

Paso 3: Comparar los resultados obtenidos a partir de las ecuaciones matemáticas del paso dos con las observaciones o medidas experimentales hechas en el paso uno y realizar otras observaciones o medidas experimentales que puedan confirmar el modelo. En caso de que no lo confirmen, intentar modificarlo convenientemente. Para ello habría que retroceder al paso 2 y repetir la comparación.

En el ámbito de propiedades físicas de alimentos podemos encontrar para muchas relaciones, modelos propuestos por otros autores. Ejemplos de ello son los modelos de BET, GAB, Caurie o Henderson usados para modelizar la relación existente entre el contenido en agua y la actividad de agua de un alimento (1), la ecuación de Robison y Stokes que permite relacionar la actividad de agua con la temperatura a la que se encuentra el alimento (2), el modelo de Gordon y Taylor que permite relacionar la temperatura de transición con la composición del producto (3), los modelos de la ley de la potencia, Casson o Herchely-Bulkey que nos permiten relacionar el comportamiento reológico de un fluido (4) o la ecuación de Arrhenius que nos permite relacionar la viscosidad de un producto con la temperatura (4). Sin embargo, en otros casos estos modelos deberemos creárnoslos nosotros mismos, siguiendo los 3 pasos indicados previamente.

3 Objetivo

Con la redacción de este artículo docente se persigue que los alumnos comprendan el significado de modelizar, y que aprendan a modelizar los puntos experimentales obtenidos por ejemplo en un ensayo de laboratorio y a interpretar los resultados obtenidos.

4 Desarrollo

En el punto 4.1 vamos a describir los fundamentos teóricos sobre modelización.

En el punto 4.2 veremos ejemplos de modelizaciones.

4.1 Fundamentos teóricos sobre modelización

Como hemos visto anteriormente, de una manera muy sencilla y simplificada, la modelización consta de 3 pasos:

Paso 1: Estudiar la relación que hay entre las variables de estudio.

Paso 2: Postular la ecuación que nos permita relacionar las variables de estudio.

Paso 3: Verificar si el modelo obtenido es adecuado.

Para llevar a cabo el paso 1, lo primero que deberemos hacer es representar gráficamente la relación que hay entre las variables que estemos estudiando. La figura 1 muestra a modo de ejemplo unos puntos experimentales (puntos presentados en color rojo en la figura) que presentan una relación lineal entre ambas variables.

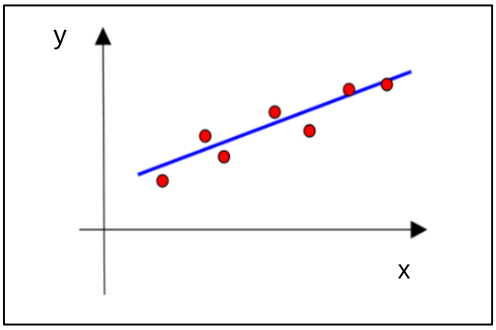

Figura 1. Ajuste lineal

Una vez estudiada el tipo de relación para las dos variables x e y, pasaremos al paso 2 que es buscar una ecuación que nos permita estudiar la relación entre las variables. Para el modelo lineal, la ecuación de la recta vendrá descrita por la ecuación $y = a + bx$. La determinación de los parámetros a y b nos va a permitir relacionar las dos variables x e y. Para ello seguiremos los siguientes pasos:

1. Se eligen las escalas adecuadas de los ejes, de acuerdo a los valores observados para la variable independiente (eje x) y los valores observados para la variable dependiente (eje y).
2. Se grafican los pares ordenados de la tabla donde se recolectaron los valores observados en el experimento en cuestión.
3. Se traza una recta usando los puntos experimentales.
4. Se eligen y se marcan 2 puntos en la recta y se determinan sus coordenadas. A través de estos puntos se determina la pendiente de la recta cuyo valor corresponde con el valor del parámetro a del modelo.
5. Se prolonga con una línea de puntos la recta hasta que corte con el eje y y se determina el valor de la ordenada en el origen, valor que corresponde con el parámetro b del modelo.

Una vez tenemos los parámetros a y b, podemos verificar si el modelo se ajusta a los datos experimentales. Para ello bastará con dar valores de x y calcular los valores de y, o viceversa. Si los puntos obtenidos coinciden con las medidas experimentales es que el modelo es adecuado. Sino, habrá que buscar otro modelo. Pero, ¿qué sucede si la relación que presentan los datos experimentales no es lineal? En estos casos bastará con linealizar las ecuaciones no lineales. La linealización es un procedimiento por el cual las ecuaciones no lineales que representan el modelo del proceso se transforman en ecuaciones lineales, con solución analítica general. Una vez tenemos esa ecuación de forma linealizada se trabaja como se ha detallado previamente. Veamos a continuación 3 posibles ejemplos. Las figuras 2, 3 y 4 muestran 3 posibles relaciones entre variables no lineales, una relación potencial (figura 2), una relación exponencial (figura 3) y una relación hiperbólica (figura 4).

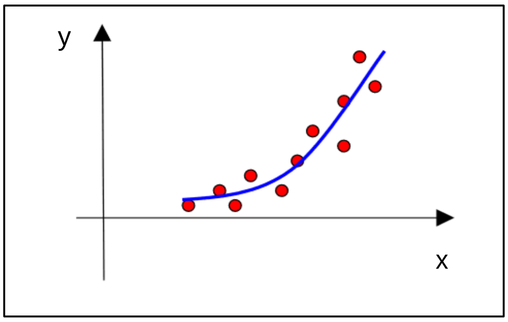

Figura 2. Ajuste potencial

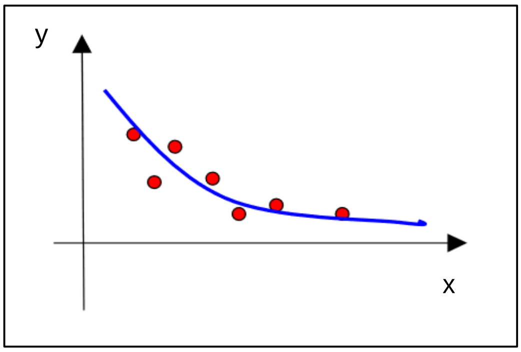

Figura 3. Ajuste exponencial

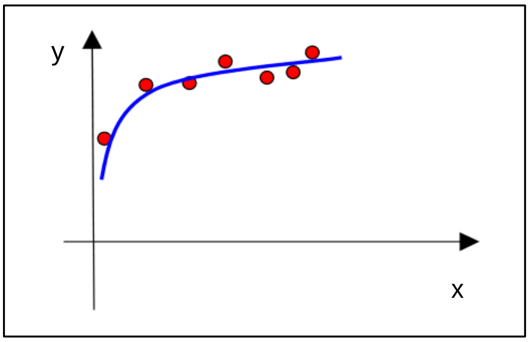

Figura 4. Ajuste hiperbólico

Para el modelo potencial, la ecuación de la recta vendrá descrita por la ecuación $y = a \cdot x^b$, para el modelo exponencial, la ecuación de la recta vendrá descrita por la ecuación $y = a \cdot e^{b \cdot x}$, y para el modelo hiperbólico, la ecuación de la recta vendrá descrita por la ecuación $y = (a \cdot x)/(b+x)$.

Para trabajar con este tipo de curvas, bastará con linealizar las ecuaciones. En los dos primeros casos podemos hacer uno de logaritmos (bien en base 10, bien en base natural) y en el tercer caso, bastará con sacar factor común y dejar la expresión que relaciona x e y de forma linealizada.

El modelo potencial podemos linealizarlo al aplicar el logaritmo natural de la siguiente forma: $\mathrm{Ln}\ (y) = \ln(a \cdot x^b) = \ln\ (a) + \ln(x^b) = \ln(a) + b \cdot \ln(x)$, donde si representamos el ln(y) frente al ln(x), obtendremos una recta con pendiente b y ordenada en el origen ln(a).

El modelo exponencial podemos linealizarlo al aplicar el logaritmo natural de la siguiente forma: $\ln(y) = \ln\ (a \cdot e^{b \cdot x}) = \ln(a) + \ln\ (e^{b \cdot x}) = \ln\ (a) + b \cdot x$, donde si representamos el ln(y) frente a x, obtendremos una recta con pendiente b y ordenada en el origen ln(a).

El modelo hiperbólico podemos linealizarlo sacando factor común de la siguiente forma: $1/y = (b+x)/(a \cdot x) = (b/a) \cdot (1/x) + 1/a$, donde si representamos 1/y frente a 1/x, obtendremos una recta con pendiente b/a y ordenada en el origen 1/a.

4.2 Ejemplos de cálculo

Imaginad que queremos determinar la cantidad de colorante que se pretende adicionar a un producto para conseguir no sobrepasar una diferencia de color con respecto al producto sin aditivo de 3 unidades. Para ello, disponemos de la tabla 1 donde se muestran los datos de concentración del colorante y la diferencia de color que experimenta el producto, en relación al producto sin colorante, con la adición de esa cantidad de colorante.

Tabla 1. Relación entre concentración de colorante y diferencia de color con respecto al producto sin adición de colorante.

Concentración Colorante mg/kg	**ΔE***
0	0
30	2.7
60	3.2
90	3.5
120	3.7

Para resolver la actividad, vamos a seguir los 3 pasos descritos previamente:

Paso 1: Estudiar la relación que hay entre las variables de estudio.

Para ello representamos la relación entre la concentración de colorante y la diferencia de color provocada (figura 5).

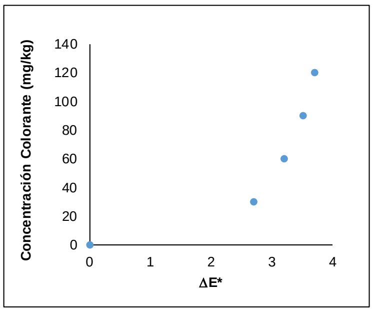

Figura 5. Relación entre las variables de estudio

Paso 2: Postular la ecuación que nos permita relacionar las variables de estudio.

Si observamos la relación es de tipo exponencial. Podemos linealizarla la relaciçón al aplicar el logaritmo natural de la siguiente forma: ln(y) = ln (a) +b·x, donde si representamos el ln(Concentración de Colorante) frente a ΔE, obtendremos una recta con pendiente 1.3822 y ordenada en el origen de -0.3309 (figura 6).

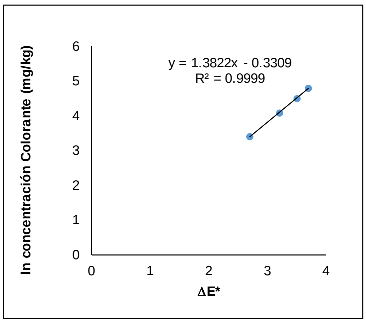

Figura 6. Linealización de las variables de estudio

Para una diferencia de color de 3 unidades, si sustituimos en la ecuación obtenida, ln(Concentración de Colorante) = -0.3309 + 1.3822·3, vemos que la concentración de colorante es 45.4 mg/kg.

Paso 3: Verificar si el modelo obtenido es adecuado.

Para verificar si el modelo es adecuado, bastará con dar valores de diferencia de color y obtener valores de concentración de colorante o a la inversa (tabla 2), de manera que, si el modelo es adecuado, los puntos experimentales deben caer en la propia curva de predicción (figura 7).

Tabla 2. Predicción de valores de concentración de colorante en función de la diferencia de color.

Concentración Colorante mg/kg	ΔE*
0	0.0
1.43	0.5
2.86	1.0
5.71	1.5
11.40	2.0
22.75	2.5
45.41	3.0
90.63	3.5
180.89	4.0

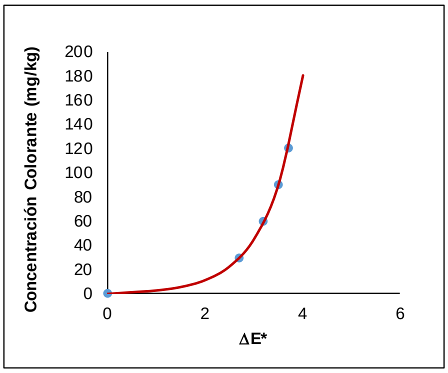

Figura 7. Verificación del modelo. Los puntos experimentales vienen representados en azul y la curva de predicción en rojo.

5 Cierre

En este objeto de aprendizaje se han expuesto los fundamentos que explican el significado de modelizar unos datos experimentales. Se han descrito los principales pasos a seguir para modelizar unos datos experimentales y se ha presentado un ejemplo real de modelización.

6 Bibliografía

[1] Fito Maupoey, Pedro José; Andrés Grau, Ana; Chiralt Boix, Amparo; Martínez Navarrete, Nuria (2000). Termodinámica y cinética de sistemas alimento entorno. Editorial: Universidad Politécnica de Valencia.

[2] Robinson, R.A.; Stokes, R.H. (1965). Electrolyte solutions. Butterworths Publication Ltd., London, 571.

[3] Gordon, M. y Taylor, J. S. 1952. Ideal copolymers and the second-order transitions of synthetic rubbers. I. Non-crystalline copolymers. J. Appl. Chem. 2:493-500.

[4] Chiralt Boix, Amparo; Martínez Navarrete, Nuria; González Martínez, Chelo; Talens Oliag, Pau; Moraga Ballesteros, Gemma (2007). Propiedades físicas de los alimentos. Editorial: Universidad Politécnica de Valencia.