

MEMORIA CIENTÍFICA DE LAS ACTIVIDADES DESARROLLADAS:

Los objetivos específicos propuestos para el proyecto *Modelización y simulación de procesos de inactivación microbiológica en tratamientos de alimentos por altas presiones* (Ref. FUT-C2-0044) eran:

- 1) Estudios cinéticos de la inactivación de los microorganismos patógenos y alterantes mediante un modelo macro (considerando que la inactivación es homogénea en todo el alimento).
- 2) Modelización matemática y simulación en ordenador de la distribución de temperaturas que tendrá lugar en la máquina de altas presiones durante los procesos que se pretenden llevar a cabo.
- 3) Combinación de los modelos desarrollados en los puntos 1) y 2) anteriores para obtener un modelo local de inactivación de microorganismos que nos permita distinguir las zonas de mayor y menor inactivación dentro del alimento y cuantificar dicha inactivación mediante simulaciones en el ordenador.
- 4) Validación de los modelos obtenidos por medio de experimentos y/o datos que aparecen en la literatura.
- 5) Análisis de la influencia de la presurización y de la despresurización en la estabilidad de la temperatura de la muestra y en la homogeneidad de la inactivación de microorganismos en su interior, durante el proceso. Se tendrá en cuenta su dependencia con el fluido presurizador y con el alimento tratado.
- 6) Realización de estudios comparativos entre los resultados obtenidos con Alta Presión y los obtenidos con tecnologías tradicionales (pasteurización, congelación).
- 7) Identificación de puntos estratégicos a desarrollar en el futuro en relación con la aplicación de las altas presiones y determinación de un marco interdisciplinar idóneo para llevar a cabo su estudio en un proyecto de investigación de mayor envergadura entre Grupos de Investigación de diversas áreas.
- 8) Elaboración de una página web donde se expongan los antecedentes, objetivos y desarrollos, y/o novedades, para informar al resto de los participantes en el programa i-MATH, así como a visitantes especializados e investigadores. Asimismo, se diseñará una parte de la página para informar a los consumidores.

Los resultados conseguidos con el proyecto en relación con los objetivos anteriores son los siguientes:

Objetivo 1: Se han buscado modelos matemáticos macro adecuados para describir el comportamiento de la inactivación enzimática que se produce en algunas enzimas. Se han tomado, a modo de test, algunas de las enzimas que suelen ser causas habituales de degradación de los alimentos con el paso del tiempo. En particular se han considerado los casos de las tres enzimas siguientes:

- Bacillus Subtilis α –Amylase (BSAA): Se trata de una enzima producida por una bacteria llamada Bacillus Subtilis. Esta bacteria, presenta en la tierra, puede

contaminar la comida y causar intoxicación. La BSAA cataliza la hidrólisis del almidón generando azúcares (como la maltosa) que pueden también modificar el sabor del alimento..

- Lipoxygenase (LOX): Esta enzima está presente en varias plantas y verduras tales como las judías verdes y los guisantes. Suele ser una de los responsables de la aparición de aromas desagradables en estos productos.
- Carrot Pectin Methyl-Esterase (CPE): La Pectin Methyl-Esterase es una enzima que es común en la mayoría de las verduras. Puede aparecer en los zumos produciendo low-methoxyl pectin y reduciendo la viscosidad del zumo.

Los modelos utilizados calculan la evolución de la actividad de una enzima a través de una ecuación cinética de primer orden, en la que interviene la tasa de inactivación, que depende de la presión y temperatura a la que se somete al alimento. Esta tasa de inactivación es distinta para cada enzima y para calcular una expresión matemática que la aproxime se pueden utilizar, por ejemplo, las ecuaciones de Arrhenius y de Eyring. De esta forma, para las tasas de inactivación se obtienen unas expresiones que dependen de ciertos parámetros que son identificados con datos experimentales, mediante técnicas de regresión.

Una vez calculada la tasa de inactivación correspondiente, se puede aproximar fácilmente la evolución de la inactivación de la enzima que se está considerando, supuesta conocida la temperatura y la presión a la que está expuesta durante un cierto periodo de tiempo. Esta presión es conocida pues la elige el usuario de la máquina utilizada, dentro de sus límites de potencia. Para calcular la distribución de temperaturas se utilizarán los modelos matemáticos desarrollados en el marco del Objetivo 2.

Objetivo 2: Se han elaborado modelos matemáticos que describen de forma precisa los procesos que se están considerando.

Para el caso de un alimento de tipo sólido que ocupa la casi totalidad de la vasija interior de la máquina de alta presión se ha considerado como modelo completo un modelo de transferencia de calor por conducción, sin tener en cuenta la convección que se produce en el fluido presurizante, ya que en trabajos realizados con anterioridad a este proyecto ya habíamos probado que la convección tenía en este caso un efecto despreciable.

Para el caso de un alimento sólido pequeño (con respecto al interior de la vasija) se propone como modelo completo el que, además de la transferencia de calor por conducción, tiene en cuenta también la que se produce por convección en el fluido presurizante. Para ellos se utilizan las Ecuaciones de Navier-Stokes compresibles.

En el caso de un alimento líquido se ha considerado como modelo completo el mismo que en el caso de un alimento sólido pequeño, pero además la transferencia de calor por convección debe ser tenida en cuenta no sólo en el líquido presurizante, sino también en el alimento. Para ellos se utilizan dos Ecuaciones de Navier-Stokes compresibles (una para el fluido presurizante y otra para el alimento, pues ambos están separados por la bolsa que contiene al alimento).

En los tres casos anteriores se han considerado simplificaciones del modelo completo con el objetivo de simplificar el tiempo de cálculo computacional necesario para simular numéricamente el proceso.

Para el caso de un alimento de tipo sólido grande se ha considerado la simplificación consistente en tomar valores constantes para las propiedades termofísicas de los materiales utilizados (para las que contamos con expresiones que dependen de la presión y de la

temperatura). Para ello se han tomado los valores medios en el rango de temperaturas y presiones utilizados.

Para los otros dos casos consideramos primero un modelo simplificado con coeficientes constantes como en el caso del alimento de tipo sólido grande, excepto para la densidad, que permanece dependiendo de la temperatura y de la presión para mantener el efecto de la fuerza gravitacional. En una segunda simplificación utilizamos la aproximación de Boussinesq, para lo que se consideran las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles y todas las propiedades termofísicas constantes salvo la densidad en el término de la fuerza gravitacional.

Se ha desarrollado un análisis de sensibilidad de los modelos propuestos, mostrando su robustez con respecto a posibles variaciones en todos los coeficientes y términos del modelo.

Se han evaluado los modelos simplificados desarrollados, mostrando que los resultados que se obtienen con éstos están cerca de los obtenidos con los modelos completos. Esto indica la conveniencia de utilizar estos modelos simplificados (que necesitan menos tiempo de cálculo computacional para ser resueltos numéricamente) cuando se quieran hacer cálculos de optimización y control (que requieren resolver las ecuaciones de estado muchas veces).

Se han resuelto problemas inversos relativos a la identificación del coeficiente de calor H entre un cierto material y el medio que lo rodea. Se supone que H es una función que depende de la temperatura, lo que complica considerablemente el problema. Los datos del problema son ciertas mediciones experimentales que se suponen conocidas. El objetivo es identificar H de forma que las soluciones del modelo de transferencia de calor correspondiente proporcione valores aproximados de las mediciones experimentales. Para resolver este problema se han supuesto varios escenarios distintos (en función de si los datos experimentales vienen con un posible error o no, etc.). Para cada escenario se suponen conocidas la temperatura inicial y la temperatura ambiente, se identifica la función H por diferentes métodos y se obtienen cotas del error con respecto a adecuadas normas. Finalmente hemos estudiado también estos problemas inversos en el marco de la teoría clásica para espacios de Hilbert, utilizando varios métodos (Tikhonov, Morozov, Landweber, . . .) y hemos comparado sus soluciones con las obtenidas mediante los métodos que hemos desarrollado en el proyecto, mostrando la conveniencia de éstos últimos para los casos tratados.

Objetivo 3: Los modelos macro estudiados en el objetivo 1 se han acoplado con modelos macro para la inactivación de enzimas desarrollados en el objetivo 2. Esto nos ha proporcionado un modelo local de inactivación de enzimas que nos permite distinguir las zonas de mayor y menor inactivación dentro del alimento y cuantificar dicha inactivación mediante simulaciones en el ordenador.

Objetivo 4: Se han comparado las temperaturas obtenidas con los modelos matemáticos desarrollados con las obtenidas por medio de experimentos realizados en la máquina de Alta Presión (ACB GEC Alsthom, Nantes, Francia) que tiene el Instituto del Frío de Madrid (algunos de cuyos miembros son miembros de este proyecto). Para los experimentos hemos utilizado la Tilosa, que es un gel que tiene propiedades similares a las de una carne y se utiliza de forma habitual en la investigación en Ingeniería de alimentos (pues se conocen muy bien sus propiedades termofísicas). La similitud de los resultados ha sido muy satisfactoria.

Objetivo 5: En este objetivo hemos mostrado que, cuando se quiere utilizar el procesado de

alimentos con alta presión como alternativa a la pasteurización (que utiliza temperaturas muy elevadas que degradan algunas propiedades del alimento) es conveniente optimizar la temperatura inicial del alimento, de la máquina de alta presión y del fluido presurizante. Para ello mostramos que puede interesar utilizar una temperatura inicial de la máquina de alta presión y del fluido presurizante igual a la del baño térmico que se vaya a utilizar, pero con una temperatura inicial del alimento inferior, de forma que el calor producido por el incremento de presión lleve al alimento a temperaturas cercanas a la del baño térmico. De otra forma podríamos obtener temperaturas del alimentos más elevadas de lo necesario (que es una de las cosas que se pretenden evitar con este tipo de procesos).

Hemos desarrollado también diversas técnicas que permiten resolver problemas inversos, de optimización y de control de carácter general y hemos desarrollado una nueva versión del paquete de Optimización Global "GOP" (véase <http://www.mat.ucm.es/momat/software.htm>), que nuestro grupo ha creado y ha puesto a disposición de cualquier investigador que lo desee.

Objetivo 6: Los estudios comparativos entre los resultados obtenidos con Alta Presión y los obtenidos con tecnologías pasteurización han resultado incontestables: La Pasteurización necesita aplicar temperaturas muy elevadas que destruyen muchas propiedades nutricionales del alimento y cambian muchas de sus propiedades organolépticas (color, sabor, textura, aroma, etc.). La aplicación de altas presiones permite reducir la actividad enzimática de forma similar a la Pasteurización pero con temperaturas mucho más moderadas y, de acuerdo a los estudios que aparecen en la literatura, esto hace que el alimento conserve muchas más de sus propiedades.

Objetivo 7: Tras este proyecto y, a la vista de los estudios que se están llevando a cabo en todo el mundo sobre la tecnología de las altas Presiones en el procesado de alimentos, parece claro que hay que dar continuidad a este tipo de modelización matemática, incluyendo los procesos con cambio de fase (congelación/descongelación).

La optimización es una de las grandes áreas que queda pendiente. Se necesita determinar para cada alimento concreto qué entidades biológicas son las más dañinas para su estabilidad y cuáles son los procesos óptimos de temperatura y presión.

Nos parece importante también utilizar como datos para la calibración y validación de los modelos desarrollados los proporcionados por industrias que en la actualidad estén utilizando la tecnología de las altas presiones en el procesado de alimentos. Para esto contamos con la colaboración de la empresa Esteban Espuña S.A. (con sede en Olot, Girona) que fue la primera en introducir en España esta técnica a nivel industrial.

Hay que resaltar que para llevar a cabo este tipo de investigación se necesitan expertos en varias áreas: Matemáticos, Ingenieros o Físicos expertos en Tecnología de alimentos, expertos en microbiología, etc. Contamos ya con la colaboración de varios grupos de investigación en estas áreas (tanto nacionales como internacionales) que nos permitirán poder diseñar nuevos proyectos en este campo.

Objetivo 7: Véase la página web <http://www.mat.ucm.es/momat>.

Publicaciones realizadas:

- R. Azencott, R. Glowinski y Á.M. Ramos, A Controllability Approach to Shape

Identification. *Applied Mathematics Letters*, ISSN: 0893-9659. Vol. 21, Issue 8, 2008, pp. 861-865. DOI link: <http://dx.doi.org/10.1016/j.aml.2007.08.013>.

- Fraguela, A., Infante, J.A., Ramos, Á.M. y Rey, J.M. Rey, Inverse Problems in Heat Exchange Processes. En *Modern Topics in Computer Science. Proceedings of the 2nd WSEAS International Conference on Computer Engineering and Applications (CEA'08)*, Acapulco, Mexico, Enero 2008. Electrical and Computer Engineering Series, Eds.: A. Grebennikov, A. Zemliak. WSEAS Press, ISSN: 1790-2760, ISBN: 978-960-6766-32-9, pp. 250-255.
- A. Fraguela, J.A. Infante, Á.M. Ramos y J.M. Rey, Identification of a Heat Transfer Coefficient when it is a Function Depending on Temperature. *WSEAS Transactions on Mathematics*, ISSN: 1109-2769, Issue 4, Volume 7, April 2008, pp. 160-172.
- B. Ivorra, B. Mohammadi y Á.M. Ramos, Optimization strategies in credit portfolio management. Artículo aceptado para publicar en *Journal of Global Optimization*, ISSN: 0925-5001 (paper) ISSN: 1573-2916 (online). DOI link: <http://dx.doi.org/10.1007/s10898-007-9221-6>.
- J.A. Infante, B. Ivorra, Á.M. Ramos y J.M. Rey, On the Modelling and Simulation of High Pressure Processes and Inactivation of Enzymes in Food Engineering. Artículo enviado a publicar a *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences (M3AS)*, ISSN: 0218-2025 (paper), ISSN: 1793-6314 (online).
- B. Ivorra, B. Mohammadi y Á.M. Ramos, Optimizing Initial Guesses to Improve Global Minimization. Enviado a publicar.
- B. Ivorra, Á.M. Ramos, B. Mohammadi e Y. Moreau, Design of Code Division Multiple Access Filters Using Global Optimization Techniques. En DVD con *Proceedings of EngOpt 2008 - International Conference on Engineering Optimization*, ISBN: 978857650156-5, Rio de Janeiro, Brasil, 1-5 Junio, 2008. http://www.engopt.org/kongreso/artigos/artigos_aprovados223f.html?autor=1458&idioma=en.
- M. Carrasco, B. Ivorra y Á.M. Ramos, Validation of a new variance-expected compliance model for structural optimization. Enviado a publicar.
- M. Carrasco, B. Ivorra, Á.M. Ramos y F. Álvarez, Validation of a new variance-expected compliance model for structural optimization. En DVD con *Proceedings of EngOpt 2008 - International Conference on Engineering Optimization*, ISBN: 978857650156-5, Rio de Janeiro, Brasil, 1-5 Junio, 2008. http://www.engopt.org/nukleo/pdfs/0099_engopt_truss_carrasco_ivorra_amos_alvarez.pdf
- B. Ivorra, B. Mohammadi y Á.M. Ramos, Design of Code Division Multiple Access Filters Using Global Optimization Techniques. Enviado a publicar.

Dirección de Tesis doctorales:

Doctorando: Juan Antonio Infante del Río (miembro del proyecto).

Título: Análisis Numérico de Modelos Matemáticos y problemas Inversos en tecnología de Alimentos.

Fecha de comienzo: 2004.

Fecha de lectura: En curso de realización.

Universidad: Universidad Complutense de Madrid.

Facultad: Facultad de Matemáticas.

Directores: Á.M. Ramos y J.M. Rey (ambos miembros del proyecto)

Otras actividades:

En mayo de 2008 se impartió el curso de 30 horas Modelos Matemáticos en Ingeniería de Alimentos en el Máster del Programa Oficial de Posgrado en Ingeniería Matemática de la Universidad Complutense de Madrid. El curso fue impartido por Ángel Manuel Ramos (investigador responsable de este proyecto), con la colaboración de los investigadores Pedro Dimas Sanz y Bérengère Guignon (ambos miembros de este proyecto) del Instituto del Frío del CSIC (donde además se impartieron clases de tipo práctico y se visitaron las instalaciones).

Además se ha dirigido el siguiente trabajo de iniciación a la Investigación en el marco del Programa Oficial de Posgrado en Investigación Matemática de la Universidad Complutense de Madrid (con mención de calidad MCD 2006-00482):

Autor: Nadia Smith

Título: Modelización matemática en Ingeniería de alimentos

Director: Á.M. Ramos (investigador responsable de este proyecto).

Fecha: Septiembre de 2008.

Calificación: Sobresaliente.

Créditos: 25 créditos (ECTS).

Universidad: Universidad Complutense de Madrid

VALORACIÓN DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS:

Los modelos matemáticos desarrollados en los objetivos tienen una gran relevancia científica y tecnológica, pues permiten:

a) Simular numéricamente en el ordenador los efectos de un proceso de alta presión sobre un alimento concreto en una máquina de alta presión concreta. Esto es de gran interés para la optimización de los procesos.

b) Diseñar el comportamiento de una nueva máquina de alta presión que se quiera construir para el procesado de alimentos.

Los problemas inversos que se estudian tienen una gran importancia científica y tecnológica, pues las soluciones de estos problemas son las que nos permiten identificar los parámetros que hay que utilizar en cada caso concreto (alimentos, fluidos presurizantes, material de la máquina de alta presión, etc..) en los modelos desarrollados en el Objetivo 1.

Como conclusión, se han conseguido los objetivos planteados de una forma muy satisfactoria, obteniendo resultados de una gran relevancia para el estudio del tratamiento de alimentos mediante procesos de alta presión.

ESTIMACIÓN DEL IMPACTO DE LOS RESULTADOS EN LAS ACTIVIDADES FUTURAS:

En el desarrollo del Proyecto se ha colaborado con el Grupo del Dr. Andrés Fraguela en la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (Méjico) con el que se ha comenzado a trabajar intensivamente en relación con la resolución de problemas inversos para la identificación de propiedades termofísicas.

Se ha colaborado con otro Grupo mejicano dirigido por la Dra. Susana Gómez, de la Universidad nacional Autónoma de Méjico, que es experto en problemas de optimización.

Se ha colaborado también con el Grupo de Roland Glowinski y Robert Azencott, de la Universidad de Houston. Este Grupo es uno de los número uno mundial en la resolución numérica de Ecuaciones en Derivadas Parciales, así como en su Control y Optimización.

Se ha colaborado con el Grupo del investigador Jacques Henry del Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique (INRIA) en Burdeos (Francia), experto en el análisis matemático de Ecuaciones en Derivadas Parciales.

Se ha establecido también una colaboración de cara al futuro con la empresa “Esteban Espuña, S.A.”, que es la primera que introdujo en España la tecnología de las altas presiones para el procesado de alimentos. En particular, en 1998 introdujo en el mercado jamón cocido loncheado pasteurizado a alta presión. Posteriormente ha ido ampliando sus equipos de alta presión y los alimentos tratados con ellos. Véase la página web http://www.espuna.es/esp/nos_pro_04.htm.

Durante el desarrollo de este Proyecto se ha mantenido contacto con esta empresa. En particular con Xavier Espuña Soler (que es el gerente de esta empresa) y con Mònica Gassiot Cordoní (que es la responsable de Investigación y Desarrollo de la empresa en el Departamento Técnico y de Calidad).

Se ha ido informando a esta empresa de los avances que se han ido logrando, pues estaba interesada en los resultados que pudieran afectar a la vida útil y la seguridad de los productos que ellos comercializan.

El día 13 de diciembre de 2007 Bérenguère Guigon, Benjamin Ivorra y Ángel Manuel Ramos (miembros de este proyecto) se desplazaron a la sede de esta empresa en Olot (Girona) para mantener una jornada de trabajo con los responsables de ésta mencionados anteriormente (entre otros).

Su participación al proyecto se ha limitado durante este proyecto a mostrar su apoyo e interés y a aportar nuevas ideas durante la reunión mantenida y posteriores intercambios de correos y llamadas telefónicas. A partir de los resultados que hemos ido obteniendo, se han mostrado interesados en continuar la colaboración y en aumentar su grado de implicación con nuestros futuros proyectos. En este sentido, ha aumentado el grado de su colaboración, pasándonos datos experimentales que ha solicitado a los laboratorios de la Stazione sperimentale per l'industria delle conserve alimentari in Parma. sobre el impacto de la temperatura y la alta presión en la Listeria monocytogenes presente en el jamón cocido. Hay que tener en cuenta que éste uno de los principales agentes de degradación de los alimentos que ellos comercializan. La idea es utilizar estos datos para desarrollar un modelo matemático que sea capaz de simular su comportamiento ante diferentes presiones y temperaturas.