

Simulación del tiempo de extracción en función de la temperatura de proceso y de la microestructura del material vegetal

Simulation of the extraction time as a function of the process temperature and the microstructure of the plant material.

N.S. Valencia-Pérez ^a, G.I. Cerón-Montes ^{a*}, A. Garrido-Hernández ^a, G. Carrillo-Sancen ^a, J. Yáñez-Fernández ^b,
R. Castro-Muñoz ^c

^a División Químico Biológica, Universidad Tecnológica de Tecámac, Carretera Federal México - Pachuca, Km. 37.5, Predio Sierra Hermosa, C.P. 55740, Tecámac, Estado de México, México.

^b Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología U.P.I.B.I., Instituto Politécnico Nacional, Av. Acueducto S/N Col. Barrio La Laguna, Ticomán, Ciudad de México, C.P. 07340, México.

^c Tecnológico de Monterrey, Campus Toluca, Avenida Eduardo Monroy Cárdenas 2000 San Antonio Buenavista, 50110 Toluca de Lerdo, México

Resumen

La extracción sólido líquido de fuentes vegetales es una bioseparación ampliamente utilizada para la obtención de sustancias orgánicas de interés en la industria química, alimentaria, farmacéutica y cosmética. En el presente trabajo se llevó a cabo la simulación del efecto de la temperatura y la microestructura sobre la extracción sólido líquido empleando la solución de Simpson de la segunda ley de Fick de la difusión anómala. En base al comportamiento de extracción se propuso un método numérico novedoso para determinar el tiempo de extracción en el cual se obtiene la mejor relación entre el tiempo de proceso y el rendimiento obtenido con el objeto de que se tenga rentabilidad en el proceso. La simulación se realizó con Matlab y se evaluaron los parámetros del modelo que representan el efecto de la microestructura (n) y el efecto de la temperatura (k_2) de manera individual y combinado en un rango de 80% al 120% de su valor inicial. El ajuste de los datos experimentales al modelo de Simpson presentó una R^2 de 0.99875 y la evaluación del parámetro k_2 (temperatura) mostró tener menor consecuencia en el comportamiento y tiempo de extracción que el parámetro n (microestructura) con tiempos de extracción de 507.8 a 14.5 min. y de 79.3 a 46.6 min. para n y k_2 respectivamente. Los resultados de la simulación fueron congruentes con los observados en biomateriales con estructuras claramente diferentes como las de semillas y hojas extraídos a diferentes temperaturas por lo que los métodos numéricos propuestos pueden ser una herramienta útil para la implementación de esta bioseparación.

Palabras Clave:

Extracción, modelación, metabolitos, segunda ley de Fick.

Abstract

Solid-liquid extraction from plant sources is a widely used bioseparation for obtaining organic substances of interest in the chemical, food, pharmaceutical, and cosmetic industries. In the present work, the simulation of the effect of temperature and microstructure on the solid-liquid extraction was carried out using Simpson's solution of Fick's second law of anomalous diffusion. Based on the extraction behavior, a novel numerical method was proposed to determine the extraction time in which the best relationship between the process time and the yield is obtained to have profitability in the process. The simulation was carried out with Matlab and the parameters of the model that represent the effect of the microstructure (n) and the effect of temperature (k_2) were evaluated individually and combined in a range of 80% to 120% of their initial value. The adjustment of the experimental data to the Simpson model presented an R^2 of 0.998, while the evaluation of the parameter k_2 (temperature) showed to have less consequence in the behavior and extraction time than the parameter n (microstructure) with extraction times of 507.8 to 14.5 min. and from 79.3 to 46.6 min. for n and k_2 respectively. The results of the simulation were consistent with those observed in biomaterials with clearly different structures such as those of seeds and leaves extracted at different temperatures, so the proposed numerical methods can be a useful tool in this bioseparation.

Keywords:

Extraction, modeling, metabolites, Fick's second law.

*Autor para la correspondencia: ivan_gcm@hotmail.com

Correo electrónico: naellavalenciap@hotmail.com (Naella Sandivel Valencia-Pérez), ivan_gcm@hotmail.com (Genaro Iván Cerón-Montes), agarridoh@uttecamac.edu.mx (Aristeo Garrido-Hernández), casaby@hotmail.com (Gabriela Carrillo-Sancen), jyanezfe.ipn@gmail.com (Jorge Yáñez-Fernández), food.biotechnology88@gmail.com (Roberto Castro-Muñoz).

1. Introducción

La extracción sólido-líquido convencional es comúnmente la primera operación empleada para obtener sustancias de valor agregado que se emplean en alimentos, fármacos y cosméticos (Cerón *et al.* 2015; Valencia *et al.* 2020). En este contexto los modelos matemáticos de cinéticas de extracción son una herramienta útil para predecir los resultados en distintas condiciones de proceso y tomar consideraciones para una mejor relación costo beneficio (Jurinjak *et al.*, 2016; Inoue *et al.*, 2010). Dentro de las condiciones de operación comúnmente referidas en los métodos de extracción se encuentran el tipo de disolvente, el pH, la temperatura, la relación sólido líquido (Jurinjak *et al.*, 2016), la velocidad de agitación, el tamaño y características del material vegetal (Hu *et al.*, 2007).

El material vegetal posee características micro estructurales particulares de acuerdo a la parte de la planta de donde se obtienen por ejemplo tallos, hojas, raíces, cascaras, semillas, flores y frutos (Netsanet *et al.*, 2011) y también de su origen por ejemplo el caso de cascaras de naranja (Inoue *et al.*, 2010), semillas de soja (Jokić

operación preparativa en la extracción sólido líquido, donde el material vegetal es seccionado en cortes, tamizados, pulverizados, desgajados y/o pelados (Netsanet *et al.*, 2011). La transferencia de masa también se ve notoriamente afectada por la temperatura debido a los cambios en difusividad y permeabilidad de las barreras de los materiales vegetales de manera general a mayor temperatura mayor transferencia de masa y viceversa (Jurinjak *et al.*, 2016; Lapornik *et al.*, 2005), como limitante se tendrá la estabilidad de las sustancias orgánicas que en diversos casos no sobrepasa los 40°C como es el caso de distintas sustancias antioxidantes (Shasha *et al.*, 2017).

En el presente trabajo se ha modelado el proceso de extracción referido a la temperatura del proceso, el tamaño y la microestructura del material vegetal para entonces simular el efecto a diferentes magnitudes de estos parámetros. Para tales efectos se empleó el modelo matemático de Simpson (Simpson *et al.*, 2017) que es la solución de la segunda ley de Fick por cálculo fraccional aplicado a la difusión anómala. El modelo de Simpson es expresado por la siguiente ecuación:

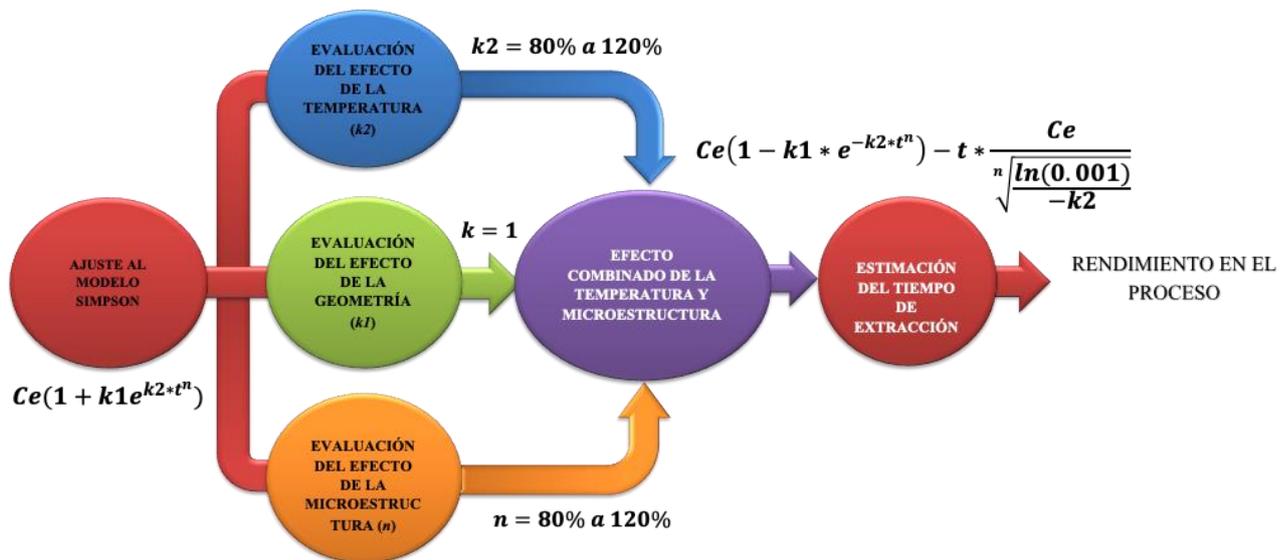


Figura 1. Estrategia de evaluación y simulación del efecto de la microestructura y temperatura en el tiempo de extracción de metabolitos.

et al., 2010) y hojas de té verde (Ziaedini *et al.*, 2010). Las microestructuras de los materiales orgánicos, sus materiales y compartimientos tienen un efecto notable en la velocidad de transferencia de masa de las sustancias de interés de ahí en la velocidad de extracción y subsecuentemente en el tiempo de extracción (Pinelo *et al.*, 2010). Aunque no importa que microestructura sea, durante la extracción la concentración alcanza eventualmente un valor máximo que ya no cambia en función del tiempo y se le conoce como concentración y tiempo de equilibrio, este tiempo suele ser largo y no rentable para el proceso por ello siempre se toman consideraciones para extraer una buena cantidad, pero en un tiempo menor que tenga una mejor relación costo beneficio. Además de la microestructura el tamaño del material orgánico y la remoción de coberturas como la cascara en frutos tiene un efecto positivo en la velocidad de extracción en general debido a que mientras el tamaño sea más pequeño y se eliminen barreras, se aumenta la superficie disponible para la extracción y la transferencia de masa, lo que disminuye el tiempo de extracción, de ahí que la reducción de tamaño sea una

$$C = Ce(1 + k_1 e^{k_2 t^n}) \quad (1)$$

Dónde: C corresponde a la concentración, Ce a la concentración en el equilibrio y t al tiempo, k_1 , k_2 y n , constantes del modelo. La constante n está relacionada con la microestructura del material, k_1 está relacionada el tamaño y geometría de la muestra y k_2 es una constante dependiente de la difusividad y temperatura.

El modelo presentado por Simpson *et al.*, 2013 da la flexibilidad para modelar la extracción de biomateriales que presentan heterogeneidad estructural que resulta en fenómenos de difusión anómala con cambios que ocurren durante el proceso y que impactan en la transferencia de masa. Simpson *et al.*, 2015 demostró que con el modelo de la difusión anómala describe adecuadamente la deshidratación osmótica de manzanas sometidas a un campo eléctrico moderado donde existe electroporación con un comportamiento superdifusivo del secado. Para el caso de la extracción en sistemas que presentan una adecuada agitación, la transferencia de masa se rige principalmente

por la difusión de las sustancias a través del material orgánico (Špela *et al.*, 2013), que tiene como principales parámetros la microestructura del material orgánico, su tamaño y la temperatura. De esta manera en el presente trabajo se han simulado estos parámetros estructurales y de temperatura para tener una mayor comprensión de cómo afectan el proceso global de extracción.

2. Procedimiento

2.1. Estrategia de evaluación y simulación

Se llevo a cabo el ajuste de datos experimentales al modelo de Simpson, a partir del modelo se evaluó el efecto de los factores temperatura (k_2), de la geometría (k_1) y microestructura (n), con los hallazgos generados se estableció el código para simular el efecto combinado de los parámetros temperatura y microestructura en el comportamiento de la extracción sólido líquido, en el caso de la geometría se restringió a una constante. Con la matriz de resultados generados se aplicó la metodología propuesta para determinar el tiempo de extracción mediante el máximo de la curva normalizada y en saber a ello el rendimiento de extracción.

2.2. Ajuste de modelo de Simpson

Se empleó 21,442 valores de tiempo (t) contra concentración (C) de una cinética de extracción compartidos por los autores de cinéticas de extracción de brácteas de alcachofa (Valencia., 2017), para ello se empleó la herramienta Matlab CFTool (Curve Fitting Tool) aplicada al modelo de Simpson:

$$C = Ce(1 + k_1 * e^{k_2 * t^n}) \quad (2)$$

Los valores de inicialización empleados en el ajuste fueron para $Ce = 1$, $k_1 = 1$, $k_2 = 0.001$ y $n = 1$.

2.3. Análisis del efecto de k_1

Para poder estudiar el efecto de cada parámetro se propuso emplear el valor de los parámetros iniciales de Ce , k_1 , k_2 y n obtenidos del ajuste y mover la magnitud de uno de ellos en un porcentaje que pudiera hacer notoria su efecto en el comportamiento de extracción. Se propuso evaluar k_1 desde el 80% de su valor hasta 120% (esto es reducirle y aumentarle un 20%), para lo cual se creó la función SimpsonM de la siguiente manera:

```
function y=simpsonM(k1, k2,n,Ce,t)
y=Ce*(1-k1*exp(-k2*t.^n));
end
```

Para evaluar los valores de k_1 se propuso que estos fueran en incrementos de 5% desde el 80% al 120% para ello se emplearon los siguientes comandos. Las curvas de extracción obtenidas fueron graficadas en dos y tres dimensiones con el objeto de hacer notorios los cambios de comportamiento.

2.3. Análisis del efecto de k_2

Para analizar el efecto de k_2 se empleó la misma metodología empleada en k_1 y se fijando el valor de k_1 a una magnitud de "1" dado que como se describe en los resultados esta es la única condición que satisface la condición inicial donde a tiempo cero la concentración debe ser cero.

2.4. Análisis del efecto de "n"

Para analizar el efecto de "n" se empleó la misma metodología empleada para k_2 .

2.5. Determinación del tiempo de extracción por cambio de línea base.

Para calcular el tiempo de extracción se planteó una metodología donde el resultado depende del comportamiento de extracción con el objeto de proporcionar una mejor relación costo beneficio. En la bibliografía en ocasiones se refieren al tiempo de extracción como aquel en que se alcanza el 80%, 90%, 95% u otro valor de la concentración de equilibrio y no se considera el comportamiento que presenta la extracción. La metodología propuesta consiste en cambiar la línea base de la curva de extracción a la recta obtenida entre el origen (tiempo cero, concentración cero) y la concentración de equilibrio. En la figura 2 se muestra la curva cinética de extracción en color azul y la recta para normalizar la curva en color rojo.

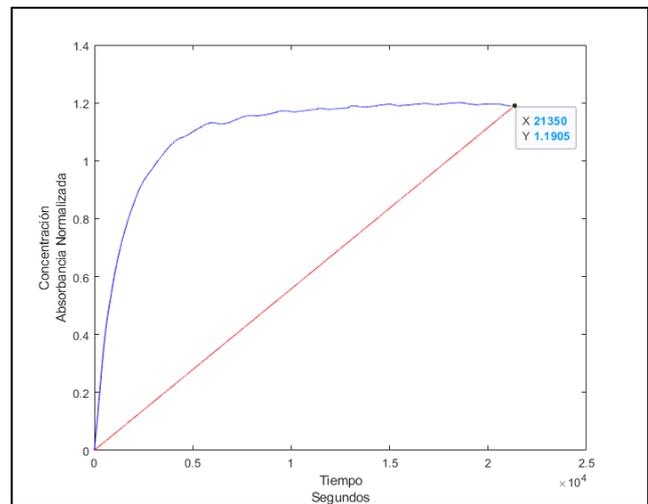


Figura 2. Datos experimentales de extracción y línea recta entre el punto de origen y el equilibrio.

Graficando la curva a la línea base roja resultó una nueva curva con un máximo, tal y como se ilustra en la siguiente figura 3.

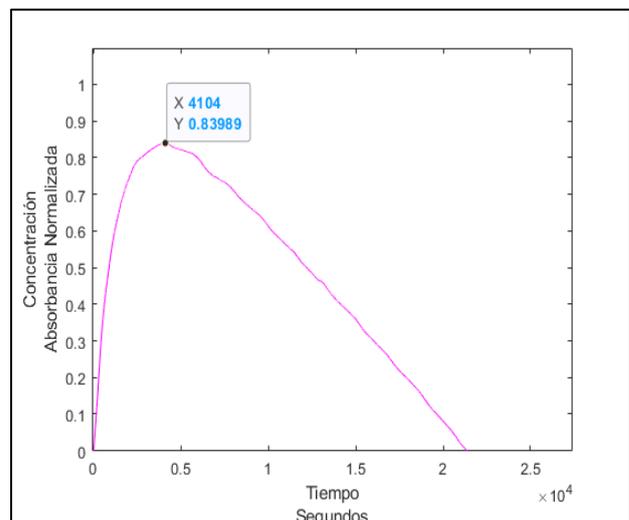


Figura 3. Curva normalizada de la gráfica de extracción.

Se definió como tiempo de extracción aquel donde se alcanza el máximo de la curva normalizada y que es precisamente donde ocurre la disminución de la velocidad de extracción. Para calcular de manera numérica el tiempo en que se alcanza el máximo se elaboró una función en Matlab a través de una aproximación, que facilitara y no indetermina el cálculo, con el siguiente análisis:

$$Cy = Ce(1 - k1 * e^{-k2*t^n}) \quad (3)$$

En la segunda sección de resultados donde se estudia $k1$, se concluye porque este debería tener necesariamente un valor de 1, luego la expresión queda:

$$Cy = Ce(1 - e^{-k2*t^n}) \quad (4)$$

Si de esta función evaluamos el tiempo t al que se alcanza el tiempo final en el equilibrio luego $t=tf$, en tanto que $Cy=Ce$, si sustituimos esto en la ecuación resulta:

$$Ce = Ce(1 - e^{-k2*t_f^n}) \quad (5)$$

$$\frac{Ce}{Ce} = 1 = 1 - e^{-k2*t_f^n} \quad (6)$$

$$0 = 1 - 1 = -e^{-k2*t_f^n} \quad (7)$$

Entonces la expresión se indetermina, por lo que se propuso un valor de 99.9% el valor del equilibrio esto es $0.999Ce$, resultando en:

$$0.999Ce = Ce(1 - e^{-k2*t_f^n}) \quad (8)$$

$$\frac{0.999Ce}{Ce} = 1 - e^{-k2*t_f^n} \quad (9)$$

$$0.999 - 1 = -e^{-k2*t_f^n} \quad (10)$$

$$0.001 = e^{-k2*t_f^n} \quad (11)$$

$$\ln(0.001) = -k2 * t_f^n \quad (12)$$

$$t_f = \sqrt[n]{\frac{\ln(0.001)}{-k2}} \quad (13)$$

Conociendo t_f , entonces se establece la ecuación de la recta de normalización, conociendo que en el origen el tiempo y la concentración son cero, resulta:

$$m = \frac{Y2-Y1}{T2-T1} = \frac{Ce}{n \sqrt[n]{\frac{\ln(0.001)}{-k2}}} \quad (14)$$

$$y = t * \frac{Ce}{n \sqrt[n]{\frac{\ln(0.001)}{-k2}}} \quad (15)$$

Por tanto, para una recta modelada de extracción (ecuación 3) si se le resta la línea base (ecuación 15) quedaría como:

$$Cy_{base} = Ce(1 - k1 * e^{-k2*t^n}) - t * \frac{Ce}{n \sqrt[n]{\frac{\ln(0.001)}{-k2}}} \quad (16)$$

Para calcular el valor por método numérico se empleó la siguiente función de Matlab denominada `simpsonMNTEXT`, como sigue:

```
function y=simpsonMNTEXT(Ce,k,n)
Tf=((log(1-0.999)/-k)^(1/n));
t=0:1:Tf;
y=Ce*(1-exp(-k*t.^n))- (0.999*Ce/((log(1-0.999)/-k)^(1/n)))*t;
[MaX,IDe]=max(y);
y=t(IDe);
end
```

2.6. Efecto combinado de los parámetros n y $k2$ sobre el tiempo de extracción.

Con los métodos numéricos desarrollados se simuló el efecto de los parámetros combinados de los parámetros k y n , para ello se

planteó evaluar del 80% al 120% con incrementos de 1% generando una matriz de 21 datos de k por 21 datos de n , esto es $21 \times 21 = 441$ combinaciones para determinar el tiempo de extracción.

3. Resultados

3.1. Ajuste al modelo de Simpson

El ajuste del modelo de Simpson a los datos experimentales presento una R^2 de 0.99875 lo que implicó un buen ajuste del modelo a los datos experimentales que se muestra en la figura 4 con la recta en color azul para los datos experimentales y negro para el ajuste al modelo.

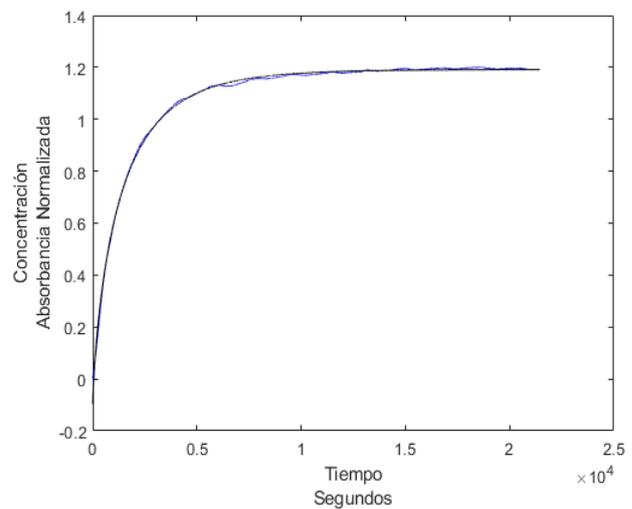


Figura 4. Ajuste de los datos experimentales al modelo de Simpson.

Los valores obtenidos para los coeficientes del modelo de Simpson fueron los siguientes:

$$\begin{aligned} Ce &= 1.192 \quad (1.192, 1.192) \\ k1 &= -1.081 \quad (-1.082, -1.079) \\ k2 &= 0.003948 \quad (0.003905, 0.00399) \\ n &= 0.7642 \quad (0.7629, 0.7655) \\ R^2 &= 0.99875 \end{aligned}$$

3.2 Análisis del efecto del tamaño y la geometría ($k1$)

Mediante la evaluación del parámetro $k1$ con valores entre el 80% a 120% se evaluó el efecto del tamaño y la geometría de acuerdo a lo descrito en la metodología. Para una experimentación se esperaría que para un material con tamaño y geometría establecidos por ejemplo cubos, esferas, cilindros etc., esto llevara a un ajuste con distintos valores de $k1$.

En la gráfica de la figura 5 se muestran las evaluaciones de $k1$, donde se observa, que con valores de $k1$ mayores a 1, los valores de concentración en el tiempo cero son negativos, situación que carece de sentido físico ya que en tiempo cero la concentración es cero, en tanto se observa un ligero cambio en el comportamiento

de las diferentes curvas de colores donde al final todas convergen en el equilibrio, estos cambios llevarían a modificar también ligeramente el tiempo de extracción.

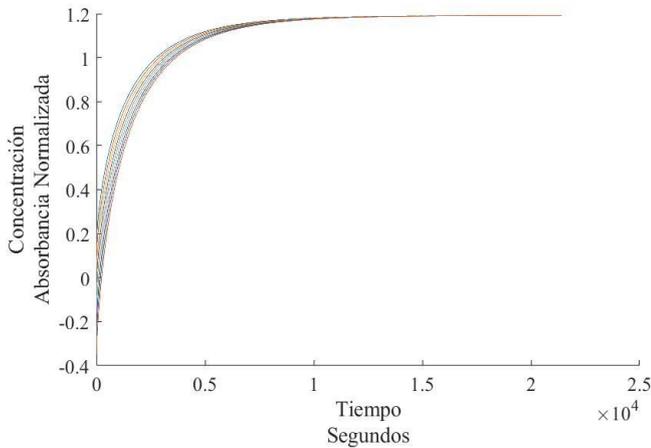


Figura 5. Curvas de la evaluación del efecto del parámetro k_1 en la extracción.

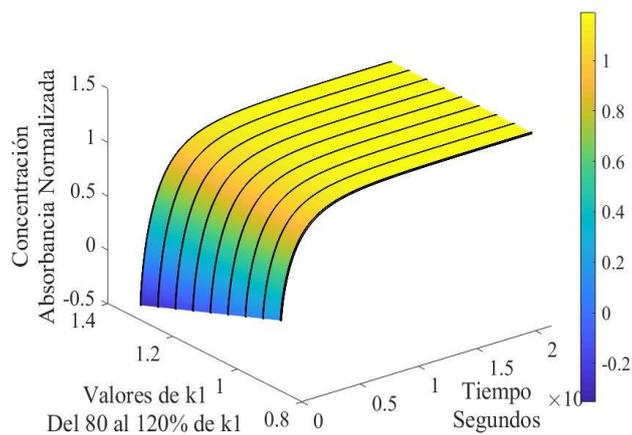


Figura 6. Superficie de la evaluación del efecto del parámetro k_1 en la extracción.

En la gráfica de la figura 6 se muestra la superficie obtenida con las curvas proyectadas a diferentes valores de k_1 , donde se aprecia que los colores de la superficie en el tiempo cero cambia de verde (mayor a cero) a rojo (menor a cero), y en todos los casos se llega al equilibrio (superficie naranja). De esta manera el valor que satisface la condición inicial es cuando k_1 es igual a 1, esto sugiere que el parámetro k_1 podría proponerse como una expresión y no una constante que permita un mejor ajuste y satisfaga la condición inicial.

3.2. Análisis del efecto de la difusividad y la temperatura (k_2)

Cuando la temperatura se aumenta en un proceso de extracción la movilidad molecular aumenta causando un aumento difusividad que se refleja con una mayor transferencia de masa y para extracciones de metabolitos como se ha mencionado anteriormente estará limitado a la estabilidad de las sustancias químicas. En las figuras 7 y 8 se observa el efecto que tiene

cambios en la temperatura de extracción, en este caso a través de la evaluación del parámetro k_2 . Se observa que para todos los valores de k_2 las curvas iniciaron en concentración cero satisfaciendo la condición inicial y se alcanza la concentración de equilibrio que son dos condiciones experimentales bien definidas del fenómeno de extracción. En general se observa que si k_2 aumenta la curva adquiere un comportamiento más pronunciado con mayor pendiente que implica en lo experimental que se alcanza una concentración mayor en menor tiempo lo que corresponde a un incremento en la transferencia de masa con mayor difusividad que subsecuentemente disminuye el tiempo de extracción. En comparación con k_1 se observa gráficamente que el parámetro k_2 tiene un mayor efecto en el comportamiento de la extracción.

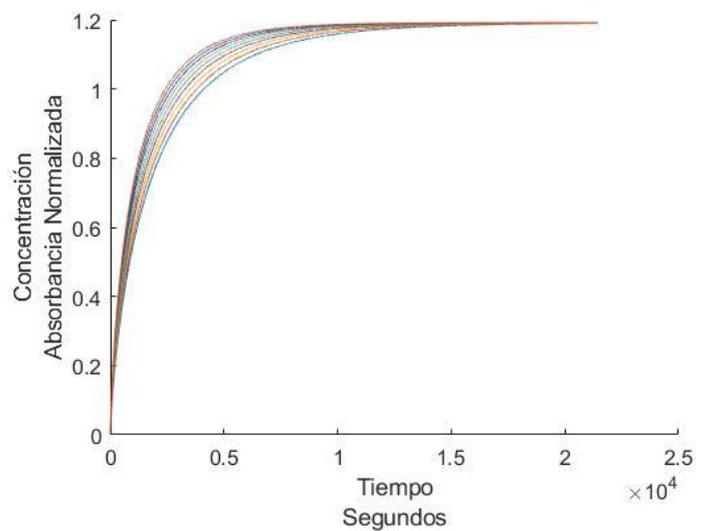


Figura 7. Curvas de la evaluación del efecto del parámetro k_2 en la extracción.

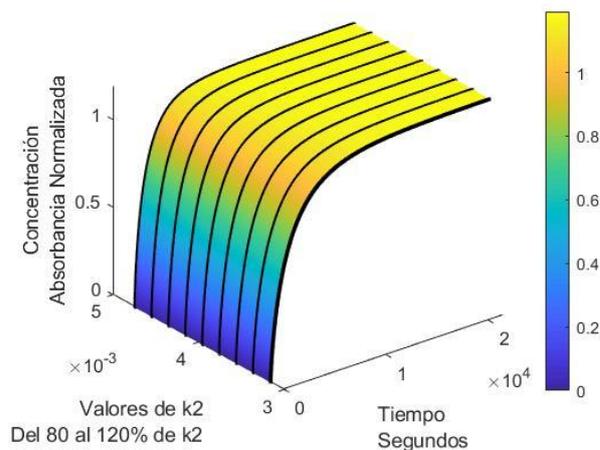


Figura 8. Superficie de la evaluación del efecto del parámetro k_2 en la extracción.

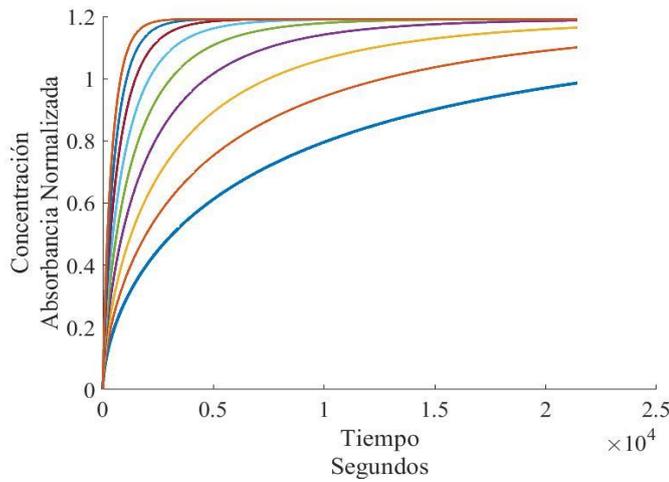


Figura 9. Curvas de la evaluación del efecto del parámetro “n” en la extracción.

3.3. Análisis del efecto de la microestructura (n)

En el proceso de extracción de metabolitos la microestructura tiene un papel importante ya que implícita en ella están las barreras orgánicas donde están contenidos los metabolitos y que facilitan o limitan la extracción, pensemos en una semilla entera, una hoja y un tallo en cortes cilíndricos, la superficie con las que cuenta cada material tiene barreras de distinta naturaleza e incluso las internas propiciando cambios en los resultados del comportamiento de la extracción (Aguilera., 2005; E. Vittadini., 2007; Kehinde et al., 2020).

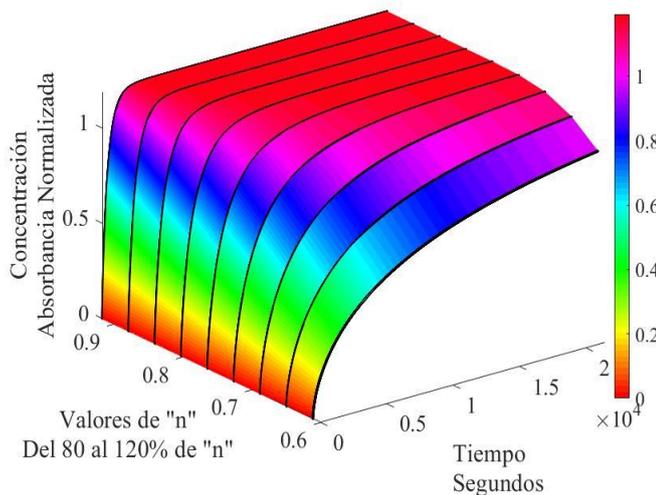


Figura 10. Superficie de la evaluación del efecto del parámetro n en la extracción.

Para el modelo de Simpson el parámetro que representa el efecto de la microestructura es n, en la figura 9 y 10 se muestra el efecto que ha presentado la evaluación de este parámetro con una magnitud entre el 80% al 120% de su valor inicial. Se observa claramente un efecto notable en el comportamiento de extracción y a simple vista se distingue que causará un cambio en el tiempo

de extracción, lo mismo se observa en la superficie de respuesta tomando en consideración la barra de colores de referencia. Se observa que un cambio en el parámetro n no afecta la condición inicial que es cero al tiempo cero, en tanto, si el valor de n esta entre el 80% al 90% del valor inicial se observa que no alcanza el equilibrio.

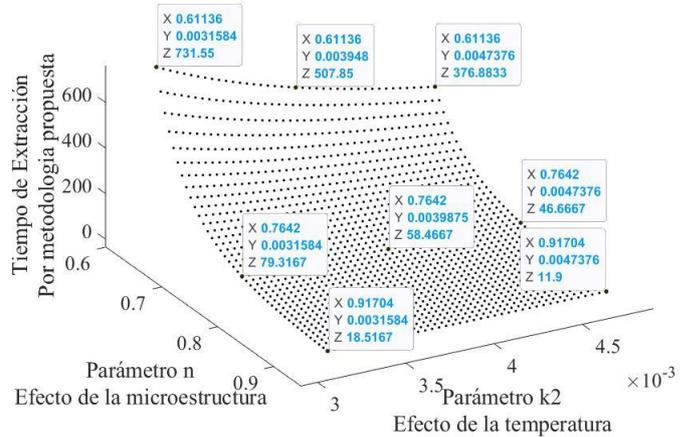


Figura 11. Resultados de la simulación del efecto de los parámetros n y k2 en el tiempo de extracción

3.4. Resultados de la simulación del efecto de los parámetros n y k2 en el tiempo de extracción.

En las evaluaciones previas se observó que la temperatura y la microestructura tienen el mayor efecto en el comportamiento de extracción y se comentó que de ahí deben observarse cambios en los tiempos de extracción. El tiempo de extracción se calculó con la metodología propuesta en el presente trabajo.

En la figura 11 se muestran los tiempos de extracción calculados a partir de la simulación del efecto combinado de los parámetros n (microestructura) y k2 (temperatura), para facilitar el análisis se ha ubicado el punto central donde sus valores corresponden a los iniciales esto es el 100% de n y el 100% de k2, con un tiempo de extracción ubicado en Z = 59.23 minutos.

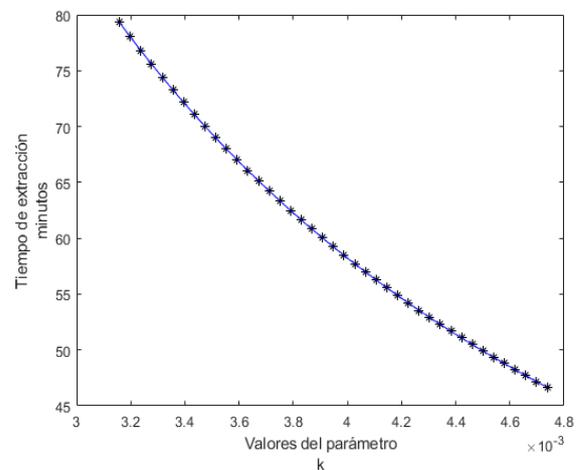


Figura 12. Tiempo de extracción en función del parámetro k2

Como anteriormente se ha descrito que el factor n tiene un mayor efecto que el factor k_2 , en el efecto combinado, esto también fue observado en la figura 11, en donde se ilustra una etiqueta central a la superficie con un valor z que corresponde a un tiempo de extracción de 59.23 minutos para los valores de k_2 y n del modelo original. Tomando constante el valor de k_2 con una magnitud de 0.03949 para los valores de n al 80% y 120% se tuvieron 507.8 minutos y 12.5 minutos respectivamente. Esto fue un cambio de 495.3 minutos cuando n cambio del 80% al 120%.

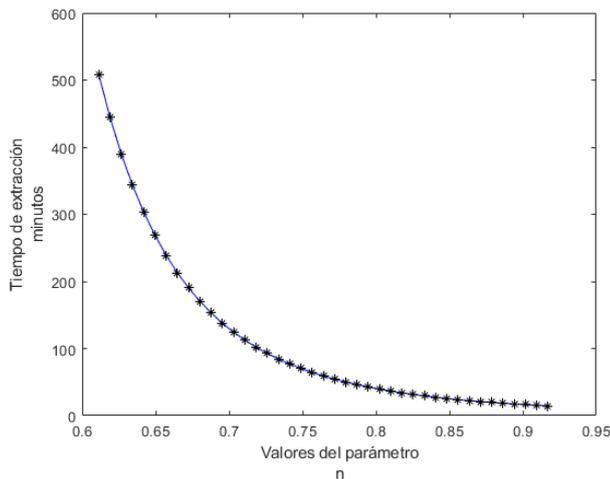


Figura 13. Tiempo de extracción en función del parámetro n

En comparación con n constante a un valor de 0.7642 con valores de k_2 que varían del 80% al 120% se tienen cambios en el tiempo de extracción que son 79.3 y 46.6 respectivamente. Por tanto, el factor de cambios en el tiempo de extracción cuando el parámetro n se varió del 80% a 120% fue de 40.5, mientras que en el parámetro k_2 fue de 1.7 veces. Estos resultados de cambio de tiempo de extracción se muestran para el parámetro k_2 en la figura 12, se aprecia que el tiempo de extracción va disminuyendo en un comportamiento que apenas sale de la linealidad. En el caso del parámetro n el cambio en el tiempo de extracción es notorio y tiene un comportamiento potencial (figura 13).

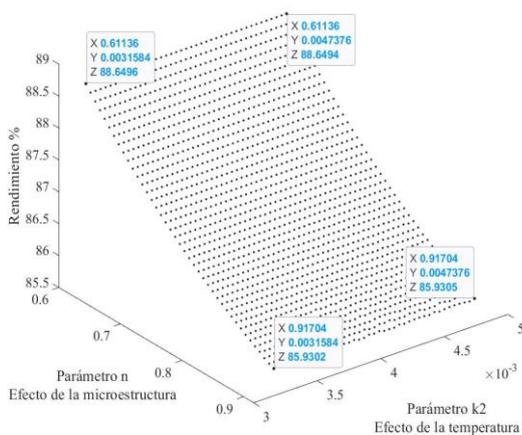


Figura 14. Rendimiento alcanzado en el tiempo de extracción.

El tiempo de extracción fue determinado para los modelos simulados del efecto combinado de la microestructura y la temperatura de proceso, los resultados de rendimiento se muestran en la figura 14, donde se observa que el rendimiento va de 85.93% en el tiempo de extracción más corto, con respecto a 88.64 % en el tiempo de extracción más largo, donde el parámetro que mostro mayor efecto sobre el rendimiento fue la microestructura estos resultados concuerdan con lo observado en extracciones solido liquido de por ejemplo semillas con respecto a frutos donde entre materiales que tienen diferente microestructura existe un cambio considerable entre comportamientos de extracción y en cambio para un mismo material los cambios de temperatura mejoran los rendimientos siempre que los componente no son termolábiles pero mantienen el comportamiento característico de su cinética de extracción (Nancy *et al.*, 2020; Kannan *et al.*, 2020). Los rendimientos obtenidos para todas las combinaciones empleadas son cercanos a las recomendaciones empíricas de distintos autores que reportan el tiempo de extracción usualmente entre el 80-95% (Hip *et al.*, 2012; Mohammad *et al.*, 2021). El hecho de que para un tiempo de extracción corto se calcule un rendimiento menor no afecta el rendimiento global que se puede alcanzar ya que si bien el tiempo de extracción menor fue 11.9 minutos con un rendimiento de 85.93% y el más largo fue de 735.1 minutos con un rendimiento de 88.64. Por ejemplo, en el tiempo que ocurre el proceso de 735.1 minutos puede ocurrir varias veces el de 11.9 minutos ya considerando incluso el vaciado de la extracción, la limpieza de equipo y puesta en marcha de siguiente proceso sumando los rendimientos de este corto proceso y sobrepasando la productividad del proceso largo que tiene un rendimiento mayor.

4. Conclusiones

El modelo de Simpson de la segunda ley de Fick para la difusión anómala mostro un excelente ajuste a los datos experimentales de extracción. De la evaluación de los parámetros del modelo de Simpson ajustado a los datos experimentales se encontró que k_1 referido como el parámetro del modelo que describe la geometría del material sólido, debe tener un valor de 1 para satisfacer las condiciones experimentales iniciales donde la concentración es cero en tiempo cero, sugiriendo que el modelo de Simpson debería tomar esta consideración para cinéticas de extracción. El modelo de Simpson con $k = 1$ fue adecuado para evaluar el efecto de la temperatura (k_2) y microestructura del material vegetal (n). De los parámetros, la microestructura mostro tener el mayor efecto sobre el comportamiento, el rendimiento y tiempo de extracción, mientras la temperatura mostro un efecto marcado pero menor al de la microestructura. El método matemático y numérico empleado para determinar el tiempo de extracción mostro depender del comportamiento de la extracción descrita por los parámetros evaluados y de esa manera tener una magnitud variable que sugiere ser más representativa para cada proceso y encontrar una mejor relación costo beneficio que propuestas empíricas, en donde en general mientras aumentan los valores de k_2 y n disminuye el tiempo de extracción traducido como una mayor temperatura y facilidad a la transferencia de masa de la microestructura del material. En tanto, los rendimientos alcanzados en el tiempo de extracción fueron comparables a los reportados por otros autores y que son empleados en la industria.

Referencias

- Aguilera, J. M. (2005). Why food microstructure? *Journal of Food Engineering*, 67(ISSN 0260-8774), 3-11. DOI:10.1016/j.jfoodeng.2004.05.050
- Cerón-Montes, G. S.-M.-F.-C.-M. (2015). Preliminary purification of anthocyanins from blue corn by adsorption and electrophoresis. *Revista mexicana de ingeniería química*, 14(1), 99-108. http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1665-27382015000100009&lng=es&tlng=en.
- E. Vittadini, Y. V. (2007). Effects of water distribution and transport on food microstructure. In *Woodhead Publishing Series in Food Science, Technology and Nutrition, Understanding and Controlling the Microstructure of Complex Foods*, Woodhead Publishing (ISBN 9781845691516), 89-112. DOI:10.1533/9781845693671.1.89.
- Hip Seng Yim, F. Y. (2012). Optimization of extraction time and temperature for antioxidant activity of edible wild mushroom, *Pleurotus porrigens*, *Food and Bioproducts Processing*. 90(ISSN 0960-3085), 235-242. DOI:10.1016/j.fbp.2011.04.001.
- Hu, Q. P. ((2007)). Effects of supercritical carbon dioxide extraction conditions on yields and antioxidant activity of *Chlorella pyrenoidosa* extracts. (J. o. Engineering, Ed.) DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2006.06.026
- Inoue, T. T. (2010). Isolation of hesperidin from peels of thinned Citrus unshiu fruits by microwave-assisted extraction. *Food Chem.*, 123 (2), 542–547. DOI: 10.1016/j.foodchem.2010.04.051
- Jurinjak A., B. M. (2016). Kinetics and thermodynamics of the solid-liquid extraction process of total polyphenols, antioxidants and extraction yield from Asteraceae plants. *Journal Industrial Crops and Products*, 91, 205–214. DOI: 10.1016/j.indcrop.2016.07.015
- Kannan Mohan, T. M. (2020). Trends in the extraction, purification, characterisation and biological activities of polysaccharides from tropical and sub-tropical fruits – A comprehensive review. *Carbohydrate Polymers*, 238 (ISSN 0144-8617), 116-185. DOI:10.1016/j.carbpol.2020.116185.
- Kehinde Peter Alabi, Z. Z.-W. (2020). Transport phenomena and their effect on microstructure of frozen fruits and vegetables. *Trends in Food Science & Technology*, 101(ISSN 0924-2244), 63-72. DOI:10.1016/j.tifs.2020.04.016.
- Lapornik, B. P. (2005). Comparison of extracts prepared from plant by-products using different solvents and extraction time. *Journal of Food Engineering*, 71, 214–222. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2004.10.036
- Mohammad Kazem Rofouei, S. M.-P. (2021). Optimization of chlorogenic acid extraction from Elm tree, *Ulmus minor* Mill., fruits, using response surface methodology. *Separation and Purification Technology*, 256(117773), ISSN 1383-5866. DOI:10.1016/j.seppur.2020.117773.
- Nancy Cordoba, M. F.-A. (2020). Coffee extraction: A review of parameters and their influence on the physicochemical characteristics and flavour of coffee brews. *Trends in Food Science & Technology*, 96(ISSN 0924-2244), Pages 45-60. DOI:10.1016/j.tifs.2019.12.004.
- Valencia Arredondo J. A., H.-B. G.-M.-M. (2020). Enhanced process integration for the extraction, concentration and purification of diacylated cyanidin from red cabbage. *Separation and Purification Technology*, Volume 238(ISSN 1383-5866,). DOI: 10.1016/j.seppur.2019.116492.
- Valencia Pérez, N. S. (2017). Extracción de componentes bioactivos de residuos de alcachofa. Tesis, Unidad Profesional Interdisciplinaria de Biotecnología, Laboratorio de alimentos, CDMX. https://tesis.ipn.mx/bitstream/handle/123456789/27126/ValenciaPérez_Naella_Sandivel.pdf?sequence=1&isAllowed=y
- Pinelo M., S. J. (2006). Mass transfer during continuous solid–liquid extraction of antioxidants from grape by products. *Journal Food Eng.*, 77, 57–63. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2005.06.021
- Špela Stangler Herodež, M. H. (2003). Solvent extraction study of antioxidants from Balm (*Melissa officinalis* L.) leaves. *Food Chemistry*, 80(2), 275-282. DOI: 10.1016/S0308-8146(02)00382-5
- Shasha Yu, Y. W. (2017). Structure, thermal stability, antioxidant activity and DFT studies of triphenols and related phenols. *Inorganica Chimica Acta*, 468(ISSN 0020-1693), Pages 159-170,. DOI:10.1016/j.ica.2017.07.022.
- Simpson R., R. C. (2017). Trend in Food Science and Technology. Understanding the success of Page's model and related empirical equations in fitting experimental data of diffusion phenomena in food matrices. DOI: 10.1016/j.tifs.2017.01.003
- Simpson, R. J. (2013). Fractional calculus as a mathematical tool to improve the modeling of mass transfer phenomena in food processing. *Food Engineering Reviews*, 5, 45–55. DOI:10.1007/s12393-012-9059-7
- Simpson, R. R. (2015). Diffusion mechanism during the osmotic dehydration of Granny Smith apples subjected to a moderate electric field. *Journal of Food Engineering*, 166, 204–211. DOI: 10.1016/j.jfoodeng.2015.05.027
- Versteeg, N. S. (2011). Texture and Microstructure of Fruits and Vegetables. In *Practical Food and Research*, Chapter 4 (part I) , 6-20. ISBN: 978-1-61728-506-6.
- Ziaedini A., J. A. (2010). Extraction of antioxidants and caffeine from green tea (*Camelia sinensis*) leaves: kinetics and modeling. *Journal food science and technology international.*, 16(6), 0505-6. DOI: 10.1177/1082013210367567