



Desarrollo de una herramienta computacional para la predicción de los cambios en las propiedades fisicoquímicas de productos hortofrutícolas durante su almacenamiento

Development of a Computational Tool for Predicting Changes in the Physicochemical Properties of Horticultural Products during Storage

Alberto Paz Gómez¹, Rosa Rodríguez¹ y Nancy Confortti¹

Resumen

Durante el almacenamiento de productos hortofrutícolas ocurre un proceso de degradación que puede generar compuestos indeseables y afectar textura, sabor y color. El objetivo de este trabajo es desarrollar una herramienta computacional que permita predecir dicha degradación a partir de los cambios fisicoquímicos que ocurren durante el almacenamiento. Para ello, se diseñó una base de datos asociada a los productos evaluados, con el fin de mostrar resultados de forma rápida y confiable. De esta manera, la herramienta funciona como apoyo educativo en prácticas de laboratorios de química de alimentos. Los productos modelados se seleccionaron mediante el método AHP, resultando naranja, manzana, fresa y zanahoria. La herramienta permite evaluar, bajo distintas condiciones de tiempo y temperatura, la predicción de cambios en color, pH, vitamina C, antocianinas, furfural e hidroximetil furfural (HMF). Asimismo, reporta parámetros como concentración final, tiempo de vida media, constante cinética, orden de reacción y la gráfica correspondiente. En conclusión, la herramienta computacional desarrollada constituye un recurso útil para analizar la degradación de productos hortofrutícolas y, al mismo tiempo, un modelo de soporte educativo aplicable a laboratorios de química de alimentos.

Palabras clave: cinética, degradación, simulación, alimentos, nutrientes.

Abstract

During the storage of horticultural products, degradation processes can occur, generating undesirable compounds and affecting texture, flavor, and color. The objective of this work is to develop a computational tool that allows the prediction of such degradation based on the physicochemical changes that occur during storage. For this purpose, a database associated with the evaluated products was designed to display results quickly and reliably. In this way, the tool functions as educational support for food chemistry laboratory practices. The modeled products were selected using the AHP method, resulting in orange, apple, strawberry, and carrot. The tool enables the evaluation, under different time and temperature conditions, of predicted changes in color, pH, vitamin C, anthocyanins, furfural, and hydroxymethylfurfural (HMF). It also reports parameters such as final concentration, half-life, kinetic constant, reaction order, and the corresponding graph. In conclusion, the developed computational tool constitutes a useful resource for analyzing the degradation of horticultural products and simultaneously serves as an educational support model applicable to food chemistry laboratories.

Keywords : kinetics, degradation, simulation, food, nutrients.

CÓMO CITAR:

Paz Gómez, A., Rodríguez, R., y Confortti, N. (2025, octubre-diciembre). Desarrollo de una herramienta computacional para la predicción de los cambios en las propiedades fisicoquímicas de productos hortofrutícolas durante su almacenamiento. *Educación Química*, 36(4). <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2025.4.90400>

¹ Departamento de Química, Universidad Metropolitana, Venezuela.

Introducción

La aplicación de los modelos cinéticos de reacción en la química de los alimentos ha permitido a la industria hortofrutícola avanzar en la predicción del comportamiento y estabilidad de sus productos. La cinética desempeña un papel importante en la garantía de la seguridad de los alimentos hortofrutícolas, ya que, mediante la predicción de ciertas variables de deterioro, se puede conservar su valor nutritivo a través del monitoreo, control o variación de parámetros extrínsecos (temperatura, humedad, concentración de O_2) durante el almacenamiento, disminuyendo la degradación de nutrientes importantes como vitaminas, proteínas de alto valor biológico (AVB), lípidos esenciales, entre otros.

Adicionalmente, por medio de la cinética es posible conocer el comportamiento de dichos productos en el tiempo, a nivel fisicoquímico, microbiológico y sensorial.

En consecuencia, el objetivo del presente estudio es generar una herramienta computacional que facilite y agilice los cálculos cinéticos, y permita la predicción de los cambios que ocurren en las propiedades fisicoquímicas de ciertos productos hortofrutícolas.

Los requerimientos principales para el desarrollo de dicha herramienta son los parámetros cinéticos, tales como las constantes cinéticas o la energía de activación, asociados a los cambios de propiedades fisicoquímicas que pueden sufrir los productos hortofrutícolas en el tiempo (Corradini, 2018; Nuñez et al., 2018). Entre ellas se encuentran: el color, la degradación de vitaminas, antioxidantes y pigmentos, así como la aparición de compuestos de oxidación (Zhang et al., 2021; van Boekel, 2008). Para ello se aplican modelos cinéticos de reacción de primer orden, segundo orden y orden cero, reportados por investigadores bajo distintas condiciones de presentación y almacenamiento. Estos modelos ayudan a entender, estimar y pronosticar el comportamiento de los alimentos, con el fin de controlar, prevenir y establecer las mejores condiciones de almacenamiento, además de mejorar la predicción del tiempo óptimo de vida útil del alimento (Scheviak, 2020).

A su vez, esta herramienta aportará información de gran utilidad para la docencia, de modo que los estudiantes puedan comprender el efecto de diversas variables en el almacenamiento de los productos hortofrutícolas. Esto implica que, en el aula, de forma dinámica, se puede visualizar el efecto de la temperatura en la constante cinética de reacción (k), así como la variación en la concentración de compuestos importantes en alimentos, como ácido ascórbico, ácido cítrico, antocianinas, compuestos antioxidantes, furfural e hidroximetilfurfural (HMF) durante el almacenamiento, y su relación con las propiedades intrínsecas del alimento (pH, actividad de agua, contenido de sólidos solubles, potencial redox).

Adicionalmente, permitiría ejemplificar la aplicación de la cinética química en la industria alimentaria, tanto para el desarrollo de productos como para establecer tiempos de vida útil.

El uso de una herramienta computacional en el estudio de la degradación de alimentos hortofrutícolas durante el almacenamiento puede ser de gran valor educativo. A continuación, se presenta la contextualización: el uso de simuladores puede representar beneficios tales como el acceso a conceptos complejos y abstractos (Piñeres, 2022), la experimentación segura y económica (Hurtado Rangel et al., 2018) y el fomento del aprendizaje activo (Paredes-Navia y Molina-Caballero, 2020).

Esta herramienta podría ser un entorno virtual donde los estudiantes puedan seleccionar un tipo de alimento hortofrutícola, definir condiciones de almacenamiento (temperatura, humedad relativa, tiempo de almacenamiento), visualizar algunos parámetros fisicoquímicos e integrar una base de datos con información asociada, por ejemplo, a velocidades de reacción relacionadas con procesos de degradación.

Asimismo, contribuiría al desempeño de los estudiantes de diversas maneras: permitiría observar la aplicación práctica de conceptos químicos fundamentales (cinética, termodinámica, bioquímica de alimentos) en un contexto real, como la conservación de alimentos (Zambrano y Giler, 2021). Podrían relacionar la degradación de polímeros (celulosa, pectinas) con la pérdida de firmeza, o la oxidación de compuestos fenólicos con el pardeamiento. Al abordar un problema tan tangible como el desperdicio y la conservación de alimentos, la herramienta resaltaría la relevancia de la química en la solución de desafíos sociales y económicos. Finalmente, antes de realizar experimentos reales de evaluación de calidad de alimentos, los estudiantes podrían usar la simulación previa para familiarizarse con los parámetros a medir.

Material es y métodos

Selección de los productos hortofrutícolas: metodologías de decisión multicriterio

Esta fase de la investigación se dividió en dos etapas principales: la creación de una matriz de decisión y la aplicación del proceso analítico jerárquico o método AHP (por sus siglas en inglés).

Matriz de Decisión

En esta etapa se describe la primera metodología multicriterio utilizada, la cual se desarrolló según la propuesta metodológica de la Figura 1.

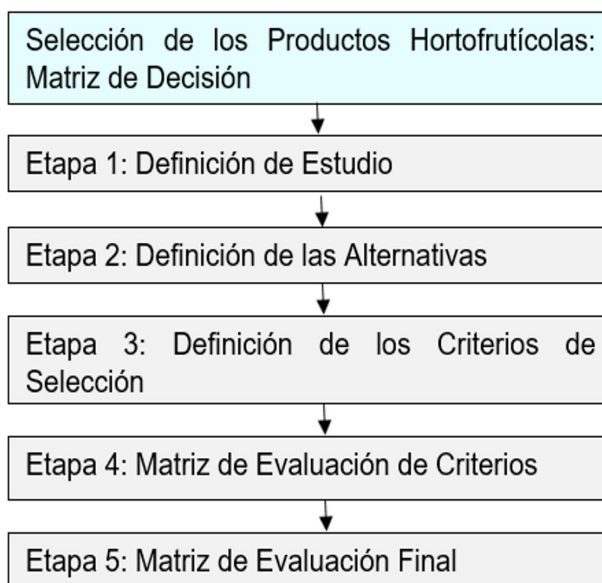


FIGURA 1. Esquema de las etapas realizadas para seleccionar los productos hortofrutícolas mediante matriz de decisión.

Definición de Estudio, alternativas y criterios de selección

La meta planteada fue obtener el orden de importancia entre las alternativas para disminuir su cantidad. Las alternativas consideradas fueron los productos hortofrutícolas encontrados durante la revisión de la bibliografía, que cumplieron con los siguientes requisitos previamente establecidos: productos de consumo y producción en el país (Venezuela), disponibilidad de datos cinéticos para diferentes presentaciones del producto (sin procesar o crudo, jugo, deshidratados), disponibilidad de artículos científicos asociados al producto y cantidad de propiedades fisicoquímicas estudiadas por producto.

Matriz de Evaluación de Criterios

En esta etapa se hace una evaluación del peso relativo de los criterios de selección. Obtenida la ponderación de los criterios, se evalúa cada alternativa en función de cada criterio en una escala lineal del 1 al 10, donde el valor asignado representa el grado de cumplimiento de la alternativa para el criterio, siendo 10 el valor máximo posible.

Metodología de Análisis Jerárquico (AHP)

En esta etapa se desarrolló la segunda metodología multicriterio aplicada, la cual se llevó a cabo en distintas fases. Se estableció como meta la jerarquización entre las alternativas de productos hortofrutícolas con la finalidad de decidir cuáles son más factibles para modelar a través de la herramienta computacional.

Siguiendo la metodología propuesta por Saaty (1987), un grupo de expertos se encargó de realizar la jerarquización de los criterios de selección y de las alternativas. La cantidad de expertos utilizada fue de nueve (9), quienes cumplían las siguientes características para ser seleccionados como evaluadores del método AHP: profesionales en el área de ingeniería química o licenciatura en química, con posgrado en alimentos (maestría y/o doctorado), y que se desempeñaban en diferentes campos laborales asociados a la docencia, investigación o trabajo en empresa (industrial).

Los criterios utilizados para que los expertos evaluaran las alternativas a través de la comparación pareada, previa aprobación por parte de los mismos, fueron: disponibilidad de referencias bibliográficas (C1), presentación y condiciones de almacenamiento (C2), variabilidad de las propiedades fisicoquímicas (C3) y disponibilidad del producto en Venezuela (C4).

El fundamento de este proceso permite asignar valores numéricos a las preferencias señaladas por las personas involucradas, entregando una síntesis de las mismas mediante la agregación de esos juicios parciales (Irreño, 2018; Mortara et al., 2021). Las alternativas seleccionadas para ser evaluadas mediante este método fueron los cinco productos con mejores puntuaciones obtenidas mediante la matriz de decisión.

Jerarquización de las Alternativas por parte de los expertos

En esta etapa, también denominada matriz de evaluación final, basada en la Figura 1, los expertos seleccionados establecieron las prioridades para las alternativas mediante una encuesta en la que evaluaron en combinaciones pareadas cuál alternativa era mejor para cada uno de los criterios.

Luego de realizar la encuesta, se procedió a registrar cada una de las respuestas de los expertos mediante el uso del software *Expert Choice 2000*, en el cual se realizaron los cálculos matriciales y se verificó que las inconsistencias de cada matriz estuvieran dentro del rango establecido por Saaty (1987), es decir, menores a 0,10.

Análisis de Sensibilidad

Según Moreno-Jiménez et al. (1998), el análisis de sensibilidad de las ordenaciones obtenidas al aplicar el método AHP consiste en estudiar el comportamiento del resultado ante pequeñas modificaciones en las magnitudes obtenidas para los criterios, lo cual se realizó para verificar si el resultado era robusto. Dichas modificaciones en los criterios producen una ordenación de las alternativas, que se comparó con la original para observar si ocurrían desviaciones.

Creación de dos Bases de Datos

Para la herramienta computacional se realizaron dos bases de datos.

La primera se elaboró en *Microsoft Excel* y contó con datos recabados de la bibliografía, tales como todas las constantes y parámetros cinéticos necesarios para realizar los cálculos respectivos de cada producto modelado, asociados a los productos hortofrutícolas: naranja, fresa, manzana y zanahoria. Los datos cinéticos incluidos fueron: orden de reacción (orden 0, orden 1 y orden 2), constantes cinéticas de reacción, rango de temperaturas de reacción y energía de activación según el modelo de Arrhenius.

La segunda base de datos se elaboró en *Microsoft Access* y cuenta con 56 productos hortofrutícolas y trabajos encontrados durante la revisión bibliográfica. En ella se indica el producto hortofrutícola, el título de la investigación científica, las propiedades fisicoquímicas a las cuales se reportan las constantes cinéticas, la forma en la cual se encuentra el producto (natural, crudo, procesado, entre otros) y el enlace para dirigirse a la referencia si es del interés del usuario.

Selección de Lenguaje de Programación

La herramienta debe contar con una interfaz interactiva, agradable y fácil de usar para el usuario. Se utilizó MATLAB®, plataforma de programación y cálculo numérico que cuenta con un lenguaje propio.

Desarrollo de Herramienta Computacional

La herramienta se dividió en tres módulos:

- **Primer módulo o módulo de productos.** El usuario debe escoger de la lista de productos hortofrutícolas seleccionados por el AHP. Posteriormente, dependiendo del producto que seleccione, podrá escoger la propiedad fisicoquímica. Luego, para la propiedad fisicoquímica escogida, deberá elegir las especificaciones de presentación del producto dadas por el programa, por ejemplo: jugo concentrado a 64 °Brix.

Una vez seleccionada la presentación, el usuario deberá ingresar los datos de entrada o variables independientes de estudio: tiempo, temperatura y/o concentración inicial. Para este último parámetro, puede elegir si ingresarla manualmente o utilizar el valor por *default*, lo cual significa que el programa

tomará de la base de datos la concentración inicial experimental reportada en la referencia bibliográfica. Finalmente, deberá ingresar el tiempo o la concentración finales; dependiendo de lo que introduzca, el programa calculará la concentración al tiempo ingresado o el tiempo a la concentración indicada.

Los resultados obtenidos por este módulo son: constante cinética a la temperatura ingresada, orden de reacción (tomado de la base de datos según referencias bibliográficas), tiempo de vida media y concentración o tiempo final. Es importante señalar que, en este módulo, el usuario puede visualizar o modelar el efecto de la temperatura y del tiempo de almacenamiento en diferentes parámetros como contenido de ácido ascórbico (vitamina C), color, capacidad antioxidante, goteo, contenido de furfural, entre otros.

- **Segundo módulo o módulo general.** Como su nombre lo indica, el usuario puede evaluar, para un producto hortofrutícola disponible en la base de datos, modelar cualquier propiedad fisicoquímica (concentración de un componente) a partir de los siguientes datos de entrada (que debe proporcionar): energía de activación (E_a), constante cinética a una temperatura de referencia (k_{ref}), valor de temperatura de referencia (T_{ref}), concentración inicial (C_0), orden de reacción, temperatura a la que se calculará la constante (T) y concentración final o tiempo final, dependiendo de lo que ingrese.

Este módulo opera como una especie de hoja de cálculo interactiva, facilitando al usuario obtener predicciones de manera rápida para cualquier producto que no esté disponible en la base de datos del programa.

- **Tercer módulo o módulo general (segunda base de datos).** Se muestra la información obtenida de la base de datos de referencias bibliográficas. La información proporcionada incluye: título de la investigación, propiedades fisicoquímicas, cinética de reacción, rango de temperatura, presentación del producto y el hipervínculo al trabajo. El usuario debe seleccionar el producto hortofrutícola y el programa mostrará los trabajos disponibles recolectados para dicho producto, actuando como un buscador.

Algoritmos de Cálculo

Al iniciar el programa aparecerá un menú principal donde el usuario podrá seleccionar el módulo: General, Modelar Producto o Base de Datos.

Algoritmo: módulo de modelar producto

A continuación, se indica el procedimiento de cálculo que realiza el segundo módulo (modelar productos). Para el primer módulo, el procedimiento es similar, pero está limitado a los productos seleccionados por el método AHP.

Etapas 1. Selección de los datos de entrada: concentración inicial (% m/m, % m/v, fracción molar, molaridad), temperatura de almacenamiento en °C, concentración o tiempo finales de almacenamiento (variables independientes), dependiendo de lo que se quiera predecir para el producto hortofrutícola. Se deben seleccionar tres de las cuatro variables o factores.

Etapas 2. Ingreso de la energía de activación (E_a), constante cinética a una temperatura de referencia (k_{ref}) y orden de reacción. En caso de no poseer dichos valores, el programa realiza la lectura de los mismos en la base de datos.

Etapla 3. Cálculo de la constante cinética de reacción. Se calcula la constante cinética (k) a partir de la siguiente ecuación (modelo matemático):

$$\frac{k}{k_{ref}} = \exp\left[-\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right]$$

Donde: k , constante cinética a una temperatura T ; k_{ref} , constante cinética a una temperatura de referencia; E_a , energía de activación; R , constante de gases ideales.

Etapla 4. Cálculo de la concentración final o tiempo final, previa verificación del orden de reacción y de la cinética: degradación (pérdida) o formación (ganancia). Se calculan la concentración o el tiempo a partir de las siguientes ecuaciones (modelos matemáticos):

Orden Cero:

- Pérdida: $[A] = [A]_0 - kt$
- Ganancia: $[B] = [B]_0 + kt$

Primer Orden:

- Pérdida a partir de $\ln [A] = \ln [A]_0 - kt$
- Ganancia a partir de $\ln [B] = \ln [B]_0 + kt$

Segundo Orden:

- Pérdida: $\ln [A] = \ln [A]_0 + kt$
- Ganancia: $\frac{1}{[B]} = \frac{1}{[B]_0} - kt$

Donde: k , constante cinética a una temperatura T ; $[A]$, concentración en el tiempo para un compuesto que desaparece (reactivo); $[B]$, concentración en el tiempo para un compuesto que aparece (producto); $[A]_0$ y $[B]_0$, concentraciones iniciales; t , tiempo.

Etapla 5. Cálculo del tiempo de vida media. Previamente se debe verificar que la cinética de reacción sea de degradación (pérdida) y el orden de reacción. El cálculo del tiempo de vida media ($t_{1/2}$):

Orden Cero: $t_{1/2} = \frac{[A]_0}{2k}$

Primer Orden: $t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$

Segundo Orden: $t_{1/2} = \frac{1}{k [A]_0}$

Fin del Procedimiento

Resultados y discusión

Revisión bibliográfica

De la revisión bibliográfica se obtuvo un total de 56 productos hortofrutícolas disponibles para su análisis. Mediante la matriz de decisión, entre los 56 productos hortofrutícolas encontrados, se obtuvieron las 9 alternativas con las mayores puntuaciones, las cuales se pueden observar en la tabla 1.

Producto Hortofrutícola	Puntuación
Fresa	7,4
Zanahoria	7,2
Naranja	7,1
Manzana	7,0
Brócoli	6,6
Guayaba	6,3
Kiwi	6,2
Banana	5,9
Mango	5,3

TABLA 1. Las 9 alternativas más factibles según la matriz de decisión.

Jerarquización de Criterios (C1, C2, C3 y C4)

En la figura 2 se pueden observar los resultados obtenidos de la combinación de las opiniones de los seis expertos seleccionados, utilizando el software EC 2000®. Se obtuvo para la matriz global de jerarquización una inconsistencia de 0,05, lo cual concuerda con lo planteado por Saaty (1987), donde el valor de inconsistencia debe ser menor a 0,1. Asimismo, con los datos obtenidos de la encuesta se determinó que el criterio con mayor peso es “Variabilidad de las propiedades fisicoquímicas” (C3), con un porcentaje de 49,3 %. El segundo criterio con mayor importancia es “Presentación y condiciones de almacenamiento” (C2), con un 25,2 %, y los criterios tercero y cuarto son “Disponibilidad del producto en Venezuela” (C4) y “Disponibilidad de referencias bibliográficas” (C1), con porcentajes de 13,6 %.

FIGURA 2. Resultados de la jerarquización de cada uno de los criterios (C1, C2, C3 y C4) y peso obtenido, según la evaluación de los expertos.



El deterioro de las frutas y hortalizas ocurre debido a lesiones mecánicas y al deterioro del aspecto externo, pero principalmente por cambios en las propiedades fisicoquímicas (Cui et al., 2023; van Boekel, 2008). Por lo tanto, el criterio “Variabilidad de propiedades fisicoquímicas” (C3) es el considerado más importante, ya que al estudiar, modelar y predecir dicha variedad de cambios —tales como la degradación de vitamina C, degradación de antocianinas, formación de furfural, entre otros—, se logra estimar la estabilidad del producto durante el almacenamiento (Qiu et al., 2019; Singh et al., 1983). De esta manera, al modelar dichos criterios se pueden establecer las condiciones favorables para mantener la estabilidad del producto.

Jerarquización de Alternativas

Las cinco alternativas más factibles encontradas mediante la matriz de decisión, de acuerdo con los criterios seleccionados, que se sometieron al método AHP, fueron: fresa (A1), zanahoria (A2), naranja (A3), manzana (A4) y brócoli (A5). Una vez realizadas las encuestas del AHP a los diversos expertos, se utilizó el software EC 2000® para obtener el orden de las alternativas. En la figura 3 se muestra la síntesis de los resultados.

La alternativa que obtuvo la mejor valoración fue A3 (naranja), con un puntaje de 0,322; seguida de A4 (manzana), con 0,221 puntos. La alternativa A5 (brócoli) fue la menos aceptada por los jueces, ya que obtuvo el menor puntaje (0,084). Se decidió modelar las primeras cuatro alternativas.

FIGURA 3. Resultados de la jerarquización de cada una de las alternativas (fresa, zanahoria, naranja, manzana y brócoli) y peso obtenido, según la evaluación de los expertos.



Cada alternativa fue evaluada por cada criterio y ponderada según el juicio de cada experto, para obtener la jerarquización global. En el caso del criterio “Variabilidad de propiedades fisicoquímicas” (C3), el cual es el más importante para el conjunto de expertos, se observa en la figura 4 que la naranja, manzana y fresa fueron los productos con mayor peso: 32,4 %, 26,8 % y 20,7 %, respectivamente.

FIGURA 4. Ponderación obtenida de las alternativas (fresa, zanahoria, naranja, manzana y brócoli) frente al criterio “Variabilidad de propiedades fisicoquímicas” (C3).



La variabilidad de las propiedades fisicoquímicas estudiadas para un producto depende de su naturaleza y de cuáles compuestos son de mayor interés en función de su composición química. Ya se mencionaron anteriormente las variables de deterioro (vitamina C, antocianinas, furfural, entre otras). Para la zanahoria y el brócoli, las principales variables de deterioro estudiadas son muy específicas: degradación de carotenoides en la zanahoria y degradación de clorofila en el brócoli. Por esta razón, los principales productos ponderados son la naranja, la fresa y la manzana, cuyos parámetros fisicoquímicos son de mayor interés, al ser más comunes.

Análisis de Sensibilidad

Los pesos de los criterios se variaron en 10 % por encima y por debajo de los valores reales. Se obtuvieron resultados con un grado de inconsistencia menor al 3 %, lo que indica que está en el rango aceptado del método AHP.

Herramienta computacional

Al iniciar el programa aparecerá un menú principal, en el cual el usuario debe seleccionar cualquiera de los tres módulos. En la figura 5 se ilustra el menú principal del programa. En caso de que el usuario seleccione el módulo “Modelar producto”, aparecerá un menú con la lista desplegable de los cuatro productos seleccionados y modelados: naranja, manzana, fresa y zanahoria.

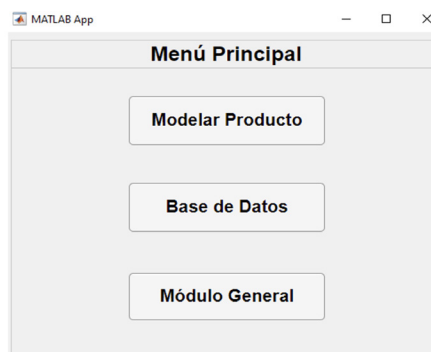


FIGURA 5. Menú principal al iniciar la herramienta computacional.

Módulo: modelar producto

En este punto se ilustra, en la figura 6, un ejemplo realizado para la fresa, seleccionando entre las propiedades disponibles para este producto la degradación de antocianinas monoméricas.

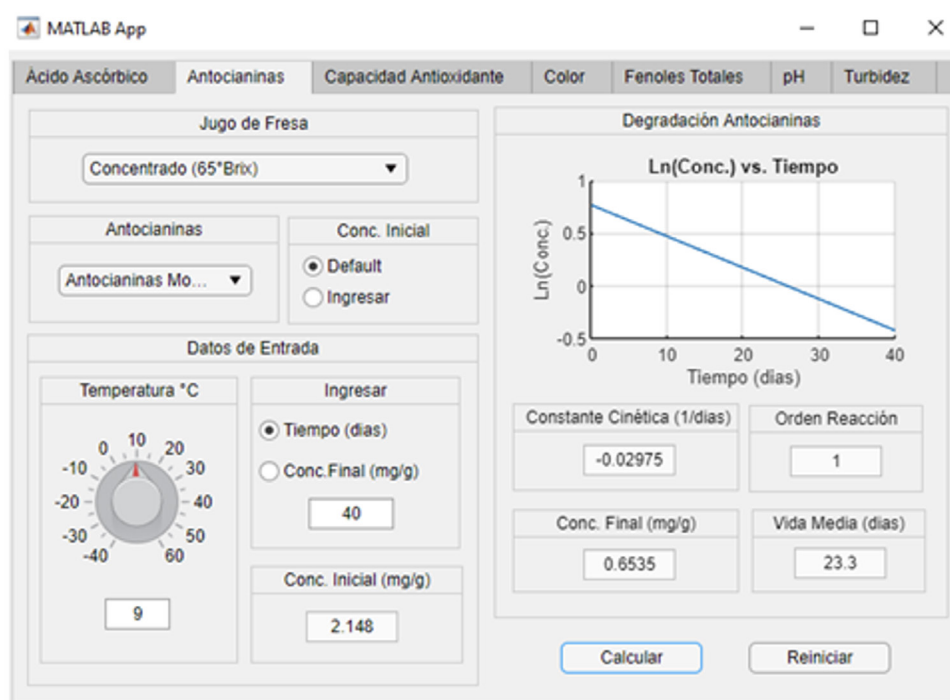


FIGURA 6. Ejemplo de la interfaz gráfica: caso de estudio de predicción de antocianinas monoméricas en fresas.

Como se puede observar en la parte superior, el usuario puede seleccionar cuál propiedad desea predecir. Luego deberá seleccionar la presentación del producto; en el ejemplo de la fresa para antocianinas, hay disponibles tres presentaciones: concentrado (65 °Brix), jugo con pulpa tratado a alta presión hidrostática y jugo sin pulpa tratado a alta presión hidrostática.

El usuario deberá ingresar la temperatura de almacenamiento, la concentración inicial (para la cual está la opción por *default*; en caso de seleccionarla, el programa tomará la concentración de la base de datos) y, por último, el tiempo o la concentración final.

Como valor agregado, a este módulo del programa se le añadió una función que permite abrir el hipervínculo que lleva a la página web donde se encuentra la fuente bibliográfica. En la figura 7 se muestra la opción “Link a referencia bibliográfica”. Esta se ejecuta al dar clic derecho con el mouse sobre el botón “Calcular” o el botón “Reiniciar”, y luego seleccionar la opción mencionada.

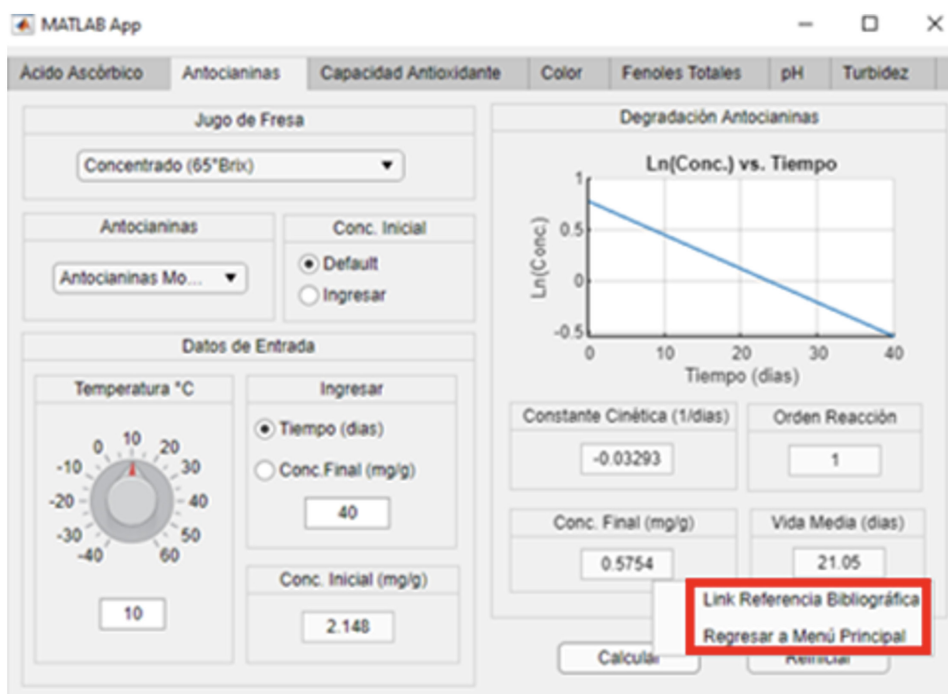


FIGURA 7. Ejemplo de la interfaz gráfica para resultados. Caso de estudio de predicción de antocianinas monoméricas en fresas. El cuadro rojo indica la opción para acceder a las referencias bibliográficas.

Módulo General

En este módulo, el usuario puede predecir los cambios para cualquier propiedad fisicoquímica de cualquier producto hortofrutícola que le interese modelar. De esta forma, el usuario debe ingresar todos los datos que en el módulo “Modelar producto” la herramienta tomaba de la base de datos.

Como se muestra en la figura 8, en primer lugar debe seleccionar si el deterioro en el alimento corresponde a degradación o formación, lo que permite asegurar el uso adecuado de los signos para las ecuaciones correspondientes, así como el orden de reacción. Luego debe proceder a ingresar la constante cinética de referencia en las unidades correspondientes al orden de la reacción, la temperatura a la que se encuentra dicha constante en °C, la energía de activación en J/mol, la temperatura de almacenamiento en °C, la concentración inicial y, por último, debe decidir si ingresar el tiempo final o la concentración final.

En el caso de escoger lo primero, el programa calculará la concentración al tiempo indicado; de escoger lo segundo, calculará el tiempo a la concentración indicada. Además, el programa calcula la constante cinética, el tiempo de vida media (si es degradación) y el gráfico del orden de reacción seleccionado.

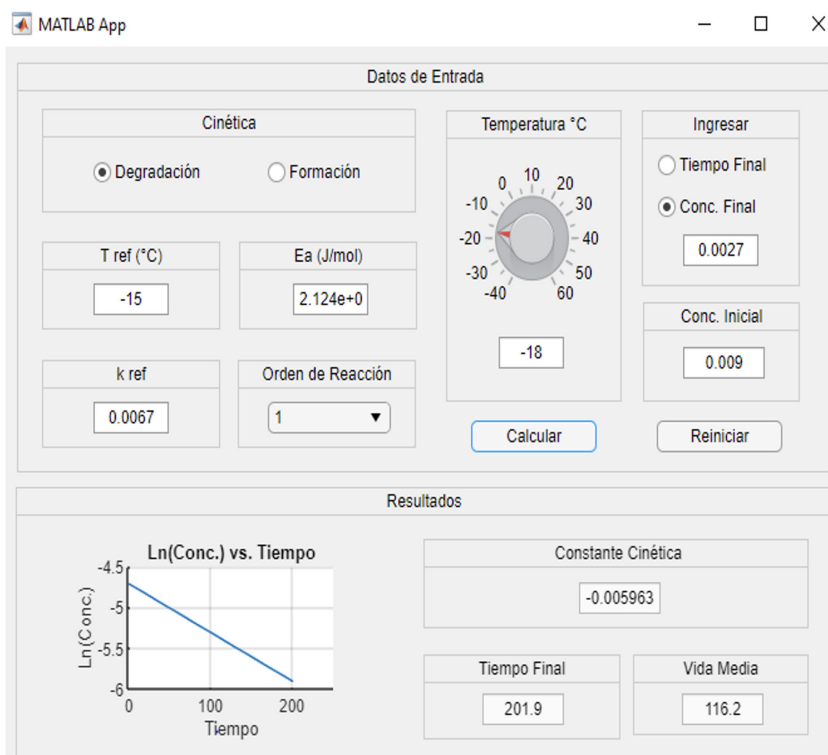


FIGURA 8. Ejemplo de la interfaz gráfica para la sección de Módulo general.

Validaciones realizadas por la herramienta computacional

El procedimiento de validación de la herramienta se realizó en dos etapas. La primera etapa consistió en evaluar la validez de resultados para cinéticas de reacción de orden cero, dado que existe un tiempo para el cual la concentración es cero. Por lo tanto, el programa es capaz de calcular el valor de ese tiempo, de tal manera que, si el usuario ingresa un tiempo final mayor, el programa arrojará un error, el cual indica que el usuario deberá ingresar un tiempo menor al calculado por el programa (ver figura 9).

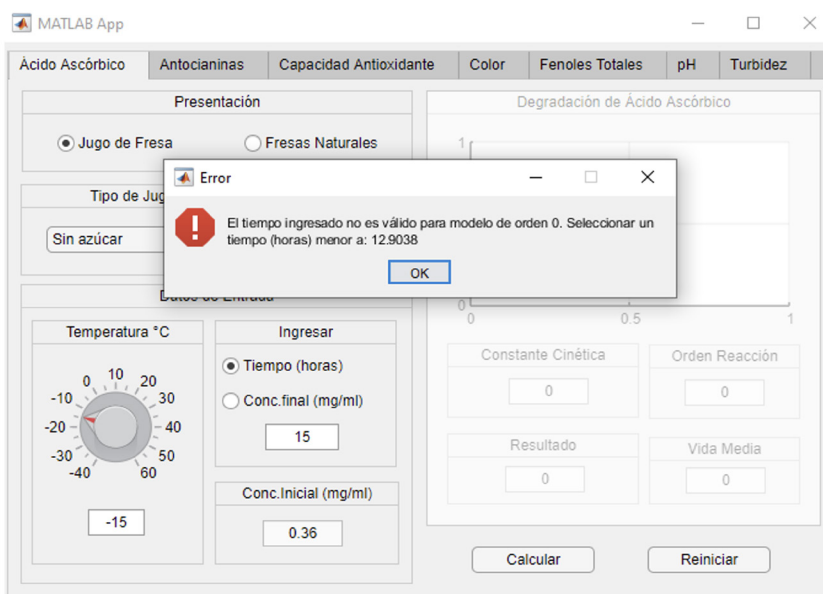


FIGURA 9. Ejemplo de la interfaz gráfica de la herramienta computacional para validación de tiempo en cinéticas de orden cero.

Por otra parte, el programa cuenta con un rango de temperaturas estándar para todos los productos. Sin embargo, si el usuario ingresa una temperatura que se encuentre fuera del rango estudiado en la referencia bibliográfica de donde se obtuvieron los datos de la base, el programa arroja una advertencia para que el usuario tenga conocimiento de que el cálculo podría presentar desviaciones con respecto al valor real. No obstante, la herramienta ejecuta dicho cálculo.

Adicionalmente, el programa realiza la comparación de resultados para aquellas propiedades fisicoquímicas que posean más datos obtenidos experimentalmente en la bibliografía. Calcula los errores porcentuales asociados, por ejemplo, en degradación de ácido ascórbico, degradación de antocianinas, disminución de sacarosa y formación de furfural.

En la tabla 2 se reportan los errores porcentuales para el tiempo de almacenamiento estimado, referente al porcentaje de pérdida de vitamina C que genera el programa en comparación con los datos reportados por Labuza (1982), Odriozola-Serrano et al. (2009) y Sahari et al. (2004) a diferentes temperaturas. Es importante señalar que el comportamiento es similar para los otros productos hortofrutícolas estudiados.

Fuente	Temperatura [°C]	% Pérdida vitamina C	% Error Relativo Con respecto a la herramienta
Labuza (1982)	-18 °C	30%	53,16%
Odriozola-Serrano <i>et al.</i> (2009)	5 a 20	50%	5,9%
Sahari <i>et al.</i> (2004)	-12	64.5%	11,67%
	-24	8.9%	39%

TABLA 2. Errores relativos porcentuales para pérdida de vitamina C en fresa, en función de la predicción de la herramienta y valores teóricos reportados.

La diferencia entre el valor obtenido por la herramienta y el reportado por Labuza (1982) para una pérdida del 30 % de vitamina C puede deberse a diferencias en valores de la actividad de agua en la fresa, contenido de sólidos solubles y pH. Según Menevseoglu et al. (2020), a medida que aumenta la actividad de agua (*aw*), aumenta la tasa de degradación de la vitamina C. La razón de este aumento es la reducción de la viscosidad, que a su vez incrementa la movilidad de los reactivos.

Otro factor que afecta la degradación de vitamina C es la alta acumulación de O₂ dentro de los envases. Esto puede ocasionar daños oxidativos, afectando las membranas y alterando la composición y el contenido de los compuestos antioxidantes (Tuleda et al., 2002).

Por otro lado, varios estudios informaron que el almacenamiento de productos frescos cortados a temperaturas mayores a 10 °C puede reducir su vida útil de 4 a 7 días, debido al crecimiento microbiano. Por lo tanto, el resultado obtenido por la herramienta para fresas cortadas (6,5 °Bx) almacenadas bajo atmósferas de alto oxígeno se encuentra dentro del rango estudiado.

Es importante señalar que la vida útil de un alimento se define como el lapso temporal en el que el producto conserva su integridad en términos de seguridad, calidad y valor nutricional bajo condiciones de almacenamiento controladas. Este periodo crítico asegura que el alimento permanezca apto para el consumo, manteniendo sus propiedades organolépticas, fisicoquímicas y microbiológicas en concordancia con las especificaciones del productor.

La correcta determinación de la vida útil es esencial para salvaguardar la salud del consumidor y reducir la generación de desechos alimentarios. Por lo tanto, la vida útil de un alimento delimita el periodo en el que conserva su calidad, seguridad y valor nutricional bajo condiciones específicas de almacenamiento. Durante este tiempo, el producto mantiene sus atributos organolépticos, fisicoquímicos y microbiológicos, asegurando su aptitud para el consumo según las especificaciones del fabricante.

La determinación de dicho tiempo depende de muchos factores, tales como actividad microbiana, reacciones químicas, actividad de agua, temperatura, pH, características del empaque, presencia de conservantes, condiciones de procesamiento y almacenamiento (Galić et al., 2009; Mills et al., 2014). Esto ha llevado al uso de redes neuronales, que permiten simular de una forma más exacta el comportamiento de un alimento durante el almacenamiento (Fathizadeh et al., 2021; Huang et al., 2007).

Dado que el programa desarrollado está enfocado en la cinética de reacciones y no incluye otros factores como los señalados anteriormente, se esperan en algunos casos errores porcentuales superiores al 10 %, como los mostrados en la tabla 2.

Propuesta de aplicación didáctica de la herramienta computacional para el estudio de la cinética de degradación de vitamina C en alimentos hortofrutícolas

La determinación de vitamina C o ácido ascórbico (AA) en alimentos hortofrutícolas es crucial debido a su importancia nutricional y su sensibilidad a factores intrínsecos, como la acidez (pH) y la actividad de agua, así como a factores extrínsecos como la temperatura, la humedad y la incidencia de luz, sobre todo durante el almacenamiento (Etienne et al., 2013; Peleg et al., 2017).

Una forma de cuantificar el contenido de AA en jugos es por medio de la iodometría (Sigmann y Wheeler, 2004). Aunque resulte un método aproximado, puede usarse a nivel de docencia en el laboratorio de química, dado que es sencillo y de fácil entendimiento por parte de los estudiantes.

Al iniciar el período académico, con una duración de 12 semanas de clases, se propone un proyecto con estudiantes del cuarto trimestre (inicio del segundo año de carrera) de ingeniería química, que estarán cursando el laboratorio de química con conocimientos previos en cinética química.

- En la primera etapa, se organizan los grupos de laboratorio, conformados por cuatro estudiantes, se planifican las actividades que se van a evaluar y se plantea el objetivo relacionado con la cinética de degradación del ácido ascórbico en bebidas comerciales o naturales.
- En la segunda etapa, los estudiantes investigan y buscan información sobre la metodología a emplear, la adaptación de la propuesta de Sigmann y Wheeler (2004), factores que afectan la degradación del AA en bebidas y los resultados del modelado de cinética de degradación del AA usando la herramienta computacional.
- En la tercera etapa (semana 6), los estudiantes realizan, mediante un foro de discusión, una exposición de sus hallazgos y propuestas.
- La cuarta etapa consistirá en realizar el trabajo experimental, determinando el contenido de AA en muestras de té verde y jugo de naranja en tiempo cero, seguidas de mediciones a intervalos de 30 minutos, bajo diferentes condiciones: temperatura, incidencia de luz y contenido de azúcar.

Los datos experimentales obtenidos por iodometría se podrán introducir en la aplicación computacional. Esta herramienta utiliza modelos cinéticos de orden cero, primer y segundo orden, para ajustar los datos y predecir la concentración de AA en función del tiempo bajo cada una de las condiciones evaluadas.

La aplicación permitirá visualizar y comparar las curvas de degradación del AA bajo las diferentes condiciones experimentales. De este modo, los estudiantes, mediante el cálculo del error entre la herramienta y los valores experimentales, podrán discutir sobre las variables que más influyen y la validez del modelo que aplica la herramienta.

Conclusiones

La herramienta computacional desarrollada es capaz de predecir los cambios fisicoquímicos en función del tiempo y la temperatura empleando modelos cinéticos de reacción para los siguientes productos hortofrutícolas seleccionados: fresa, manzana, naranja y zanahoria.

A través del uso de la herramienta computacional, al aplicar el proceso de verificación y validación de los resultados obtenidos y compararlos con los reportados en la bibliografía e investigaciones científicas, se observa concordancia y aceptación dentro del rango esperado. Por lo tanto, dichos resultados se pueden catalogar como confiables, y la herramienta puede ser utilizada en el ámbito de docencia en laboratorios de química general y química de los alimentos.

Contacto de solicitud de acceso

Para solicitar acceso a la herramienta, contactar a Alberto Paz Gómez, profesor del Departamento de Química de la Universidad Metropolitana (UNIMET): aepaz@unimet.edu.ve. Actualmente, la herramienta se encuentra en proceso de registro para su protección intelectual.

Referencias

- Corradini, M. G. (2018). Shelf life of food products: From open labeling to real-time measurements. *Annual Review of Food Science and Technology*, 9(1), 251-269. <https://doi.org/10.1146/annurev-food-030117-012441>
- Cui, F., Zheng, S., Wang, D., Tan, X., Li, Q., Li, J., y Li, T. (2023). Recent advances in shelf life prediction models for monitoring food quality. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 22(2), 1257-1284. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.13046>
- Etienne, A., Génard, M., Lobit, P., Mbéguié-A-Mbéguié, D., y Bugaud, C. (2013). What controls fleshy fruit acidity? A review of malate and citrate accumulation in fruit cells. *Journal of Experimental Botany*, 64(6), 1451-1469. <https://doi.org/10.1093/jxb/ert035>
- Expert Choice Comparion® AHP Software for Collaborative Decision Making Solution (Versión 11) [Software]. (s. f.). Expert Choice. <https://www.expertchoice.com/ahp-software>
- Fathizadeh, Z., Aboonajmi, M., y Hassan-Beygi, S. R. (2021). Classification of apples based on the shelf life using ANN and data fusion. *Food Analytical Methods*, 14(4), 706-718. <https://doi.org/10.1007/s12161-020-01940-7>

- Galić, K., Ćurić, D., y Gabrić, D. (2009). Shelf life of packaged bakery goods—A review. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 49(5), 405–426. <https://doi.org/10.1080/10408390802067878>
- Huang, Y., Kangas, L. J., y Rasco, B. A. (2007). Applications of artificial neural networks (ANNs) in food science. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 47(2), 113–126. <https://doi.org/10.1080/10408390600626454>
- Hurtado Rangel, R., Murillo Yáñez, L. E., y Avalos Bravo, A. T. (2018). Importancia del uso de simuladores educativos para la formación de estudiantes de ingeniería. *Revista de Educación y Desarrollo*, 45, 59–66.
- Irreño, C. A. B. (2018). Aplicación práctica del proceso de análisis jerárquico (AHP) para la toma de decisiones. *Revista Ingeniería, Matemáticas y Ciencias de la Información*, 5(9), 91–100. <https://doi.org/10.21017/rimci.2018.v5.n9.a38>
- Labuza, T. (1982). *Shelf-life dating of foods*. Food & Nutrition Press.
- Menevseoglu, A., Dıblan, S., Türkyılmaz, M., y Özkan, M. (2020). Degradation kinetics of bioactive compounds and antioxidant activity in strawberry juice concentrate stored at high and low temperatures. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 14, 2611–2622. <https://doi.org/10.1007/s11694-020-00507-z>
- Mills, J., Donnison, A., y Brightwell, G. (2014). Factors affecting microbial spoilage and shelf-life of chilled vacuum-packed lamb transported to distant markets: A review. *Meat Science*, 98(1), 71–80. <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2014.05.002>
- Moreno-Jiménez, J., Aguarón, J., Cano, F., y Escobar, M. (1998). Validez, robustez y estabilidad en decisión multicriterio: Análisis de sensibilidad en el Proceso Analítico Jerárquico. *Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas*, 92(4), 387–397. <https://doi.org/10.1007/BF02756516>
- Mortara, V. A., y Tabone, L. B. (2021). Selección de proveedores bajo una estrategia de abastecimiento múltiple en una empresa metalmecánica. *Ingeniería Industrial*, (40), 91–112. <https://doi.org/10.26439/ing.ind2021.n40.4809>
- Núñez, M., Hernández, R., Rodríguez, I., Rodríguez, J., y Torres, Y. (2018). Metodología para la estimación de la vida útil de los alimentos. II. Métodos de estimación. *Ciencia y Tecnología de Alimentos*, 27(2), 75–82.
- Odriozola-Serrano, I., Soliva-Fortuny, R., y Martín-Belloso, O. (2009). Influence of storage temperature on the kinetics of the changes in anthocyanins, vitamin C, and antioxidant capacity in fresh-cut strawberries stored under high-oxygen atmospheres. *Journal of Food Science*, 74(2), C184–C191. <https://doi.org/10.1111/j.1750-3841.2009.01075.x>
- Paredes-Navia, J. G., y Molina-Caballero, M. F. (2019). Enseñanza de la cinética química por medio de simulaciones y aprendizaje activo. *Tecné, Episteme y Didaxis: TED*, (45), 71–88. <https://doi.org/10.17227/ted.num45-9390>
- Peleg, M., Normand, M., y Corradini, M. (2017). A new look at kinetics in relation to food storage. *Annual Review of Food Science and Technology*, 8, 135–153. <https://doi.org/10.1146/annurev-food-030216-025915>

- Piñeres, R. (2022). Efectos del laboratorio virtual en la motivación y el desempeño de los estudiantes. *Gaceta de Pedagogía*, 1(41), 107-128.
- Qiu, L., Zhang, M., Tang, J., Adhikari, B., y Cao, P. (2019). Innovative technologies for producing and preserving intermediate moisture foods: A review. *Food Research International*, 116, 90-102. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.12.052>
- Saaty, R. (1987). The analytic hierarchy process: What it is and how it is used. *Mathematical Modelling*, 9(3-5), 161-176. [https://doi.org/10.1016/0270-0255\(87\)90473-8](https://doi.org/10.1016/0270-0255(87)90473-8)
- Sahari, M. A., Boostani, F. M., y Hamidi, E. Z. (2004). Effect of low temperature on the ascorbic acid content and quality characteristics of frozen strawberry. *Food Chemistry*, 86(3), 357-363. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2003.09.002>
- Scheviak, T. (2020). 4 different types of shelf life prediction technology. OneThird. <https://onethird.io/different-types-shelf-life-prediction-technology/>
- Sigmann, S. B., y Wheeler, D. E. (2004). Quantitative determination of citric and ascorbic acid in powdered drink mixes: A high school or general chemistry experiment. *Journal of Chemical Education*, 81(10), 1479-1482. <https://doi.org/10.1021/ed081p1479>
- Singh, R. K., Lund, D. B., y Buelow, F. H. (1983). Storage stability of intermediate moisture apples: Kinetics of quality change. *Journal of Food Science*, 48(3), 939-944. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.1983.tb14935.x>
- Tudela, J. A., Espín, J. C., y Gil, M. I. (2002). Vitamin C retention in fresh-cut potatoes. *Postharvest Biology and Technology*, 26(1), 75-84. [https://doi.org/10.1016/S0925-5214\(02\)00002-9](https://doi.org/10.1016/S0925-5214(02)00002-9)
- Van Boekel, M. (2008). Kinetic modeling of food quality: A critical review. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 7(1), 144-158. <https://doi.org/10.1111/j.1541-4337.2007.00036.x>
- Zambrano, R. W. G., y Giler, F. E. S. (2021). Fortalecimiento teórico-práctico de la enseñanza de la química mediante la aplicación de simuladores virtuales a los estudiantes de 2º año de bachillerato de la Unidad Educativa Técnico Uruguay de la ciudad de Portoviejo de la provincia de Manabí. *Revista Científica Mundo de la Investigación y el Conocimiento*, 5(1), 389-408. [https://doi.org/10.26820/recimundo/5.\(1\).enero.2021.389-408](https://doi.org/10.26820/recimundo/5.(1).enero.2021.389-408)
- Zhang, W., Luo, Z., Wang, A., Gu, X., y Lv, Z. (2021). Kinetic models applied to quality change and shelf life prediction of kiwifruits. *LWT*, 138, 110610. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2020.110610>