

JAIME DANIEL BUSTOS VANEGAS

**MODELAGEM DAS PROPRIEDADES FÍSICAS E DA TRANSFERÊNCIA DE
CALOR E MASSA DOS GRÃOS DE CAFÉ DURANTE A TORREFAÇÃO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título *Magister Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS – BRASIL
2015

Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa

T

B982m Bustos Vanegas, Jaime Daniel, 1982-
2015 Modelagem das propriedades físicas e da transferência de
calor e massa dos grãos de café durante a torrefação / Jaime
Daniel Bustos Vanegas. – viçosa, MG, 2015.
viii, 65f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Orientador: Paulo César Corrêa.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.
Inclui bibliografia.

1. Café - Propriedades físicas. 2. Torrefação. 3. Café -
Efeito da temperatura. 4. Café - Calor - Transmissão.
I. Universidade Federal de Viçosa. Departamento de Engenharia
Agrícola. Programa de Pós-graduação em Engenharia Agrícola.
II. Título.

CDD 22. ed. 633.73

JAIME DANIEL BUSTOS VANEGAS

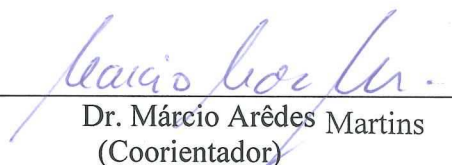
**MODELAGEM DAS PROPRIEDADES FÍSICAS E DA TRANSFERÊNCIA DE
CALOR E MASSA DOS GRÃOS DE CAFÉ DURANTE A TORREFAÇÃO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título *Magister Scientiae*.

APROVADA: 23 de fevereiro de 2015.



Dr. Mateus Da Silva Junqueira



Dr. Márcio Arêdes Martins
(Coorientador)



Dr. Paulo Cesar Corrêa
(Orientador)

Aos meus pais, Yolanda e Jaime.
Aos meus irmãos, Magda Johana e Pedro Alfonso.

DEDICO

AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Viçosa, ao Departamento de Engenharia Agrícola, pela oportunidade de ser seu aluno. À professora Lêda Rita Faroni, por seu apoio e confiança. Aos professores do departamento que fortaleceram minha formação.

À Organização dos Estados Americanos (OEA) e à Capes pela bolsa de estudos.

Ao Centro Nacional de Treinamento em Armazenamento (CENTREINAR), pelo fornecimento das instalações e facilitar o desenvolvimento de minha pesquisa.

Aos professores Paulo Cesar Corrêa e Márcio Arêdes pela orientação, apoio e ensinamentos, o que me permitiu terminar esta etapa com sucesso.

Ao Doutor Eduardo Nunes, do laboratório de materiais cerâmicos do Departamento de Engenharia de Materiais da UFMG, pela sua valiosa colaboração com testes da microtomografia.

Aos meus pais Yolanda e Jaime, por seu amor e apoio contínuo e incondicional. Yolanda, mulher exemplo de fé e coragem, a quem tudo devo.

A toda minha família em Colômbia, porque apesar da distância, sempre senti o seu apoio aqui.

A minha família em Viçosa, amizades que durarão para sempre.

A Lucia, por seu amor, companhia e amizade nesta etapa.

Aos colegas e amigos do laboratório, por sua cooperação, parceria e paciência com meu português: Batuti, Lara, Cristina, Marcela, Ursula, Renata, Claudia, Cristian, Iasmine, Sabrina, Fernanda e Guillermo. Ao professor Tetuo Hara, pelos conselhos.

Agradecimentos especiais a Fernanda Machado “Batuti”, por tornar-se minha amiga e professora de português.

A todos vocês que fizeram Brasil como minha segunda casa. Gracias, totales!

BIOGRAFIA

JAIME DANIEL BUSTOS VANEGAS, filho de Jaime Bustos e Gloria Yolanda Vanegas, nasceu em Ibagué, Tolima, Colômbia, em 9 de novembro de 1982.

Em fevereiro de 2000, iniciou o curso de Engenharia Agroindustrial na Universidade de Tolima, Ibagué, Tolima, graduando-se em abril de 2007. Desde 2005, quando começou o seu estágio, trabalhou como engenheiro nas áreas de produção, controle de qualidade e desenvolvimento de produtos em empresas do setor de alimentos.

Em abril de 2013, ingressou no Programa de Pós-Graduação, em nível de Mestrado, em Engenharia Agrícola da UFV, na área de Pré-Processamento e Armazenamento de Produtos Agrícolas, submetendo-se a defesa de dissertação em fevereiro de 2015.

SUMÁRIO

RESUMO	vii
ABSTRACT	viii
INTRODUÇÃO GERAL	1
REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	3
CAPÍTULO 1	5
ABSTRACT	5
1.1 INTRODUÇÃO	7
1.2 MATERIAIS E MÉTODOS	10
1.2.1 Matéria prima	10
1.2.2 Processo de torrefação	10
1.2.3 Teor de água do grão	10
1.2.4 Volume do grão	11
1.2.4.1 Modelagem matemática da expansão volumétrica	11
1.2.5 Superfície do grão	12
1.2.5.1 Modelagem matemática da expansão superficial	13
1.2.6 Perda de massa	13
1.2.7 Massa específica do grão	13
1.2.8 Microestrutura do grão	13
1.2.9 Temperatura do grão	14
1.2.10 Análise estatística	14
1.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO	15
1.4 CONCLUSÃO	30
1.5 REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	31
CAPÍTULO 2	33
RESUMO	33
ABSTRACT	33
2.1 INTRODUÇÃO	35
2.2 MODELO MATEMÁTICO	38
2.2.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES	39
2.2.2 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO 1	42
2.2.3 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO 2	47
2.3 RESULTADOS	51

2.3.1 Modelo 1: Análise concentrada.....	51
2.3.2 Modelo 2: efeito da difusão de calor e massa no interior do grão.....	56
2.4 CONCLUSÃO	62
2.5 REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.....	63
CONCLUSÃO GERAL.....	65

RESUMO

BUSTOS

Objetivou-se com este trabalho avaliar e modelar a variação das propriedades físicas do grão de café em diferentes condições de torrefação e desenvolver um modelo físico capaz de estimar o perfil de temperatura no interior do grão durante o processo, levando em conta tais variações. Foram utilizados grãos de café arábica com teor de água inicial de $0,129 \text{ kg}_a \text{ kg}_{ms}^{-1}$, torrados em um torrador de queima de gás direto com cilindro rotativo a 45 rpm. Foram fixadas 5 temperaturas do ar no interior do cilindro (200, 220, 240, 260 e 280 °C). Os grãos foram torrados de forma unitária, sendo suspensos no centro do tambor por um termopar que registrava a temperatura a cada 5 s. A convecção e a radiação foram os tipos de transferência de calor que dominaram o processo. O teor de umidade e as propriedades físicas (volume, área superficial, massa específica) do grão foram determinadas a cada 20 s. Modelos empíricos foram ajustados para representar a variação das propriedades em função do teor de água. Observou-se que a expansão volumétrica é isotrópica em temperaturas de torra maiores de 220 °C. A massa específica variou linearmente com a umidade, apresentando uma maior queda para a temperatura de 280 °C. Para a predição da temperatura do grão foram realizados duas análises: inicialmente uma análise concentrada, considerando uma temperatura homogênea dentro do grão, depois foi feita uma análise tendo em conta as diferenças espaciais de temperatura no interior do grão. Desenvolveu-se um modelo dinâmico discretizado pelo método das diferenças finitas levando em conta o fluxo endotérmico (gerado pela evaporação da água do grão), o fluxo exotérmico (gerado pelas reações de pirólise depois de 150 °C) e o fluxo de calor proporcional ao coeficiente global de transferência de calor (h) envolvendo a convecção e a radiação. O modelo foi ajustado aos dados experimentais de temperatura do grão e calculou-se o coeficiente global de transferência para cada temperatura de processo. Os valores de h variaram entre 60 e 110 $\text{W/m}^{-2} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ para a análise concentrada e entre 70 e 160 $\text{W/m}^{-2} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ para a análise espacial. As temperaturas estimadas pelo modelo mostraram um bom ajuste com os dados experimentais constituindo assim uma ferramenta complementar para o controle do processo em tempo real e para avaliar a influência das variáveis do processo na qualidade final do produto.

ABSTRACT

BUSTOS

The aim of this study was to evaluate and model the variations of the physical properties of coffee bean in different roasting conditions and develop a physical model to estimate the temperature profile inside the grain during the process taking into account such variations. Arabica coffee beans with initial water content of $0.129 \text{ kg}_a \text{ kg}_{ms}^{-1}$, were roasted in a drum roaster with direct gas burning at 45 rpm. Five temperatures were set to air inside the drum (200, 220, 240, 260 and 280 °C). Each grain was roasted as a unit, being suspended in the drum center by a thermocouple which recorded the temperature every 5 seconds. Convection and radiation were the heat transfer mechanisms that dominated the process. The moisture content and the physical properties (volume, surface area, bulk density) of grain were measured every 20 s. Empirical models were adjusted to represent the variation of properties depending on the water content. It was observed that the volumetric expansion of the grain is isotropic at temperatures greater than 220 °C. Density varied linearly with moisture, with a further fall at temperature of 280 °C. For predicting the grain temperature two analyzes were conducted: initially a lumped analysis, considering a homogeneous temperature within the grain, after, an analysis was made taking into account the spatial distribution of temperature inside the grain. A dynamic model discretized by the finite differences method was developed taking into account the endothermic stream (generated by water evaporation), exothermic flux (generated by pyrolysis reactions after 150 °C) and the overall heat flow involving convection and radiation. The model was fitted to the experimental data of grain temperature. Then, the overall heat transfer coefficient for each process temperature was calculated. The h values ranged between 60 and 110 $\text{W/m}^2\text{C}^{-1}$ for lumped analysis and between 70 and 160 $\text{W/m}^2\text{C}^{-1}$ for spatial analysis. Temperatures estimated by the model showed a good fit with the experimental data thus constituting a complementary tool for the real-time control process and to evaluate the influence of process variables on the product quality.

INTRODUÇÃO GERAL

O Brasil é o maior produtor de café do mundo com uma produção estimada para 2015, entre 44,11 e 46,61 milhões de sacas de 60 quilos de produto beneficiado, sendo 73,7% correspondente à espécie arábica e o restante à espécie robusta. Esta estimativa representa uma redução de 2,7% e um crescimento de 2,8%, quando comparado com a produção de 45,34 milhões de sacas obtidas na safra anterior (CONAB, 2015).

Embora seja o maior produtor e o segundo maior mercado consumidor depois dos Estados Unidos, a economia cafeeira do Brasil ainda não desenvolve a tecnologia de países exportadores de café industrializado como a Itália e a Alemanha. Para conseguir uma geração de valor agregado na cadeia produtiva do café, é preciso conhecer e estudar as operações unitárias inerentes em seu processo. A torra é uma etapa de grande importância, pois esta é responsável por manter a boa qualidade do café. Durante a torra, o grão de café desidrata e passa por uma série de transformações físico-químicas que dão ao produto final as características indicadas para seu consumo (cor, aroma e sabor) pela formação de diversos compostos voláteis. Dentro destas transformações, a expansão volumétrica e superficial, ocorridas principalmente pela pressão acumulada devido a geração e liberação de CO₂ e vapor de água através do grão, e a perda de massa e seu efeito na massa específica, são variáveis de importância fundamental nos estudos da transferência de calor e massa, pois afetam diretamente a taxa e quantidade de calor transferido ao grão.

Na maioria dos torradores industriais, o controle do processo é feito indiretamente, ou seja fora do forno, usando a cor do grão e a perda de massa como os principais parâmetros para definir o nível de torra. Uma vez que estes parâmetros por si só não são confiáveis para obter uma correta avaliação (FRANÇA et al., 2009), durante a última década diversos estudos tentaram desenvolver ferramentas de controle do processo não invasivas e em tempo real (controle preventivo além de uma ferramenta de otimização) procurando obter um café de alta qualidade. Este controle pode ser feito mediante o monitoramento da temperatura do grão (ALONSO-TORRES et al., 2013; SCHENKER, 2000; SCHWARTZBERG, 2002; FRANÇA et al., 2002; BONNLANDER et al., 2005; HERNÁNDEZ et al., 2007; HERNÁNDEZ et al., 2008; BASILE e KIKIC, 2009; FABBRI et al., 2011; BOTTAZZI et al., 2012) e pelo monitoramento dos compostos voláteis

(VOC's) gerados durante o processo. Os gases gerados durante a torrefação são uma complexa mistura principalmente de gases inorgânicos inodoros (CO_2 , CO , N_2 e H_2O) e menos de 1% de VOC's. Aproximadamente 800 VOC's têm sido identificados no café torrado e cerca de 40 deles são responsáveis pelo aroma (BELITZ et al. 2009). Sua presença e intensidade no produto final dependem do binômio tempo-temperatura. O monitoramento é feito usando técnicas de ionização a laser e espectrometria de massa (DORFNER et al., 2003; DORFNER et al., 2004; WIELAND et al., 2012; HERTZ-SCHÜNEMANN et al., 2013; GLOESS et al., 2014).

O presente estudo está dividido em dois capítulos. No primeiro, foi analisada a variação das propriedades físicas do grão em diferentes temperaturas de torrefação procurando desenvolver modelos empíricos que possam ser inseridos nos balanços energéticos e de massa no volume de controle (grão de café). No segundo capítulo, foi desenvolvido um modelo físico capaz de estimar a temperatura do grão de café em dois cenários diferentes. O primeiro, considerando uma análise concentrada e o segundo, considerando os efeitos temporais e espaciais. Objetivou-se com este trabalho conseguir uma melhor compreensão do processo de torrefação e fornecer uma ferramenta complementar para o controle e otimização do processo em tempo real, capaz de estimar a distribuição de temperatura ao interior do grão para enriquecer e melhorar modelos de aquecimento ao nível industrial e como ferramenta complementar nos estudos de formação de compostos responsáveis pelo aroma do café torrado.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

- Alonso-Torres, B., Hernández-Pérez, J. A., Sierra-Espinoza, F., Schenker, S., e Yeretizian, C. “Modeling and Validation of Heat and Mass Transfer in Individual Coffee Beans during the Coffee Roasting Process Using Computational Fluid Dynamics (CFD).” *CHIMIA International Journal for Chemistry* 67 (4): 291–94. 2013.
- Basile, M, e Kikic, I. “A Lumped Specific Heat Capacity Approach for Predicting the Non-Stationary Thermal Profile of Coffee During Roasting.” *Chem. Biochem. Eng. Q.* 23 (2): 167–77. 2009.
- Belitz, H. D., Grosch, W., Schieberle, P. **Food Chemistry**. Springer, 1070 p. 2009.
- Bonnlander, B., Eggers, R., Engelhardt, U. H., Maier, H. G. “Roasting.” In *Espresso Coffee: The Science of Quality*, 398. 2005.
- Bottazzi, D., Farina, S., Milani, M., e Montorsi, L. “A Numerical Approach for the Analysis of the Coffee Roasting Process.” *Journal of Food Engineering* 112 (3): 243–52. 2012.
- Companhia Nacional de Abastecimento (CONAB). “**Acompanhamento Da Safra Brasileira Café**” 2015.
- Dorfner, R., Ferge, T., Kettrup, A., Zimmermann, R., Yeretizian, C. “Real-Time Monitoring of 4-Vinylguaicol, Guaicol, and Phenol during Coffee Roasting by Resonant Laser Ionization Time-of-Flight Mass Spectrometry”. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 51: 5768 – 5773. 2003.
- Dorfner, R., Ferge, T., Yeretizian, C., Kettrup, A., Zimmermann, R. “Laser Mass Spectrometry as On-Line Sensor for Industrial Process Analysis: Process Control of Coffee Roasting”. *Analytical Chemistry* 76 (5): 1386 – 1402. 2004.
- Fabbri, A., Cevoli, C., Alessandrini, L., e Romani, S. “Numerical Modeling of Heat and Mass Transfer during Coffee Roasting Process.” *Journal of Food Engineering* 105 (2): 264–269. 2011.
- França, A. S., Oliveira, L. S., Corrêa P. C. “Estudo da adequação de modelos semi-empíricos para descrever a variação do teor de umidade e voláteis durante o processo de torração de café.” *Revista Brasileira de Armazenamento*. Especial Café (4): 26-31. 2002.
- França, A. S., Oliveira, L. S., Oliveira, R. C., Agresti, P. C. M. A., Augusti, R. “A preliminary evaluation of the effect of processing temperature of coffee roasting degree assessment.” *Journal of food engineering*, v. 92 (3), p. 345 - 352, 2009.
- Gloss, A., Vietri, A., Wieland, F., Smrke, S., Schonbachler, B., Sánchez, J., Petrozzi, S., Bongers, S., Kosiorowski, T., Yeretizian, C. “Evidence of different flavour formation dynamics by roasting coffee from different origins: On-line analysis with PTR-ToF-MS”. *Journal of Mass Spectrometry* 365-366: 324 – 337. 2014.

- Hernández, J. A., Heyd, B., Irlles, C., Valdovinos, B., e Trystram, G. “Analysis of the Heat and Mass Transfer during Coffee Batch Roasting.” *Journal of Food Engineering* 78 (4): 1141–48. 2007.
- Hernández, J. A., Heyd, B., e Trystram, G. “Prediction of Brightness and Surface Area Kinetics during Coffee Roasting.” *Journal of Food Engineering* 89 (2): 156–63. 2008.
- Hertz-Schünemann, R., Dorfner, R., Yeretian, C., Streibel, T., Zimmermann, R. “On-line process monitoring of coffee roasting by resonant laser ionisation time-of-flight mass spectrometry: bridging the gap from industrial batch roasting to flavour formation inside an individual coffee bean” *Journal of Mass Spectrometry* 48 (12): 1253 – 1265. 2013.
- Schenker, Stefan. 2000. *Investigations on the Hot Air Roasting of Coffee Beans*. Zurich, Swiss. [Doctor’s dissertation]: Swiss Federal Institute of Technology.
- Schwartzberg, H. G. 2002. “Modeling Bean Heating during Batch Roasting of Coffee Beans.” In *Engineering and Food for the 21st Century*, 1036.
- Wieland, F., Gloess, A., Keller, M., Wetzel, A., Schenker, S., Yeretian, C. “Online monitoring of coffee roasting by proton transfer reaction time-of-flight mass spectrometry (PTR-ToF-MS): towards a real-time process control for a consistent roast profile”. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* 402: 2531 - 2543. 2012

CAPÍTULO 1

Propriedades físicas do grão de café durante o processo de torrefação

RESUMO

Objetivou-se com este trabalho avaliar e modelar a variação das propriedades físicas do grão de café em condições isotérmicas de torrefação procurando acrescentar conhecimento ao processo e fornecer expressões matemáticas que possam ser inseridas nos balanços de massa e energia. Foram utilizados grãos de café arábica com teor de água inicial de $0,129 \text{ kg}_a \text{ kg}_{ms}^{-1}$, torrados em um torrador de queima de gás direto com cilindro rotativo a 45 rpm. Foram fixadas 5 temperaturas do ar no interior do cilindro (200, 220, 240, 260 e 280 °C). Os grãos foram torrados de forma unitária, sendo suspensos no centro do tambor por um termopar que registrou a temperatura a cada 5 s. A convecção e a radiação foram os tipos de transferência de calor que dominaram o processo. O teor de umidade e as propriedades físicas (volume, área superficial, massa específica) do grão foram determinadas a cada 20 s aproximando a forma do grão à metade um elipsóide. Modelos empíricos foram ajustados para representar a variação das propriedades em função do teor de água. O modelo Copace 2014 foi o que melhor se ajustou aos dados experimentais de expansão volumétrica e superficial e observou-se que a expansão volumétrica é isotrópica em temperaturas de torra maiores de 220 °C. A massa específica variou linearmente com a umidade, apresentando uma maior queda para a temperatura de 280 °C.

ABSTRACT

The objective of this paper was to evaluate and model the variation of the physical properties of coffee bean at isothermal conditions roasting looking to add the knowledge of the process and provide mathematical expressions that can be inserted in the matter and energy balances. Arabica coffee beans with initial water content of $0.129 \text{ kg}_a \text{ kg}_{ss}^{-1}$, were roasted in a drum roaster with direct gas burning at 45 rpm. Five temperatures were set to air inside the drum (200, 220, 240, 260 and 280 °C). Each grain was roasted as a unit, being suspended in the drum center by a thermocouple wich recorded the temperature every 5 seconds. Convection and radiation were the heat transfer mechanisms that dominated the process. The moisture content and the physical properties (volume, surface

area, bulk density) of grain were measured every 20 s. Empirical models were adjusted to represent the variation of properties depending on the water content. Copace 2014 model was the best fit to the experimental data of volume and surface expansion and was observed that the volumetric expansion of the grain is isotropic at temperatures greater than 220 °C. Density varied linearly with moisture, with a further fall at temperature of 280 °C.

1.1 INTRODUÇÃO

O fruto de café é uma drupa constituída de duas sementes cobertas cada uma por uma camada de aspecto pergaminoso (endocarpo) formada por fibras esclerenquimáticas alongadas com lúmen estreito e pontoações arredondadas. O endocarpo é coberto pela pulpa ou mucilagem (mesocarpo) e finalmente pela casca (exocarpo) (FUNED, 2012). A semente apresenta forma plana convexa sulcada longitudinalmente na face plana e é formada pela testa (película prateada composta de fibras alongadas com células de paredes espessadas) e pelo endosperma, principal componente da semente apresentando pequenas células ricas em óleo nas camadas externas e células maiores com paredes finas no centro da semente (BORÉM et al., 2014).

A composição química do endosperma é de grande importância pois representa os compostos precursores do aroma que serão transformados durante a torrefação. Tais compostos podem ser solúveis (caféina, trigonelina, niacina, ácidos clorogênicos, carboidratos de baixo peso molecular, ácidos carboxílicos e algumas proteínas e minerais) ou insolúveis (polissacarídeos, celulose, lignina, hemicelulose, proteínas, minerais e lipídeos). Os polissacarídeos representam cerca de 50% do peso seco do café cru. A sacarose é o carboidrato de baixo peso molecular mais abundante (5 – 12% no café arábica) e os lipídeos representam entre 12 e 18% do peso seco do grão (BORÉM et al., 2014).

Depois do processo de beneficiamento do café (colheita, lavagem, secagem e armazenamento), as sementes ficam expostas e prontas para o processo de torrefação com uma umidade entre 12 e 13%. Durante este processo, o grão é submetido a altas temperaturas (200 – 280 °C) fazendo reagir os polissacarídeos, proteínas, ácidos clorogênicos e trigonelina para formar os compostos responsáveis pelo cor, aroma e sabor do grão torrado. Inicialmente ocorre a etapa de secagem, na qual o grão desidrata liberando vapor de água e dando início a expansão da estrutura. Quando o grão atinge temperaturas entre 150 e 180 °C, as reações exotérmicas tem início e os compostos responsáveis pelo cor, aroma e sabor começam a se formar. Nesta segunda etapa, como produto das reações, dióxido de carbono é liberado contribuindo para a expansão (Schwartzberg, 2002).

O mecanismo da expansão pode ser estudado como um processo balanceado entre a formação de gás (vapor de água e CO₂) como força motriz, e as transições de estado do material da parede celular como força de resistência (Geiger, 2004). Schenker (2000) estudou as transições de estado vítreo para elástico durante a torrefação encontrando que o grão permanece maior tempo no estado elástico durante a torra a altas temperaturas, o que contribui à maior capacidade de expansão nestas condições.

A liberação de vapor de água e de CO₂ são os responsáveis pela perda de massa do grão durante a torra e esta, junto com a cor do grão, são os principais parâmetros para determinar o fim do processo e o grau de torra desejado. No Brasil, na maioria dos casos é o operador do torrador quem define o grau de torra baseado na cor do grão, embora esta prática pode levar a erros, dado que a observação é pouco objetiva e a cor no interior do grão pode ser diferente da cor na superfície. A Specialty Coffee Association of America - SCAA e a empresa norte-americana Agtron criaram padrões aceitos internacionalmente para monitorar indiretamente, isto é fora do forno, o grau de torra. Este consiste de uma escala de 0 a 100 determinada com base na absorção de luz infravermelha pelo grão de café ou pelo pó. Também, a Agtron desenvolveu um espectrômetro de infravermelho específico para a determinação do grau de torra e criou discos de cores conforme os padrões definidos na escala. Assim, a SCAA universalizou o controle da torra através de comparações visuais usando esses discos coloridos como também por espectroscopia no infravermelho próximo (EMBRAPA, 2004). Para o nível de torra média clara o grão atinge uma perda de massa de 15%, para torra média 17%, para torra moderadamente escura 19% e para torras escuras 21%.

O estudo e conhecimento das propriedades físicas do grão de café (antes, durante e depois do processo de torrefação), além de fornecer informações úteis para o planejamento do equipamento e do processo, constitui uma ferramenta para determinar a qualidade do produto e da bebida. Os grãos defeituosos representam entre 15 e 20% da produção do Brasil (Oliveira et. al. 2006) e sua classificação pode ser feita com base em suas propriedades físicas. Mendonça et. al. (2009) realizaram uma avaliação comparativa (volume, massa específica e cor) de grãos sadios e defeituosos de café arábica e robusta antes e depois da torra verificando o tamanho como um bom indicador da qualidade para as duas espécies, enquanto a cor como um indicador mais efetivo para a espécie robusta. A

massa específica do grão está relacionada com o conteúdo de matéria seca, visto que maiores valores desta propriedade refletem em grão de boa qualidade.

As características estruturais, (definidas pelo tratamento térmico), podem afetar diretamente as propriedades físico-químicas, funcionais, tecnológicas e ainda nutricionais dos produtos alimentícios (LAVERSE et al., 2012). O café torrado em altas temperaturas apresenta maior expansão volumétrica e poros maiores, facilitando a migração de óleo e a oxidação durante o armazenamento (SCHENKER et al., 2000; GEIGER, 2004)

Na atualidade é aceito que as propriedades físicas e térmicas de produtos agrícolas estão relacionadas com a estrutura dos mesmos e a configuração daquela estrutura às vezes é imperceptível ao olho humano. Várias técnicas de microscopia e processamento de imagens vem sendo desenvolvidas e usadas no estudo da microestrutura destes produtos (Ramírez et. al. 2009). A microtomografia de raios X (μ CT) é uma técnica não invasiva baseada nas diferenças da atenuação dos raios X devido principalmente por diferenças de densidade no interior da amostra que permitem obter informação qualitativa e quantitativa (porosidade, área e volume) da microestrutura sem danificá-la. Laverse et. al. (2012) usaram esta técnica para avaliar o efeito do tempo de torra sobre o número e tamanho dos poros do café torrado.

Objetivou-se com este trabalho avaliar e modelar a variação das propriedades físicas do grão de café em condições isotérmicas de torrefação procurando acrescentar ao conhecimento do processo e fornecer expressões matemáticas que possam ser inseridas nos balanços de massa e energia a fim de desenvolver modelos capazes de simular o processo o mais próximo da realidade.

1.2 MATERIAIS E MÉTODOS

O presente trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Propriedades Físicas e Qualidade de Produtos Agrícolas pertencente ao Centro Nacional de Treinamento em Armazenagem (CENTREINAR), localizado no campus da Universidade Federal de Viçosa (UFV), Viçosa – Minas Gerais (MG).

1.2.1 Matéria prima

Foram utilizados grãos de café beneficiados, com tamanho acima da peneira 18, *Coffea arabica* L. variedade catuaí vermelho, com umidade inicial de $0,129 \text{ kg}_a \text{ kg}_{\text{ms}}^{-1}$ provenientes de uma unidade beneficiadora de café localizada em Viçosa, Minas Gerais. As amostras foram acondicionadas em sacos de polietileno e armazenadas em câmara com temperatura controlada de $20 \text{ }^\circ\text{C}$. Para o processo da torra, as amostras foram retiradas da câmara e expostas ao ambiente por aproximadamente 12 h para atingir o equilíbrio térmico e minimizar as variações relacionadas a temperatura inicial.

1.2.2 Processo de torrefação

Foi usado um torrador de queima de gás direto com cilindro rotativo a 45 rpm. A temperatura do ar foi medida por um termopar tipo k, posicionado no interior do cilindro e controlada manualmente com uma válvula de passo de gás. Foram fixadas 5 temperaturas do ar no interior do cilindro. Estas três temperaturas (220 , 240 e $260 \text{ }^\circ\text{C}$), são valores definidos pela literatura (SCHENKER, 2000) para os níveis de torra clara, média e escura respectivamente. As outras duas temperaturas (200 e $280 \text{ }^\circ\text{C}$) são condições extremas usadas para melhorar o ajuste do modelo. Os grãos foram torrados de forma unitária, sendo sustentados no centro do tambor pelo termopar. A convecção e a radiação foram os tipos de transferência de calor que dominaram o processo. O tempo de torra foi determinado em 10 min para garantir o nível de torra escura para todas as temperaturas.

1.2.3 Teor de água do grão

O teor de água foi obtido empregando-se o método da estufa, a $105 \text{ }^\circ\text{C}$ por 24 h, utilizando-se uma balança analítica com precisão de $0,001 \text{ g}$ (INSTITUTO ADOLFO LUTZ, 2008). Foram tiradas amostras de aproximadamente cinco gramas a cada 20 s durante o tempo de torra. Foram feitas três repetições para cada temperatura de torra.

1.2.4 Volume do grão

O volume do grão foi determinado aproximando a forma à um semi-elipsóide (Figura 1) e medindo os eixos a , b e c (MOHSENIN, 1986. Equação 1.1) com paquímetro digital de 0,01 mm de precisão. Determinou-se o volume unitário de 10 grãos antes da torra e depois de cada intervalo de tempo de 20 s e então se calculou o índice de expansão volumétrica (ψ) para cada (Equação 1.2). Por último calculou-se o índice médio dos 10 grãos para cada intervalo de tempo.

$$V = \frac{\pi abc}{6} \quad (1.1)$$

$$\psi = \frac{V_f}{V_0} \quad (1.2)$$

em que:

a , b e c = comprimento dos eixos ortogonais (m);

V_f = volume do grão no final do intervalo de tempo (m³);

V_0 = volume do grão antes da torra (m³).

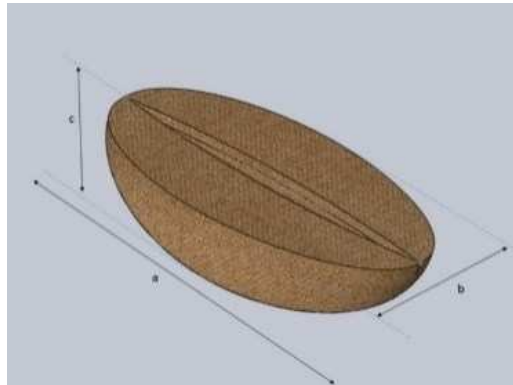


Figura 1. Geometria do grão de café.

1.2.4.1 Modelagem matemática da expansão volumétrica

O índice de expansão volumétrica foi modelado em função do teor de água do grão usando modelos matemáticos comumente adotados para o fenômeno de expansão e de contração de grãos (BOTELHO 2009) (Tabela 1).

Tabela 1. Modelos matemáticos usados para a modelagem da expansão e da contração volumétrica de grãos.

Modelo	Equação
Corrêa 2004	$\psi = \frac{1}{a + b \exp(X)} \quad (1.3)$
Exponencial	$\psi = a \exp(bX) \quad (1.4)$
Linear	$\psi = a + bX \quad (1.5)$
Polinomial	$\psi = 1 + aX + bX^2 \quad (1.6)$
Rahman	$\psi = 1 + a(X - X_0) \quad (1.7)$
Bala e Woods	$\psi = a\{1 - \exp[-b(X_0 - X)]\} \quad (1.8)$

em que:

ψ = índice de expansão volumétrica unitária (adimensional);

X_0 = Umidade inicial do grão (decimal b.s.);

X = Umidade do grão no tempo (decimal b.s.);

a, b = Parâmetros do modelo.

1.2.5 Superfície do grão

A área superficial do grão (A) foi determinada utilizando-se o modelo citado por Mohsenin (1986) (Equação 1.9), medindo-se os eixos a, b e c com paquímetro digital de 0,01 mm de precisão. Determinou-se a área superficial unitária de 10 grãos antes da torra e depois de cada intervalo de tempo de 20 s e então calculou-se o índice de expansão superficial (ΔS) (Equação 1.10). Em seguida calculou-se o índice médio dos 10 grãos para cada intervalo de tempo.

$$A = \left[\left(\frac{\pi B^2}{2} + \frac{\pi a B}{2e} \operatorname{sen}^{-1} e \right) / 2 \right] + \left(\frac{\pi a b}{4} \right) \quad (1.9)$$

em que:

$$B = (2bc)^{1/2} \quad e = \sqrt{1 - \left(\frac{B}{a} \right)^2} \quad \Delta S = \frac{A_f}{A_0} \quad (1.10)$$

em que:

A_f = área superficial do grão no final do intervalo do tempo (m^2);

A_0 = área superficial do grão antes da torra (m^2).

1.2.5.1 Modelagem matemática da expansão superficial

Por apresentar comportamento similar a expansão volumétrica, o índice de expansão superficial foi modelado em função do teor de água do grão usando o modelo que melhor representou a expansão volumétrica (Tabela 1).

1.2.6 Perda de massa

A massa do grão foi determinada em balança analítica de 0,001 g de precisão. Determinou-se a massa unitária de 10 grãos antes da torra e depois de cada intervalo de tempo de 20 s e então calculou-se a perda de massa (RL) (Equação 1.11). Finalmente calculou-se a perda de massa média para cada intervalo de tempo.

$$RL(\%) = \frac{m_0 - m_f}{m_0} \times 100 \quad (1.11)$$

em que:

m_0 = massa inicial do grão (g);

m_f = massa do grão ao final do intervalo do tempo de torra (g).

1.2.7 Massa específica do grão

Com os dados obtidos de volume e massa para cada grão, foi calculada a massa específica unitária (Equação 1.12) e depois foi calculada a média de 10 grãos para cada intervalo de tempo.

$$\rho_u = \frac{m}{V} \quad (1.12)$$

1.2.8 Microestrutura do grão

Para obter imagens da estrutura interna do grão, foi usado um microtomógrafo de raios X SkyScan 1172 com uma aceleração de voltagem de 50 kV e um tamanho de pixel de 5,5 μm . Não foi usado filtro. Dois grãos torrados em diferentes temperaturas (220 e 260 °C) foram submetidos a análise antes, durante (10 % de perda de massa) e ao final da torra

(18% de perda de massa). Para a reconstrução das imagens foi usado o software CTAn de SkyScan.

1.2.9 Temperatura do grão

Para determinar a temperatura do centro dos grãos, estes foram furados com agulha fina e foi inserido um termopar tipo k calibre AWG 24 (0,51 mm), que registrou a temperatura a cada 5 s, salvando os dados no programa EZ datalogger. O grão ficou sustentado no centro do tambor pelo mesmo termopar. Foram feitas cinco repetições para cada temperatura de torra.

1.2.10 Análise estatística

O ajuste dos modelos aos dados experimentais de índice de expansão volumétrica e superficial foi realizado por análise de regressão não linear pelos métodos Gauss-Newton e Simplex & Quase-Newton. Os dados de massa específica foram submetidos à análise de regressão linear. Para verificar o grau de ajuste de cada modelo e escolher o que melhor representou o fenômeno, foram considerados o coeficiente de determinação (R^2), erro médio relativo (P) (Equação 1.13) e o erro médio estimado (SE) (Equação 1.14).

$$P = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|Y_i - \hat{Y}_i|}{Y_i} \quad (1.13)$$

$$SE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{GLR}} \quad (1.14)$$

em que:

Y_i = valor observado;

\hat{Y}_i = valor estimado;

n = número de dados observados; e

GLR = graus de liberdade do resíduo (número de dados observados menos o número de parâmetros do modelo).

1.3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Constatou uma acelerada perda de umidade de até aproximadamente 4% b.s. e logo depois tendendo a se estabilizar (Figura 1). Este valor foi atingido rapidamente, cerca de 90 s durante a torra a 280 °C e 200 s para a torra 200 °C. O processo industrial de torrefação completa pode ser dividido em três fases: secagem, torra e resfriamento. Durante a primeira fase, a maior parte da água do grão é eliminada. Na segunda fase, diversas reações pirolíticas transformam os precursores em os compostos responsáveis pelo sabor e aroma na bebida. Na última fase, o grão é resfriado para deter as reações exotérmicas e determinar o nível de torra (ILLY e VIANI, 1995).

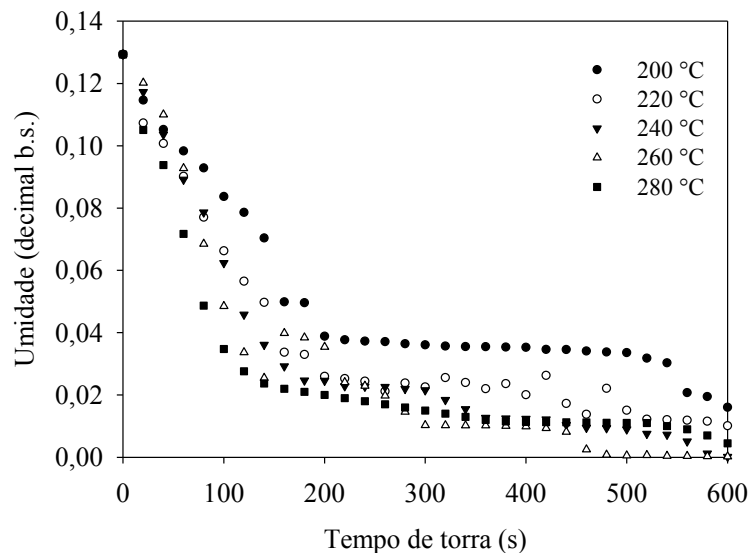


Figura 1. Conteúdo de umidade do grão de café em função do tempo de torra para diferentes temperaturas de processo.

Aproximadamente 90% da perda de massa durante a torra correspondem a água e 72% dela correspondem a umidade inicial do grão de café. Os outros 18% correspondem a água formada durante as reações de pirólise. Os 10% da perda total correspondem principalmente a CO₂ e pequenas quantidades de compostos voláteis de aroma que se formam e são liberados durante o processo (ILLY e VIANI, 1995). Concordando com Geiger (2004), Vargas-Elías (2011) e Botelho (2012), o teor de água variou na mesma proporção da perda de massa do grão independente da temperatura de torra até atingir o ponto de torra médio claro (Figura 2). Esta tendência obedece que a perda de massa no início do processo é constituída principalmente por água. Observa-se também que depois deste ponto a perda de massa é maior nas altas temperaturas para um teor de água

aproximadamente constante, indicando perda de matéria seca. A perda de massa total, exceto para 200 °C, foi superior ao valor que indica o nível de torra escuro (20 %). Lembrando-se que o tempo de 10 min foi estabelecido só com fins da modelagem matemática.

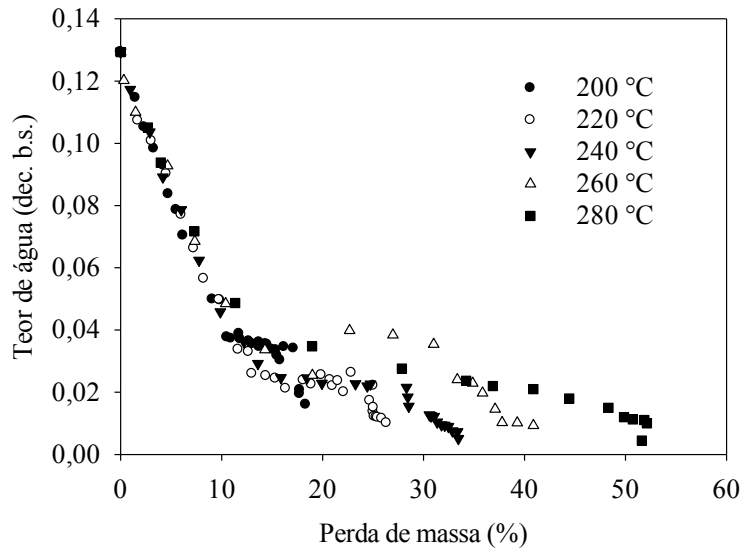


Figura 2. Teor de água do grão de café em função da perda de massa durante o processo de torrefação.

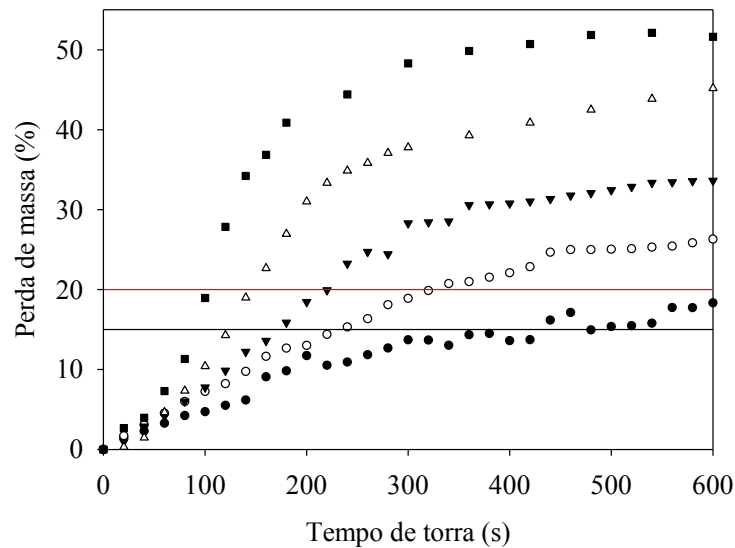


Figura 3. Perda de massa do grão de café durante o processo de torrefação.

A perda de massa do grão em função do tempo de torra está representada na Figura 3. As linhas preta e vermelha correspondem ao nível de torra médio e escuro respectivamente. Observou-se uma acelerada perda de massa nas temperaturas de 260 e 280 °C até atingir um valor aproximado de 30%, quando tende a se estabilizar. Para as

outras temperaturas observou-se um comportamento linear até um valor aproximado de 15%, depois do qual a taxa de perda de massa tende a diminuir. Um comportamento similar foi observado por Hernandez et. al. (2007) para temperaturas de torra entre 190 e 300 °C. Durante a torra de café arábica, Franca et. al. (2009) relacionaram essa variação da taxa de perda de massa à transição da etapa de secagem para a de torrefação e observaram uma maior perda nas temperaturas de torrefação altas.

Wang e Lim (2013) estudaram também a perda de massa para temperaturas de torrefação entre 220 e 250 °C encontrando duas etapas separadas pelo nível de torra média. Para a primeira etapa determinaram uma energia de ativação de 53,49 kJ mol⁻¹ em quanto para a segunda este valor foi de 184,15 kJ mol⁻¹, indicando uma maior dependência da temperatura para a segunda etapa.

Vargas-Eliás (2011) correlacionou a perda de massa total com os níveis de torrefação encontrando alta correspondência. Na Figura 4 observa-se o tempo necessário para atingir os diferentes níveis de torra em diferentes temperaturas de processo. Para temperaturas de torra altas (260 e 280 °C) a diferença de tempo entre um nível de torra e outro é inferior a 30 s, dificultando o controle de ponto final. Illy e Viani (1995) afirmam que é necessário 1000 – 1500 kJ kg⁻¹ de café para o aquecimento durante a torra e esta energia é aproximadamente igual para atingir o mesmo nível de torra, pois na maior temperatura menor é o tempo de processo, concordando com Botelho (2012).

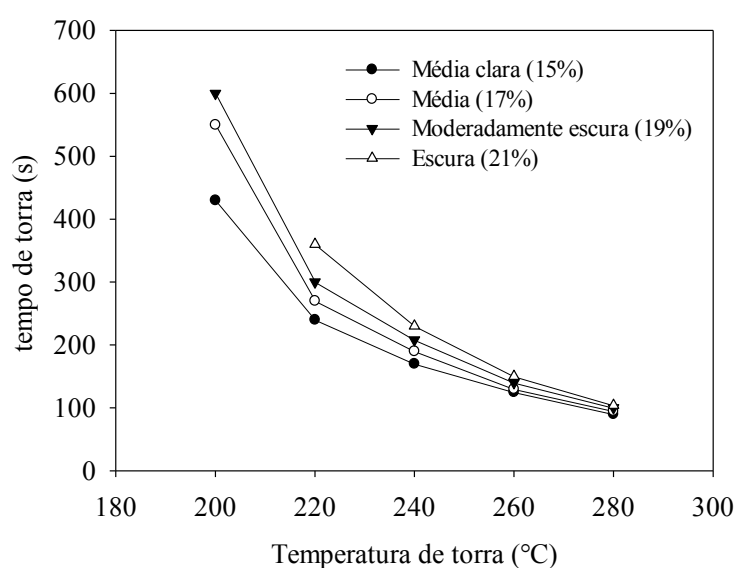


Figura 4. Tempo de processo para atingir diferentes níveis de torra.

A expansão volumétrica é função principalmente da pressão acumulada pela rápida formação de vapor de água e CO₂ no interior do grão e pode atingir valores entre 40 e 60% para perdas de massa de 18% (ILLY e VIANI, 1995). Concordando com os autores, na Figura 5 pode se observar que a expansão se inicia depois do grão atingir 100 °C devido a rápida liberação de vapor de água e ao início das reações exotérmicas e geração de CO₂. Isto também foi observado por Botelho (2012). Um modelo empírico foi desenvolvido para explicar a evolução da expansão em função da temperatura do grão (Equação 1.15). Os valores dos parâmetros são apresentados na Tabela 2. Partindo de um volume inicial médio do grão de 0,143 ml, observou-se uma expansão máxima de 62, 72, 77, 84 e 87% para as temperaturas de 200, 220, 240, 260 e 280 °C respectivamente, quando o grão atingiu uma perda de massa de aproximadamente 20% (Figura 6). A situação anterior indica uma maior expansão durante a torra em altas temperaturas. A modelagem do fenômeno de expansão volumétrica foi feita em função da umidade do grão, procurando uma variável que possa ser inserida no balanço de energia a ser estudado no capítulo seguinte desta dissertação. Na Tabela 3 estão apresentados os valores dos parâmetros estimados pelos modelos ajustados para a expansão volumétrica unitária do grão em função da umidade, para cada temperatura de torra.

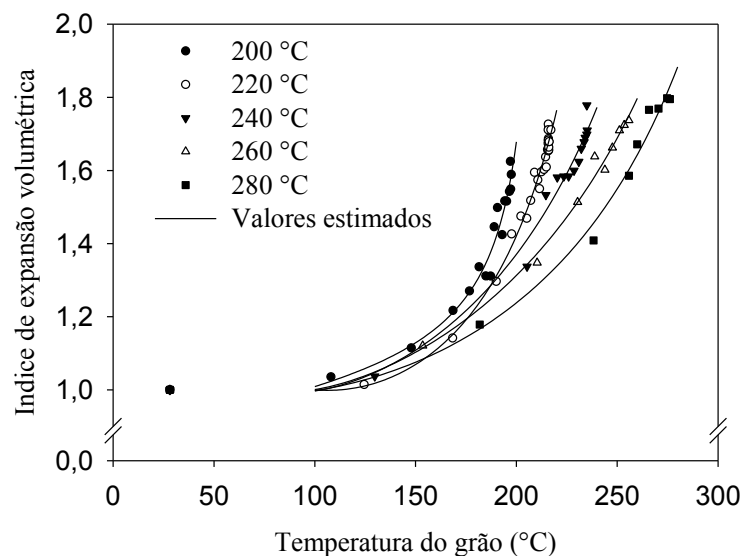


Figura 5. Índice de expansão volumétrica do grão de café em função da temperatura do grão para diferentes temperaturas de processo.

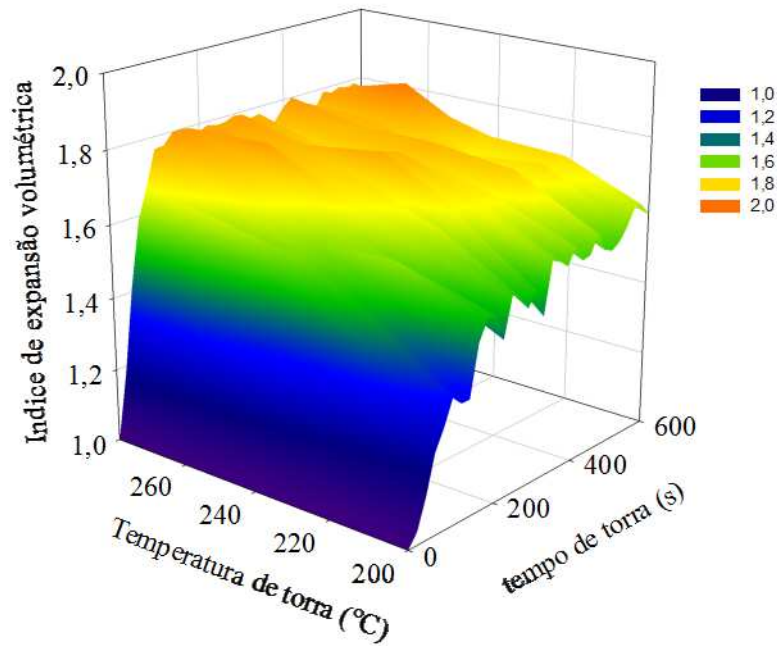


Figura 6. Índice de expansão volumétrica do grão de café em função da temperatura e tempo de torra.

Tabela 2. Modelo empírico para o Índice de expansão volumétrica em função da temperatura do grão.

Modelo	T_a	a	b	c	d
$\psi = \frac{a + bT}{1 + cT + dT^2}$ (1.15)	200 °C	$8,807 \times 10^{-1}$	$-3,88 \times 10^{-3}$	$-5,54 \times 10^{-3}$	$4,298 \times 10^{-6}$
	220 °C	1,7247	$8,233 \times 10^{-4}$	$1,448 \times 10^{-2}$	$-6,42 \times 10^{-5}$
	240 °C	4,4492	$7,875 \times 10^{-2}$	$1,585 \times 10^{-1}$	$-4,49 \times 10^{-4}$
	260 °C	1,3500	$7,02 \times 10^{-3}$	$1,553 \times 10^{-2}$	$-4,90 \times 10^{-5}$
	280 °C	1,0463	$1,628 \times 10^{-3}$	$3,704 \times 10^{-3}$	$-1,58 \times 10^{-5}$

em que:

T = temperatura do grão (°C);

ψ = índice de expansão volumétrica.

Tabela 3. Parâmetros estimados pelos modelos de expansão de café torrado com seus respectivos coeficientes de determinação (R^2), erro médio estimado (SE) e erro médio relativo (P).

Modelo	$T_a(^{\circ}C)$	a	b	P	SE	R^2
Corrêa 2004	200	-2,20	2,76	2,60	0,047	0,962
	220	-2,12	2,67	3,36	0,061	0,952
	240	-1,51	2,07	4,09	0,081	0,911
	260	-1,13	1,68	4,22	0,090	0,883
	280	-1,59	2,12	3,79	0,078	0,11
Exponencial	200	1,76	-4,04	2,40	0,044	0,966
	220	1,81	-4,13	3,05	0,056	0,960
	240	1,79	-3,37	3,89	0,076	0,922
	260	1,81	-2,85	4,11	0,086	0,894
	280	1,88	-3,59	3,57	0,073	0,923
Linear	200	1,73	-5,49	2,21	0,041	0,971
	220	1,78	-5,97	2,60	0,050	0,968
	240	1,78	-5,14	3,56	0,069	0,936
	260	1,81	-4,56	3,84	0,080	0,910
Polinomial	280	1,87	-5,71	3,19	0,065	0,940
	200	20,25	-175,1	7,58	0,144	0,551
	220	29,25	-259,38	14,61	0,266	0,000
	240	33,87	-289,09	18,86	0,365	0,000
	260	33,94	-273,01	23,10	0,483	0,000
Rahman	280	43,67	-375,23	18,18	0,350	0,000
	200	5,67		2,14	0,042	0,970
	220	6,10		2,58	0,050	0,968
	240	6,22		3,66	0,080	0,913
Bala e Woods	260	6,51		4,92	0,113	0,810
	280	6,89		3,27	0,075	0,918
	200	1,54	53,09	6,94	0,199	0,000
	220	1,68	37,55	5,71	0,192	0,277
Woods	240	1,69	59,00	6,59	0,199	0,000
	260	1,73	130,27	5,94	0,197	0,000
	280	1,79	42,75	4,37	0,188	0,114

De acordo com a Tabela 3, observou-se que os modelos testados não representaram adequadamente o fenômeno em todas as temperaturas de processo. Pelo anterior, foi proposto o modelo nominado Copace 2014 (Equação 1.16).

$$\psi = \frac{1}{1 + a(X_0 - X) + b(X_0 - X)^2} \quad (1.16)$$

O modelo representou de forma aceitável o fenômeno de expansão do grão de café, uma vez que ele apresentou coeficientes de determinação superiores a 93% e valores reduzidos do erro médio estimado e do erro médio relativo (Tabela 4). Observou-se também que os parâmetros a e b do modelo apresentam uma relação linear ($r^2=97\%$ e

$r^2=96\%$ respectivamente) com a temperatura de torrefação (Figura 7), de modo que uma equação geral foi obtida como uma função da temperatura de torra e umidade do grão (Equação 1.17).

Tabela 4. Parâmetros estimados para o modelo Copace 2014 com seus respectivos coeficientes de determinação (R^2), erro médio estimado (SE) e erro médio relativo (P).

Modelo	$T_a(^{\circ}C)$	a	b	P	SE	R^2
Copace (2014)	200	-5,57	19,74	2,15	0,041	0,971
	220	-6,12	22,58	2,25	0,045	0,974
	240	-7,34	32,42	2,59	0,054	0,961
	260	-7,87	35,52	2,87	0,069	0,934
	280	-8,43	40,07	1,30	0,032	0,986

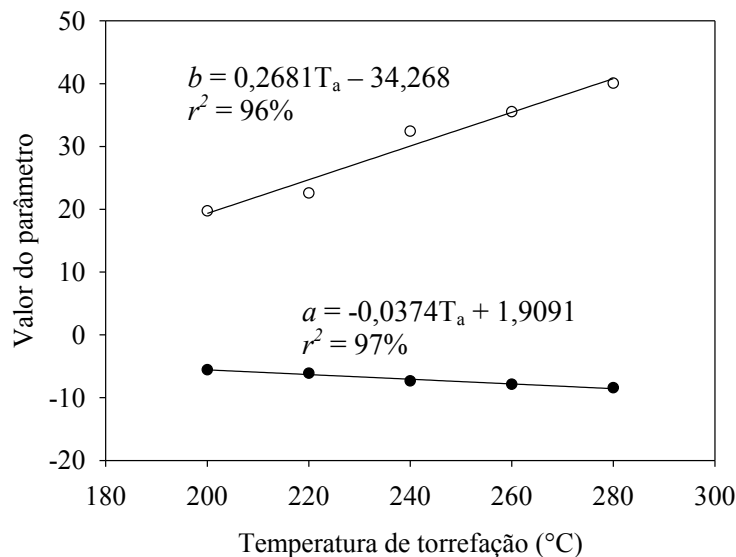


Figura 7. Parâmetros do modelo Copace 2014 para expansão volumétrica em função da temperatura de torrefação.

$$V = V_0 \left(\frac{1}{1 - (0,0374T_a - 1,9091)(X_0 - X) + (0,2681T_a - 34,268)(X_0 - X)^2} \right) \quad (1.17)$$

Nas Figuras 8 e 9 se observam a correspondência dos dados observados e estimados pelo modelo geral (Equação 1.17) assim como a distribuição dos resíduos. Pode se observar a não tendenciosidade do modelo.

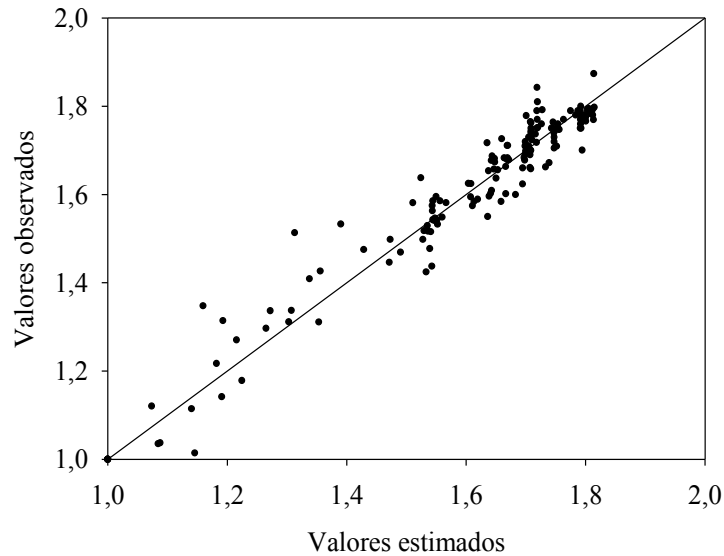


Figura 8. Correspondência dos valores observados e estimados pelo modelo Copace 2014 para a expansão volumétrica.

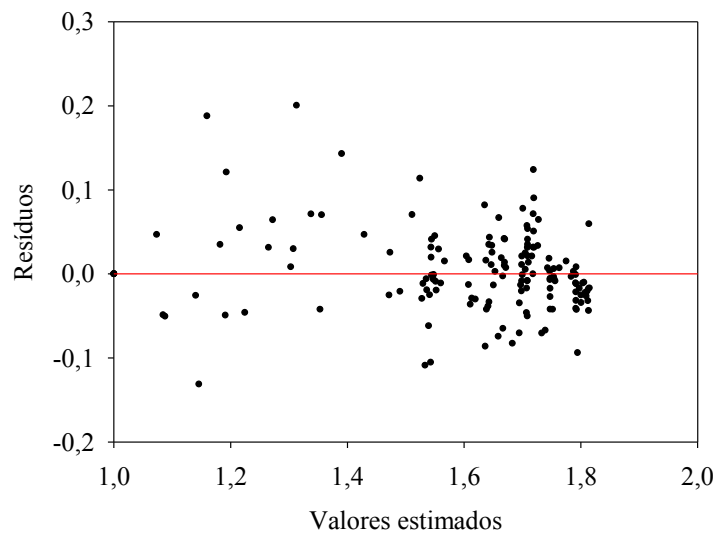


Figura 9. Distribuição dos resíduos dos valores estimados pelo modelo Copace 2014 para a expansão volumétrica.

A evolução nas dimensões dos eixos do grão (a, b e c) durante a torra foi dependente da temperatura observando-se um maior incremento do eixo b para temperatura de 200 °C. Quando as temperaturas ultrapassaram 220 °C, o incremento dos eixos foi proporcional, podendo-se considerar a expansão como isotrópica (Figura 10). Geiger (2004) fez monitoramento on-line dos gases de saída do torrador usando análise infravermelho não dispersivo. O autor estabeleceu a evaporação da umidade inicial no primeiro estágio do processo como a principal força motriz para a expansão volumétrica. Esta força motriz é

então maior para processos em altas temperaturas, concordando com vários autores (SCHENKER, 2000; VARGAS-ELIAS, 2011; BOTELHO, 2012) que concluíram que estas condições de processo levam a altas taxas de expansão.

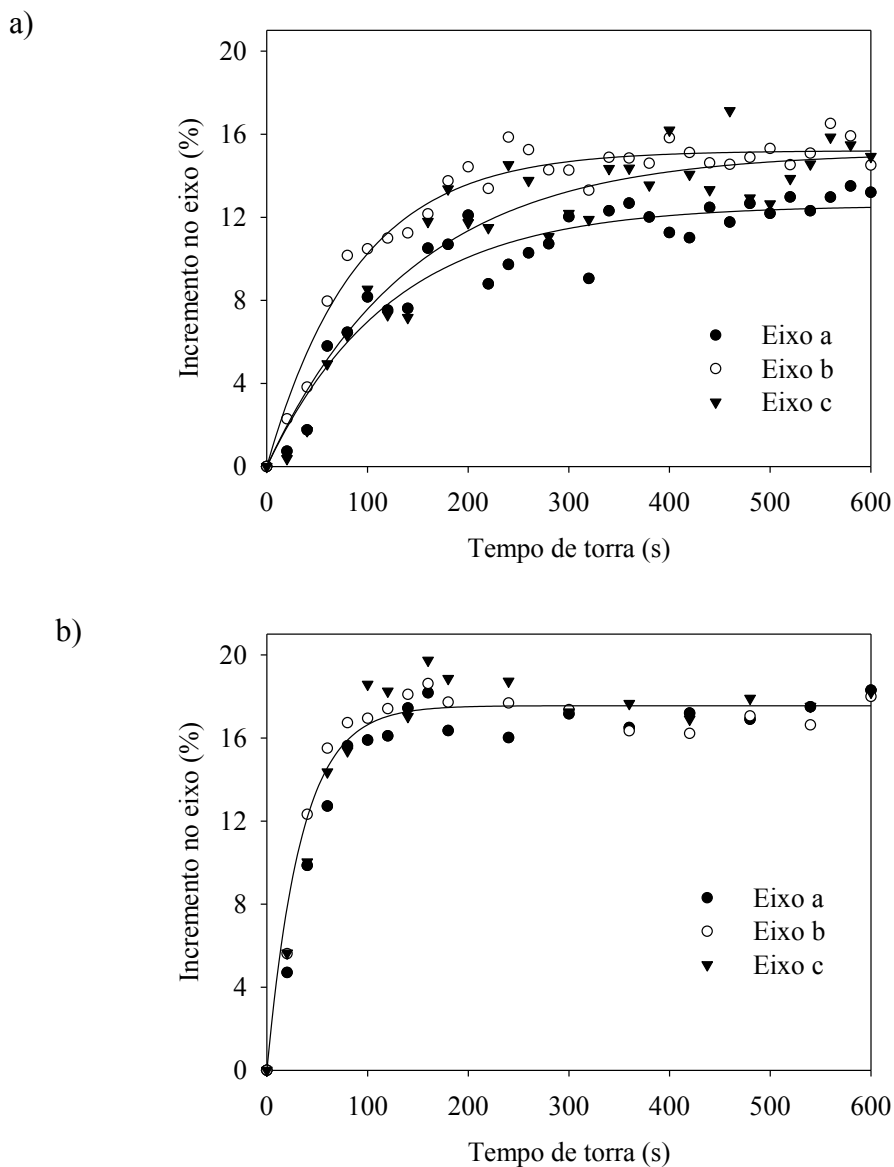


Figura 10. Aumento médio (%) dos eixos durante a torra. a) 200 °C b) 280 °C.

Em concordância com o aumento de volume, o incremento da área superficial do grão foi maior nas altas temperaturas. O grão analisado, de área superficial média de 163,02 mm², apresentou incrementos de 37 até 50% nesta dimensão, sendo maior o incremento na temperatura de 280 °C (Figura 11). Hernández (2002) observou incrementos na superfície do grão entre 15 e 65% para temperaturas de torra entre 200 e 300 °C respectivamente durante 10 minutos de processo. Na Tabela 5 apresentasse os valores dos

parâmetros estimados pelo modelo Copace 2014 com seus respectivos parâmetros estatísticos.

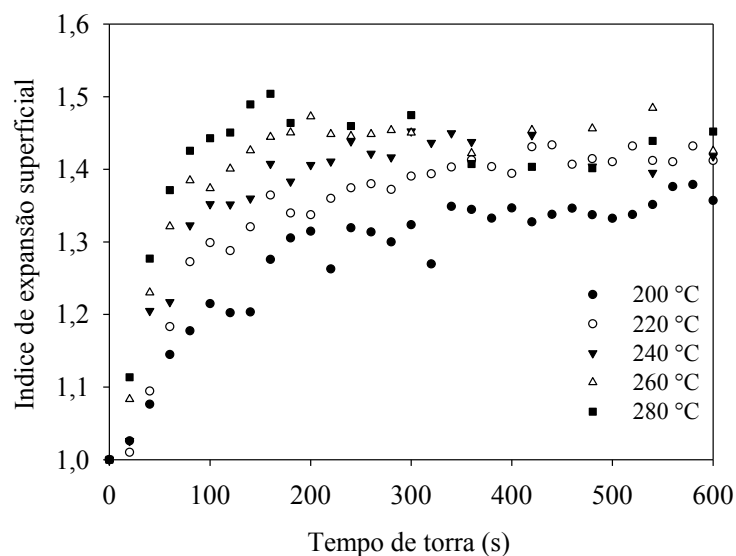


Figura 11. Índice de expansão superficial do grão de café em função do tempo de torra para diferentes temperaturas de processo.

Tabela 5. Parâmetros estimados pelo modelo Copace 2014 para expansão superficial do grão de café torrado com seus respectivos coeficientes de determinação (R^2), erro médio estimado (SE) e erro médio relativo (P).

Modelo	Equação	$T_a(^{\circ}C)$	a	B	P	SE	R^2
Copace 2014 (1.18)	$\Delta S = \frac{1}{1 + a(X_0 - X) + b(X_0 - X)^2}$	200	-3,94	13,92	1,35	0,023	0,974
		220	-4,45	16,85	1,63	0,030	0,968
		240	-5,48	25,40	1,77	0,032	0,968
		260	-6,31	31,31	2,47	0,050	0,918
		280	-6,50	33,23	1,77	0,030	0,977

Os parâmetros a e b estimados na Tabela 4 apresentaram correlação linear com a temperatura de torra (Figura 12) pelo que uma equação geral foi deduzida:

$$\Delta S = \left(\frac{1}{1 - (0,035T_a - 3,0611)(X_0 - X) + (0,2654T_a - 39,562)(X_0 - X)^2} \right) \quad (1.19)$$

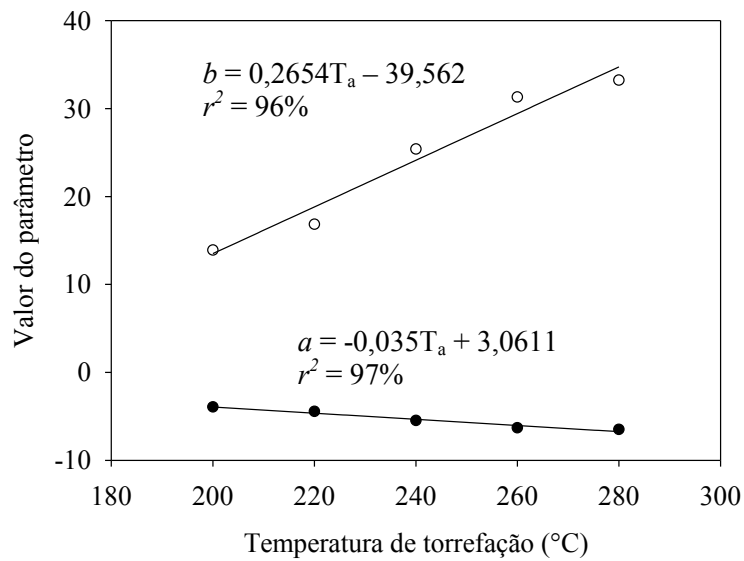


Figura 12. Parâmetros do modelo Copace 2014 para expansão superficial em função da temperatura de torrefação.

Nas figuras 13 e 14 se observa uma aceitável correspondência entre os valores observados e estimados pelo modelo (Equação 1.19) assim como a aleatoriedade do mesmo.

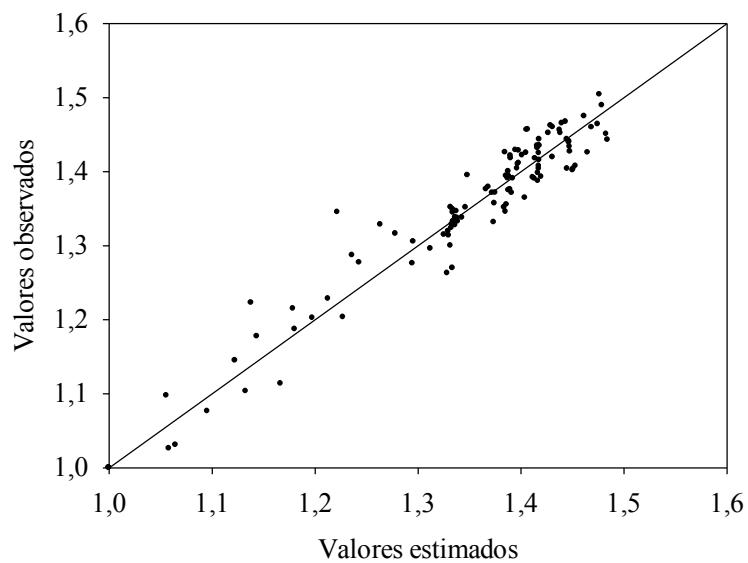


Figura 13. Correspondência dos valores observados e estimados pelo modelo Copace 2014 para a expansão superficial.

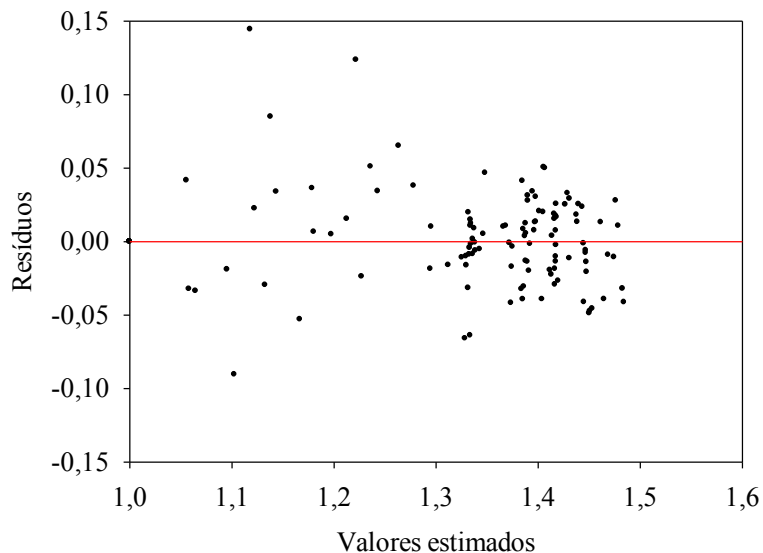


Figura 14. Distribuição dos resíduos dos valores estimados pelo modelo Copace 2014 para a expansão superficial.

Uma vez que a massa específica unitária é em função do volume e massa do grão, uma significativa redução no valor desta propriedade observou-se para todas as temperaturas de torrefação durante o tempo de processo. Partindo de um grão com 1150 kg m^{-3} , a massa específica atingiu valores finais de 600, 540, 480, 360 e 320 kg m^{-3} para as temperaturas de 200, 220, 240, 260 e $280 \text{ }^\circ\text{C}$, respetivamente (Figura 15a). Vargas-Elías (2011) calculou médias gerais da massa específica unitária para os níveis de torra média clara, média, moderadamente escura e escura de 667, 628, 580 e 528 kg m^{-3} respectivamente. Os valores atingidos ao final dos 10 min de torra indicam para as temperaturas altas, torras muito escuras, lembrando que este excesso de tempo foi estabelecido só para fins de modelagem.

A massa específica do grão variou linearmente com o conteúdo de umidade apresentando uma maior taxa de variação nas altas temperaturas devido à rápida perda de umidade e maior índice de expansão nestas condições (Figura 15b), concordando com Vargas-Elías (2011) e Horta et. al. (2014). A Tabela 6 apresenta os valores dos parâmetros da regressão para cada temperatura e seus respetivos coeficientes de correlação. Baggenstoss (2008) e Vargas-Elías (2011) observaram um comportamento linear entre a diminuição da massa específica unitária e o incremento da temperatura dos grãos.

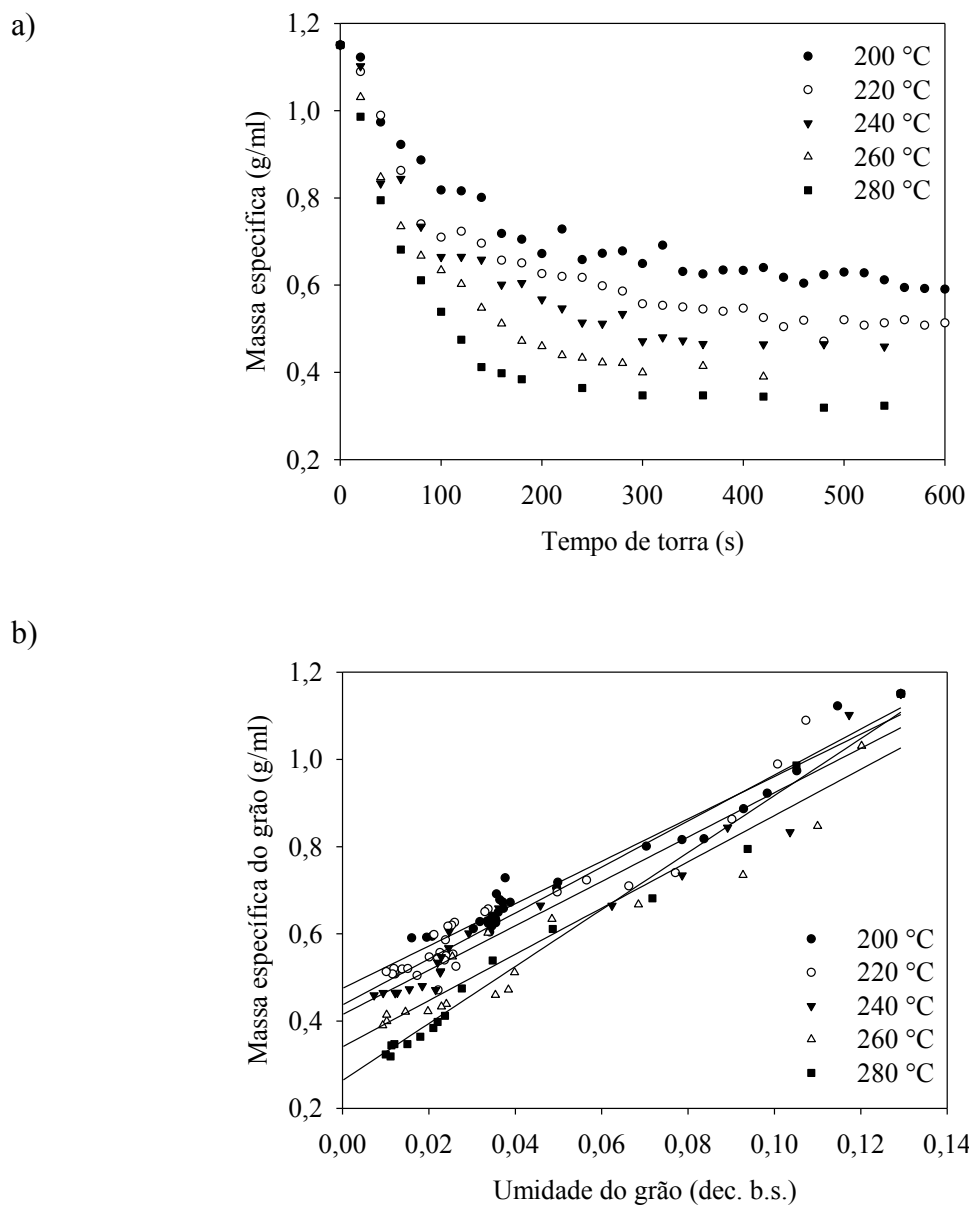
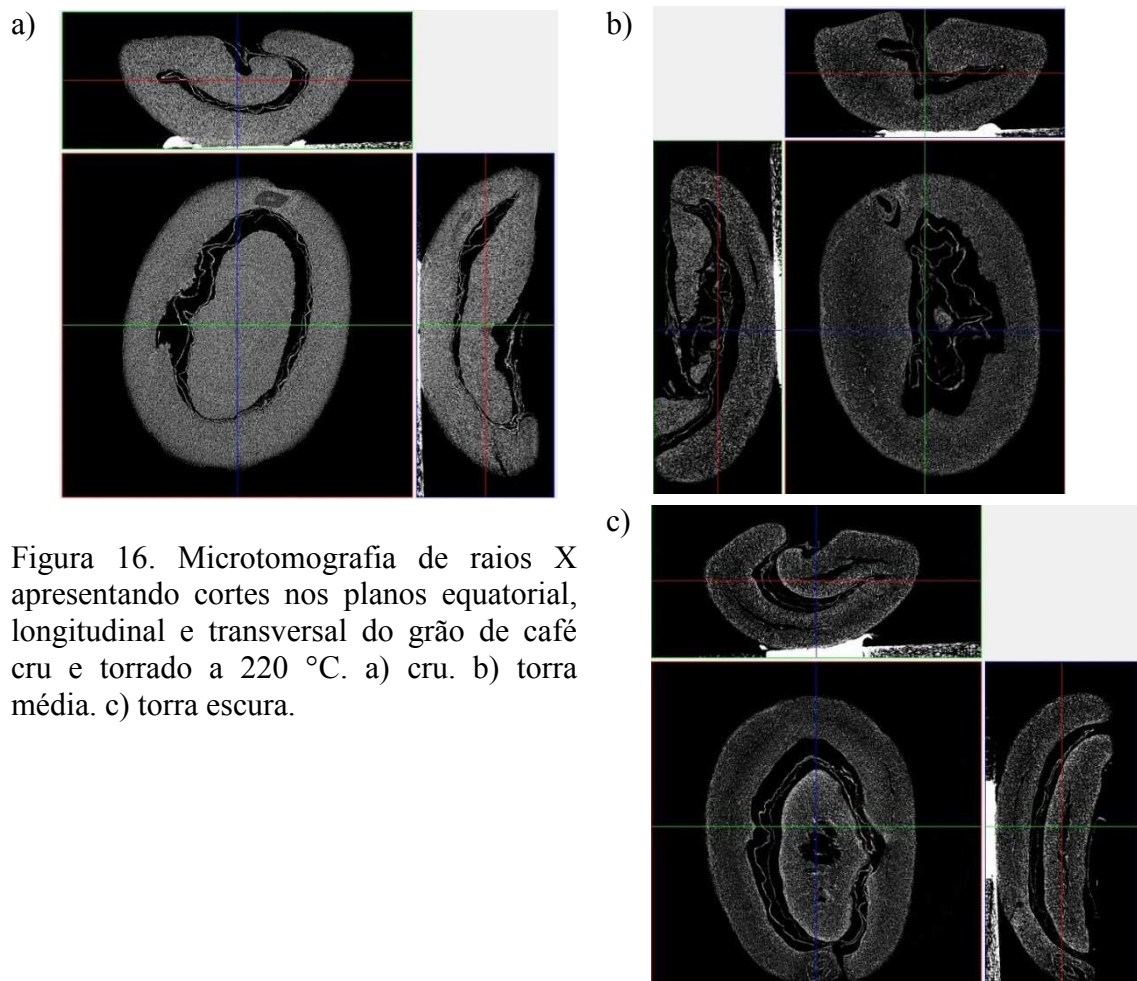


Figura 15. Variação da massa específica do grão durante o processo de torrefação. a) em função do tempo de torra; b) em função da umidade do grão.

Tabela 6. Regressão linear para os valores de massa específica (ρ) em função da umidade do grão.

Temperatura de torra (°C)	Equação	r^2
200	$\rho = 4858,4X + 475,2$ (1.20)	0,951
220	$\rho = 5272,6X + 437,8$ (1.21)	0,936
240	$\rho = 5087,2X + 415,5$ (1.22)	0,9346
260	$\rho = 5303,1X + 341,1$ (1.23)	0,9319
280	$\rho = 6530,2X + 264,9$ (1.24)	0,9806

Na Figura 16 observa-se a evolução de um grão de café torrado a 220 °C. No estado inicial (Figura 16a) o grão cru apresenta uma estrutura compacta e pode se identificar uma cavidade interna vazia (espaço negro) formada durante o desenvolvimento da semente. Nesta cavidade será acumulado parte do vapor de água e CO₂ gerados durante a torra levando ao aumento da pressão interna e, conseqüentemente, a expansão do grão. A pressão interna em cada célula pode ser comparada a uma autoclave suportando 25 bar (Illy e Viani, 1.995). Quando o grão atinge uma perda de massa de 15% (Figura 16b) sua microestrutura se torna mais porosa (maior quantidade de pontos negros) e finalmente, quando o grão continua perdendo massa (na forma de vapor de água, CO₂ e compostos voláteis), a estrutura não suporta o aumento da pressão e o grão quebra (Figura 16c). Estes resultados concordam com Laverse et. al. (2012) que usaram μ CT para avaliar o efeito do tempo de torra no volume e quantidade de poros gerados no interior do grão de café arábica submetido a processo de torrefação a 220 °C. Eles observaram que a microestrutura se modifica consideravelmente quando o tempo de torra atinge os 2 min: um marcado aumento no volume e número total de poros. Neste tempo a perda de massa é aproximadamente 10% e pode coincidir com o início das reações exotérmicas.



Diversos autores analisaram a estrutura interna do grão. Geiger (2004) determinou que a desSORÇÃO de gás e migração de óleo durante o armazenamento dependem do volume final atingido pelo grão de café. Os grãos menores liberaram menor quantidade de CO₂ e óleo na superfície. O autor estabeleceu que uma moderada taxa de incremento de temperatura e umidade inicial baixa do produto, podem ser benéficos para o desenvolvimento da estrutura do grão, o que resulta em uma melhora na retenção de aroma durante o armazenamento. Resultados similares foram concluídos por Schenker et. al. (2000): processos a altas temperaturas levam a grandes poros nas paredes celulares quando comparados com o processo em baixas temperaturas. O maior tamanho dos poros promove a rápida desgaseificação, a migração de óleo e a acessibilidade do oxigênio, acelerando a perda dos componentes responsáveis pelo aroma.

Ramirez-Martinez et. al. (2010) e Wang (2012) usaram microscopia óptica e eletrônica para estudar a estrutura interna e o transporte de água no interior do grão de café, realizando cortes longitudinais e transversais confirmando a heterogeneidade da estrutura celular nas duas direções. Os autores realizaram testes de equilíbrio higroscópico e secagem para determinar valores do coeficiente de difusão em diferentes partes do grão encontrando diferenças entre a capa externa (lignocelulósica) e o endosperma. Assim como a difusão de umidade é afetada pela microestrutura do grão, pode se esperar que a difusão e a condutividade térmica diminuam durante o processo de torra devido ao incremento da porosidade da microestrutura como se observa na Figura 16. Os poros formados pela geração e liberação de gases durante a torra constituem uma resistência à transferência de calor por condução pois o ar dentro deles age como isolante térmico. Na Figura 17 se observam as mudanças estruturais do grão após da torra.

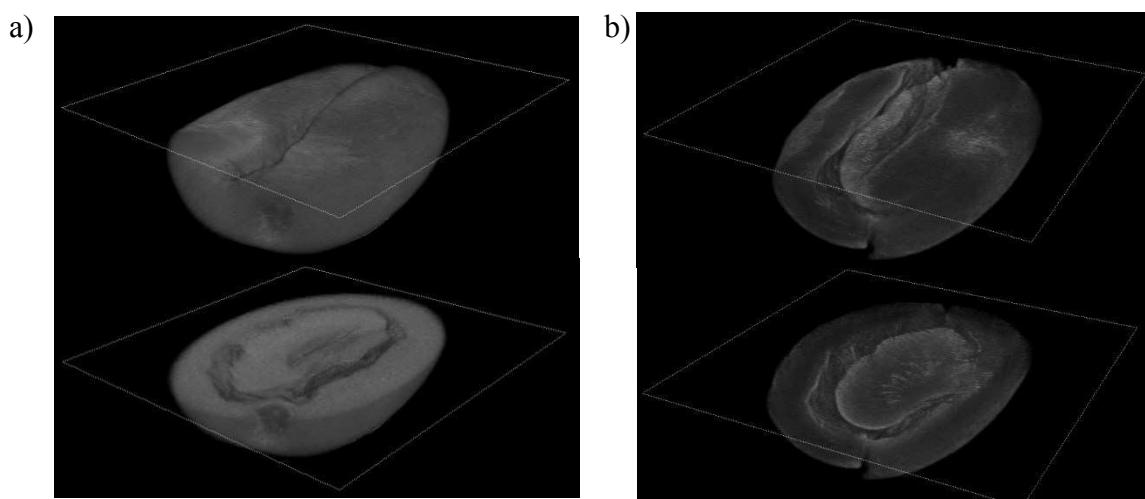


Figura 17. Microtomografia de raios X de um grão de café. a) cru b) torrado

1.4 CONCLUSÃO

A temperatura de torrefação afetou as propriedades físicas do grão de café. Observou-se uma maior expansão volumétrica e superficial assim como uma diminuição mais acentuada da massa específica nos grãos torrados em altas temperaturas. A evolução nas dimensões dos eixos do grão (a, b e c) durante a torra foi dependente da temperatura observando-se um maior incremento do eixo b para temperatura de 200 °C. Quando as temperaturas ultrapassaram 220 °C, o incremento dos eixos foi proporcional, podendo-se considerar a expansão como isotrópica. A massa específica diminuiu linearmente com a umidade do grão, com uma queda mais pronunciada nas altas temperaturas de processo. Foram desenvolvidos modelos empíricos para estimar a variação do volume, área superficial e massa específica em função da umidade do grão obtendo um ajuste aceitável aos dados experimentais. O modelo Copace 2014 apresentou o melhor ajuste. Foi desenvolvido um modelo empírico para estimar o índice de expansão volumétrica em função da temperatura do grão. A análise da microestrutura do grão usando microtomografia de raios X, foi feito só de forma qualitativa. Para estudos futuros se recomenda realizar um estudo quantitativo usando esta técnica, procurando entender e estimar a porosidade, sua evolução durante a torra e seus efeitos sobre as propriedades térmicas do grão.

1.5 REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

- Baggenstoss, Jurg. 2008. *Coffee Roasting and Quenching Technology – Formation and Stability of Aroma Compounds*. Zurich, Swiss. [Doctor's dissertation]: ETH Zurich.
- Borém, F., Garcia, T., Amaral, E. 2014. "Anatomy and chemical composition of the coffee fruit and seed". In *Handbook of coffee post-harvest technology*, 282.
- Botelho, F. M. 2009. *Absorção de água por grãos de milho com diferentes níveis de danificação mecânica*. Viçosa, Brasil. [Tese de Mestrado]: Universidade Federal de Viçosa.
- Botelho, F. M. 2012. *Cinética de secagem, propriedades físicas e higroscópicas dos frutos e caracterização de processo de torrefação dos grãos de coffea canephora*. Viçosa, Brasil. [Tese de Doutorado]: Universidade Federal de Viçosa.
- Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA). "Comunicado Técnico 58: A importância da informação sobre do grau de torra do café e sua influência nas características organolépticas da bebida" 2004.
- França, A. S., Oliveira, L. S., Oliveira, R. C., Agresti, P. C. M. A., Augusti, R. "A preliminary evaluation of the effect of processing temperature of coffee roasting degree assessment." *Journal of food engineering*, v. 92 (3), p. 345 - 352, 2009.
- Fundação Ezequiel Dias (FUNED). "Atlas de microscopia - Café torrado e moído (*Coffea sp*)" 2012.
- Geiger, R. 2004. *Development of coffee bean structure during roasting - Investigations on resistance and driving forces*. Zurich, Swiss. [Doctor's Dissertation]: Swiss Federal Institute of Technology Zurich.
- Hernández, J. A. 2002. *Étude de la torrification: modélisation et détermination du degré de torrification du café en temps réel*. Paris, Francia. [Thèse pour Docteur de L'ensia]: École Nationale Supérieure des Industries Agricoles et Alimentaires.
- Hernández, J. A., Heyd, B., Irls, C., Valdovinos, B., e Trystram, G. "Analysis of the Heat and Mass Transfer during Coffee Batch Roasting." *Journal of Food Engineering* 78 (4): 1141–48. 2007.
- Horta de Oliveira, G. H., Corrêa, P. C., Santos, F., Vasconcelos, W., Calil, C., Machado, F., Vargas-Elías, G. A. "Caracterização física de café após torrefação e moagem" *Ciências Agrárias* 35 (4): 1813 – 1828. 2014.
- Illy, A., Viani, R. **Espresso Coffee: The Chemistry of Quality**. London: Academic Press, 253. 1995.
- Instituto Adolfo Lutz. Normas analíticas do instituto Adolfo Lutz: **Métodos físico-químicos para análise de alimentos**, 1ª edição digital. São Paulo, 2008. Cap 4, p. 83 - 158.

- Laverse, J., Frisullo, P., Conte, A., Del Nobile, M. 2012. "X ray microtomography for food quality analysis". In *Food Industrial Processes - Methods and Equipment*, 418.
- Mendonça, J., França, A., Oliveira, L. "Physical characterization of non-defective and defective arabica and robusta coffees before and after roasting." *Journal of Food Engineering* 92: 474 - 479. 2009.
- Mohsenin, N. N. **Physical properties of plants and animals materials**. New York: Gordon and Breach Science Publishers, 730 p. 1986.
- Oliveira, L., França, A., Mendonça, J., Barros-Júnior, M. "Proximate composition and fatty acids profile of green and roasted defective coffee beans." *LWT* 39 : 235 - 239. 2006.
- Ramírez, C., Germain, J., Aguilera, J. "Image analysis of representative food structures: Application of the Bootstrap method". *Journal of Food Science* 74 (6), 65 - 72. 2009.
- Ramirez-Martinez, A., Benet, J., Cherblanc, F., Garcia-Alvarado, M., Rodriguez-Jimenes, G. "Internal structure and water transport in the coffee bean". 17th International Drying Symposium (IDS 2010), 2010, Magdeburg, Germany. pp.1-8.
- Schenker, Stefan. 2000. *Investigations on the Hot Air Roasting of Coffee Beans*. Zurich, Swiss. [Doctor's dissertation]: Swiss Federal Institute of Technology.
- Schenker, S., Hanschin, S., Frey, B., Perren, R., Escher, F. "Pore structure of coffee beans affected by roasting conditions". *Journal of Food Science* 65 (3): 452 - 457. 2000.
- Vargas-Elías, G. A. 2011. *Avaliação das propriedades físicas e qualidade do café em diferentes condições de torrefação*. Viçosa, Brasil. [Dissertação de Mestrado]: Universidade Federal de Viçosa.
- Wang, N. 2012. *Physicochemical changes of coffee beans during roasting*. Guelph, Canada. [Master's dissertation]: The University of Guelph.
- Wang, X., Lim, L.T. "A Kinetics and Modeling Study of Coffee Roasting Under Isothermal Conditions". *Food Bioprocess Technology* 7: 621 - 632. 2013.

CAPITULO 2

Modelagem da transferência de calor e massa do grão de café durante o processo de torrefação

RESUMO

Objetivou-se com este trabalho desenvolver um modelo físico capaz de estimar a distribuição de temperatura do grão de café durante o processo de torrefação levando em conta a variação das propriedades termofísicas e o calor gerado (endotérmico pela evaporação e exotérmico pelas reações). Grãos individuais de café arábica com teor de água inicial de $0,129 \text{ kg}_a \text{ kg}_{ms}^{-1}$ foram torrados, em um equipamento de queima de gás direto com cilindro rotativo a 45 rpm. Foram fixadas 5 temperaturas do ar no interior do cilindro (200, 220, 240, 260 e 280 °C). A temperatura do grão foi registrada a cada 5 s por um termopar inserido no centro de cada grão. A convecção e a radiação foram os tipos de transferência de calor que dominaram o processo. Foi desenvolvido um modelo matemático considerando as variações de temperatura tempo (análise concentrada) e um modelo considerando também as variações na direção radial. Os modelos foram discretizados pelo método das diferenças finitas. O fluxo de calor foi proporcional ao coeficiente global de transferência de calor envolvendo a convecção e a radiação. O modelo foi ajustado aos dados experimentais de temperatura do grão e calculou-se o coeficiente global de transferência para cada temperatura de processo. Os valores do coeficiente global variaram entre 60 e 110 $\text{W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ para a análise concentrada e entre 70 e 160 $\text{W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ para a análise temporal e espacial. As temperaturas estimadas pelo modelo mostraram um bom ajuste aos dados experimentais constituindo assim uma ferramenta complementar para o controle do processo em tempo real e para avaliar a influência das variáveis do processo na qualidade final do produto.

ABSTRACT

The aim of this paper was to develop a physical model able to estimate the coffee bean temperature during roasting process taking into account the variation of the thermophysical properties and the generated heat (endothermic by evaporation and

exothermic by reactions). Individual coffee beans with an initial water content of $0,129 \text{ kg}_a \text{ kg}_{ss}^{-1}$ were roasted in a direct gas burning equipment with rotating drum at 45 rpm. Five temperatures were set to air inside the drum (200, 220, 240, 260 and 280 °C). Each grain was roasted as a unit, being suspended in the drum center by a thermocouple which recorded the temperature every 5 seconds. Convection and radiation were the heat transfer mechanisms that dominated the process. A mathematical model was developed considering the time temperature variations (lumped analysis) and a model taking into consideration the variations in the radial direction. The models were discretized by the finite difference method. The heat flow was proportional to the overall coefficient of heat transfer involving convection and radiation. The model was fitted to the experimental data of bean temperature and calculated the overall transfer coefficient for each process temperature. The global coefficient values ranged between 60 and 110 $\text{W m}^{-2} \text{ }^\circ \text{C}^{-1}$ for lumped analysis and between 70 and 160 $\text{W m}^{-2} \text{ }^\circ \text{C}^{-1}$ for the temporal and spatial analysis. Temperatures estimated by the model showed a good fit to the experimental data thus constituting a complementary tool to control the real-time process and to evaluate the influence of process variables on the final quality of the product.

2.1 INTRODUÇÃO

A temperatura atingida pelo grão de café, consequência do acúmulo de calor transferido, representa o parâmetro mais importante do processo de torra e pode ser determinado a partir do tempo de torrefação (ILLY e VIANI, 1995). A evolução desta temperatura durante a torra determinará a qualidade sensorial e nutricional da bebida, pois afetará a velocidade e intensidade das reações que gerarão os compostos responsáveis pela cor e aroma do café, assim como a capacidade antioxidante da bebida, devido principalmente aos ácidos clorogênicos (SACCHETTI et al., 2009). Entre as bebidas na dieta humana, o café apresenta a maior atividade antioxidante e estudos recentes reportaram que é a maior fonte de antioxidantes na dieta dos EUA (PELLEGRINI, 2003).

Durante a torrefação, o conteúdo de ácidos clorogênicos diminui, sendo alguns incorporados dentro da melanoidina, que são compostos marrons formados pela reação de Maillard ou pela caramelização dos açúcares. No entanto, devido às propriedades antioxidantes da melanoidina, o processo de torra resulta em um aumento global no conteúdo antioxidante da bebida, com máxima atividade no nível de torra médio (GOODMAN et al., 2013). A torrefação de café também resulta na formação de quantidades substanciais de radicais livres e compostos indesejáveis como acrilamida, substância formada em processos a altas temperaturas pela reação entre carboidratos e asparagina. Estes compostos têm sido estudados como prováveis cancerígenos e seus conteúdos são influenciados por vários fatores, incluindo o teor de água dos grãos verdes antes da torrefação e pelo histórico da temperatura do grão durante o processo.

Diversos estudos têm sido realizados para tentar explicar e controlar a transferência de calor e massa durante a torra de café, que é um problema conjugado que envolve muitas variáveis. Vários autores modelaram o processo, assumindo diferentes simplificações dos fenômenos e considerando diferentes processos (em leito fluidizado e tambor rotativo) para conseguir solucionar os sistemas de equações (SCHENKER, 2000; SCHWARTZBERG, 2002; FRANÇA et al., 2002; BONNLANDER et al., 2005; HERNÁNDEZ et al., 2007; HERNÁNDEZ et al., 2008; BASILE e KIKIC, 2009; FABBRI et al., 2011; BOTTAZZI et al., 2012; ALONSO-TORRES et al., 2013). As principais simplificações são geralmente considerar as propriedades físicas constantes (calor específico, condutividade térmica, volume, área e massa específica), distribuição uniforme da umidade dentro do grão,

condições iniciais uniformes (temperatura, umidade) e calor gerado desprezível. Os modelos desenvolvidos procuram estimar a temperatura atingida pelo grão e em alguns casos, sua distribuição no interior do grão, como uma ferramenta de controle e otimização do processo.

Hernández et. al. (2008) simularam a variação do brilho e da área superficial de grãos de café durante a torra usando redes neurais artificiais, com a finalidade de projetar e construir um sensor inteligente para o controle da qualidade “on-line” do café durante a torra. Para estimar o brilho, os autores usaram a temperatura do grão e o tempo da torra, simuladas pelo modelo dinâmico proposto por Hernandez et al. (2007), como variáveis de entrada. Enquanto que para estimativa da área superficial usaram o tempo da torra e a temperatura do ar considerando uma expansão do grão isotrópica.

Fabbri et al. (2011) desenvolveram um modelo para descrever a transferência de calor e umidade no interior do grão durante a torra de café em um torrador de cilindro rotativo em condições de convecção natural. Foram comparadas duas geometrias, uma baseada na forma de um semi-elipsóide e outra usando a forma obtida por meio de um scanner 3D sobre o grão de café arábica. Para simular o processo considerou-se que: a umidade se difunde a través da superfície do grão e só evapora na superfície; o material do grão é homogêneo e isotrópico; a temperatura e umidade inicial do grão são uniformes; o calor produzido pelas reações exotérmicas é desprezível; o volume do grão é constante e o principal mecanismo de transferência é a convecção natural. O modelo foi validado comparando com dados experimentais.

Alonso-Torres et al. (2013) analisaram a transferência de calor e massa durante a torra em nível de grão individual e modelaram o perfil de temperatura na superfície e no centro do grão. Os autores usaram CFD (Computational Fluid Dynamics) para a simulação e validaram os modelos matemáticos comparando com dados experimentais. Nas variáveis do processo o volume do grão foi considerado constante. Vargas (2014) modelou a transferência de calor e massa durante a torrefação considerando as propriedades constantes e o calor gerado pelas reações desprezível. O autor estudou também a cinética da expansão aparente encontrando uma relação linear com o tempo de torra e de tipo Arrhenius com a temperatura.

No estudo dos fenômenos de transporte, os parâmetros adimensionais são de muita importância uma vez que estes tem uma interpretação física: relacionam condições de fluxo na camada limite e no interior do produto (Incropera, 2011). O número de Reynolds (Re) relaciona as forças de inércia e de atrito viscoso devido ao escoamento fluido. Assim, grandes valores de Re indicam que as forças de inércia são dominantes, em quanto menores valores de Re indica domínio de forças viscosas. O número de Prandtl (Pr) é uma propriedade do fluido que relaciona a magnitude dos transportes difusivos de momento e de calor. O número de Nusselt (Nu) relaciona a transferência de calor pela convecção e pela condução no fluido na interfase entre o fluido e a superfície, enquanto o número de Biot pode ser entendido como a relação entre a resistência térmica devido a condução no interior da matriz sólida e a resistência de convecção no fluido externo que escoar sobre a superfície da matriz.

Os complexos fenômenos que ocorrem na torrefação de café ainda precisam ser estudados e compreendidos em profundidade, considerando todas as variáveis que podem afetar o processo. O conhecimento profundo daqueles fenômenos auxiliará na obtenção de um café com elevado valor agregado (alta qualidade sensorial e nutricional) assim como na otimização e planejamento de equipamentos, além da redução de custos operacionais e experimentais. Este estudo objetiva acrescentar informações para melhor entendimento do processo de torrefação de café, desenvolvendo um modelo matemático para estimar a temperatura do grão de café em condições isotérmicas, levando em consideração a variação das propriedades físicas e sua influência na transferência conjugada de calor e massa.

2.2 MODELO MATEMÁTICO

Durante o processo de torrefação, a transferência de calor e de massa acontece simultaneamente. Os grãos são aquecidos pelo escoamento de gás quente e contato com as paredes do torrador, e em consequência o grão perde massa na forma de vapor de água, CO₂ e compostos voláteis. O calor pode ser transferido aos grãos por diferentes mecanismos (convecção, condução e radiação), dependendo do tipo de torrefador. Os principais tipos de torrefadores usados na indústria correspondem o de cilindro rotativo e de leito fluidizado, sendo a convecção o mecanismo predominante neste último. No cilindro rotativo, ainda que exista transferência de calor por condução entre os grãos e a parede do equipamento e entre os grãos, a convecção ocorre devido a movimentação gerada pela rotação do cilindro e a radiação devido a exposição do grão a superfície aquecida do tambor.

No presente estudo os principais mecanismos de transferência de calor atuando sobre o grão foram a convecção e a radiação, pois este ficou sustentado pelo termopar no centro do torrador, expondo sua superfície ao ar quente e à radiação emitida pelas paredes aquecidas do cilindro. Considerou-se o fluxo de calor proporcional ao coeficiente global de transferência de calor, envolvendo os dois mecanismos. Em alguns casos, quando a variação de temperatura no interior do sólido (resistência interna) é pequena quando comparada com a variação da temperatura entre o fluido e a superfície (resistência externa), pode-se considerar válida a análise concentrada, desprezando a variação espacial da temperatura no sólido e considerando unicamente a variação no tempo (Datta, 2002). Durante o processo de torrefação, a perda de massa é devido principalmente a evaporação de água seguida da geração e liberação de CO₂ e em menor medida aos compostos voláteis. Foram desenvolvidos dois modelos: o primeiro, considerando uma análise concentrada, e o segundo considerando também as variações espaciais de temperatura. Para a formulação matemática do problema foram feitas as seguintes simplificações:

- A temperatura e umidade iniciais no interior do grão são uniformes.
- A temperatura e umidade no interior do grão dependem apenas do tempo de processo (Modelo 1, análise concentrada).
- A temperatura e umidade no interior do grão dependem do tempo e da posição na direção radial (Modelo 2, condução unidimensional).

- A transferência de massa do grão para o ar acontece por convecção na forma de vapor na superfície do grão.
- Os principais mecanismos de transferência de energia para o grão são a convecção e a radiação e foram representados pelo coeficiente global de transferência de calor (h).
- A condutividade térmica do grão é constante.

2.2.1 EQUAÇÕES GOVERNANTES

Na Figura 1 está representado o volume de controle para um grão de café durante o processo de torrefação. Assim, o balanço global aplicando a primeira lei da termodinâmica, pode se escrever:

$$\dot{E}_e - \dot{E}_s + \dot{E}_g = \dot{E}_{ac} \quad (2.1)$$

em que:

\dot{E}_e = taxa de calor transferido ao grão (W);

\dot{E}_s = taxa de calor endotérmico devido à evaporação na superfície (W);

\dot{E}_g = taxa de calor exotérmico devido às reações (W); e,

\dot{E}_{ac} = taxa de calor acumulado no grão (W).

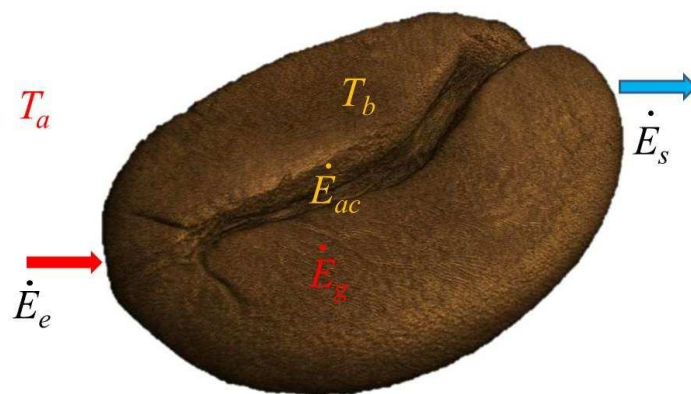


Figura 1. Volume de controle para o grão de café no processo de torrefação.

O calor transferido ao grão será então proporcional ao coeficiente global de transferência de calor, a área e diferença de temperatura entre o grão e o ar ao interior do torrador:

$$\dot{E}_e = -hA(T_b - T_a) \quad (2.2)$$

em que:

h = coeficiente global de transferência de calor ($\text{W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$);

A = área de transferência de calor (m^2);

T_b = temperatura do grão ($^\circ\text{C}$); e,

T_a = temperatura (constante) no interior do torrador ($^\circ\text{C}$).

A taxa de calor endotérmico é proporcional a variação de umidade, à massa do grão e ao calor latente de vaporização:

$$\dot{E}_s = \rho V \lambda (-dX / dt) \quad (2.3)$$

em que:

ρ = massa específica do grão (kg m^{-3});

V = volume do grão (m^3);

λ = calor latente de vaporização de água (J kg^{-1}); e,

$-dX / dt$ = taxa de perda de umidade ($\text{kg}_a \text{ kg}_{ss}^{-1} \text{ s}^{-1}$).

Schwartzberg (2002) desenvolveu um modelo para estimar a taxa de evaporação considerando o fenômeno regulado pela difusão e uma dependência do tipo Arrhenius. Considerou também a força motriz e o coeficiente difusivo proporcionais a umidade do grão:

$$-\frac{dX}{dt} = \frac{4,32 \times 10^9 X^2}{d_p^2} \exp\left[\frac{-9889}{T_b + 273,2}\right] \quad (2.4)$$

em que:

d_p = diâmetro efetivo do grão (mm);

X = umidade do grão ($\text{kg}_a \text{ kg}_{ss}^{-1}$); e,

T_b = temperatura do grão ($^\circ\text{C}$).

O calor gerado é devido as reações exotérmicas produzidas no interior do grão quando ele atinge temperatura superior a $150 \text{ }^\circ\text{C}$ (Raemy, 1981; Schwartzberg, 2002). Esta taxa será proporcional a massa do grão:

$$\dot{E}_g = \rho V Q_r \quad (2.5)$$

em que:

Q_r = calor gerado pelas reações exotérmicas (W kg^{-1}).

Schwartzberg (2002) modelou a geração de calor exotérmico considerando as seguintes simplificações: a taxa de geração é proporcional a taxa de reações produzindo

energia e a taxa dessas reações é proporcional a concentração do reagente e ao coeficiente de Arrhenius; os reagentes são consumidos nas reações:

$$Q_r = A \exp \left[-\frac{H_a}{R_g (T_b + 273,2)} \right] \left(\frac{H_{et} - H_e}{H_{et}} \right) \quad T_b \geq 150^\circ C \quad (2.6)$$

em que:

A = Pré-fator de Arrhenius ($J \text{ kg}_{ss}^{-1} \text{ s}^{-1}$);

H_a = energia de ativação;

R_g = constante dos gases;

H_{et} = calor de reação total produzido ($J \text{ kg}_{ss}^{-1}$); e,

H_e = calor de reação produzido até um tempo t ($J \text{ kg}_{ss}^{-1}$).

O calor acumulado no grão será o responsável pelo incremento da temperatura no mesmo:

$$\dot{E}_{ac} = \rho V C p_b \frac{dT}{dt} \quad (2.7)$$

em que:

$C p_b$ = calor específico do grão ($J \text{ kg}_{ss}^{-1} \text{ }^\circ C^{-1}$); e,

$\frac{dT}{dt}$ = taxa de incremento da temperatura do grão ($^\circ C \text{ s}^{-1}$).

Assim, a equação governante para o problema no primeiro modelo pode ser escrita:

$$\rho V C p_b \frac{dT}{dt} = -hA(T_b - T_a) - \rho V \lambda \frac{dX}{dt} + \rho V Q_r \quad (2.8)$$

A equação 2.8 requer para sua solução condições iniciais de temperatura e umidade, estabelecidas como:

$$T_{b(0)} = T_i = 28^\circ C \quad \text{e} \quad X_{(0)} = X_i = 0,1296 \text{ kg}_a \text{ kg}_{ss}^{-1}$$

Para o segundo modelo a equação governante é dependente do tempo e da posição radial. O fluxo de calor no interior do grão ocorre pela condução (Lei de Fourier) e será proporcional ao gradiente de temperatura interno:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) + q^o = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.9)$$

E considerando uma geometria esférica com condução unidimensional na direção radial, o divergente do gradiente de temperatura pode ser escrito como:

$$\rho C_p \frac{\partial T_{(r)}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr^2 \frac{\partial T_{(r)}}{\partial r} \right) - Q_{ev} + Q_{reac} \quad (2.10)$$

Para solução da equação 2.10, são necessárias uma condição inicial e duas condições de contorno definidas como:

Condição inicial: em $t = 0$, $T_{(r,0)} = T_i = 28 \text{ }^\circ\text{C}$

Condições de contorno: em $r = 0$, $\frac{\partial T_{(r)}}{\partial r} = 0$, $q_r'' = 0$

$$\text{Em } r = R, \quad q_{conv}'' = -k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R}$$

$$h(T_a - T_{(R)}) - Q_{ev} + Q_{reac} = k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} \quad (2.11)$$

2.2.2 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO 1

No primeiro modelo, considerou-se que o gradiente de temperatura no interior do grão é muito menor quando comparado com o gradiente de temperatura externo (entre o ar e a superfície do grão). Isso indica que a resistência à condução no interior do grão é pequena comparada com a resistência à transferência de calor entre o grão e sua vizinhança e pode ser desprezada (INCROPERA et al. 2011), considerando uma distribuição uniforme da temperatura ao interior do grão, independentemente da posição e unicamente dependente do tempo de processo. Esta consideração, ainda fisicamente impossível, pois sem gradiente de temperatura não existe transferência de calor, permite uma aproximação à solução do problema. Para verificar a aplicação do método de análise concentrada, deve-se satisfazer a seguinte condição:

$$Bi = \frac{hL_c}{k} < 0,1 \quad (2.12)$$

$$L_c = \frac{V}{A} \quad (2.13)$$

onde:

L_c = longitude característica (m);

Bi = número de Biot (adimensional);

h = coeficiente global de transferência de calor ($\text{W m}^{-2} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$);

k = condutividade térmica do grão ($\text{W m}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$);

V = volume do grão (m^3); e,

A = área superficial do grão (m^2).

Fabbri et. al. (2011) determinaram valores da condutividade térmica do grão de café durante o processo de torra entre 0,131 e 0,075 $W m^{-1} K^{-1}$. Esta diminuição é devida provavelmente a perda de água e ao incremento da porosidade do grão, o que incrementa a resistência a condução. Para os cálculos iniciais do número de Biot, foi considerado a condutividade térmica constante (Tabela 1), o volume inicial do grão de $1,43 \times 10^{-7} m^3$ e a área superficial inicial de $1,63 \times 10^{-4} m^2$. O coeficiente de transferência de calor por convecção forçada (h) foi calculado pela correlação Ranz-Marshall:

$$Nu = h \frac{d_p}{k_a} = 2 + 0,6 Re^{0,5} Pr^{0,33} \quad (1 < Re < 10^5; 0,6 < Pr < 380) \quad (2.14)$$

$$Re = \frac{vel \cdot L_c}{\nu} \quad (2.15)$$

$$d_p = \left(\frac{6V}{\pi} \right)^{1/3} \quad (2.16)$$

$$Pr = \frac{\mu C_{pa}}{k_a} = \frac{\nu}{\alpha} \quad (2.17)$$

onde:

Nu = número de Nusselt (adimensional);

Re = número de Reynolds (adimensional);

Pr = número de Prandtl (adimensional);

vel = velocidade do ar ($m s^{-1}$);

ν = viscosidade cinemática do ar ($m^2 s^{-1}$);

μ = viscosidade dinâmica do ar ($kg m^{-1} s^{-1}$);

C_{pa} = calor específico do ar ($kJ kg^{-1} ^\circ C^{-1}$);

k_a = condutividade térmica do ar ($W m^{-1} ^\circ C^{-1}$); e,

α = difusividade térmica do ar ($m^2 s^{-1}$).

Os valores das propriedades físicas do ar e do grão usadas para a solução das equações estão listados na Tabela 1.

Tabela 1. Propriedades físicas do grão de café e do ar nas condições de processo.

Propriedade	Valor ou referência
Volume do grão (V) $[m^3]$	Equação 1.17
Volume inicial do grão (V) $[m^3]$	1,436x10 ⁻⁷ (experimental)
Área superficial do grão (A) $[m^2]$	Equação 1.19
Área superficial inicial do grão (A) $[m^2]$	1,63022x10 ⁻⁴ (experimental)
Longitude característica inicial (Lc) $[m]$	8,8056x10 ⁻⁴ (experimental)
Massa específica do grão (ρ) $[kg\ m^{-3}]$	Equações 1.20 a 1.24
Condutividade térmica do grão (k) $[W\ m^{-1}\ ^\circ C^{-1}]$	0,11 (Fabbri et al. 2011)
Capacidade calorífica do grão (Cp_b) $[kJ\ kg^{-1}\ ^\circ C^{-1}]$	$Cp_b = (1,099 + 0,007T_b + 5,0X)/(1 + X)$ (Schwartzberg 2002)
Umidade inicial do grão (X_o) $[kg_a\ kg_{ms}^{-1}]$	0,1296 (experimental)
Umidade do grão (X) $[kg_a\ kg_{ms}^{-1}]$	Equação 2.4
Condutividade térmica do ar (k_a) $[W\ m^{-1}\ ^\circ C^{-1}]$	T ₂₀₀ :0,03874 (Incropera et al. 2011) T ₂₂₀ :0,04006 T ₂₄₀ :0,04137 T ₂₆₀ :0,04268 T ₂₈₀ :0,04399
Viscosidade dinâmica do ar (μ) $[kg\ m^{-1}\ s^{-1}]$	T ₂₀₀ :258,80x10 ⁻⁷ (Incropera et al. 2011) T ₂₂₀ :266,37x10 ⁻⁷ T ₂₄₀ :273,93x10 ⁻⁷ T ₂₆₀ :281,50x10 ⁻⁷ T ₂₈₀ :289,06x10 ⁻⁷
Velocidade do ar (V) $[m\ s^{-1}]$	0,02 (Fabbri et al. 2011)
Massa específica do ar (ρ_a) $[kg\ m^{-3}]$	T ₂₀₀ :0,7713 (Incropera et al 2011) T ₂₂₀ :0,7433 T ₂₄₀ :0,7153 T ₂₆₀ :0,6873 T ₂₈₀ :0,6593
Viscosidade cinemática do ar (ν) $[m^2\ s^{-1}]$	T ₂₀₀ :35,63x10 ⁻⁶ (Incropera et al 2011) T ₂₂₀ :38,26x10 ⁻⁶ T ₂₄₀ :40,89x10 ⁻⁶ T ₂₆₀ :43,52x10 ⁻⁶ T ₂₈₀ :46,15x10 ⁻⁶
Coefficiente de expansão do ar (β_a) $[K^{-1}]$	T ₂₀₀ :2,01x10 ⁻³ (Incropera et al 2011) T ₂₂₀ :2,03x10 ⁻³ T ₂₄₀ :1,96x10 ⁻³ T ₂₆₀ :1,90x10 ⁻³

	$T_{280}:1,83 \times 10^{-3}$
Difusividade térmica do ar (α) [$m^2 s^{-1}$]	$T_{200}:51,61 \times 10^{-6}$ (Incropera et al 2011) $T_{220}:55,81 \times 10^{-6}$ $T_{240}:59,67 \times 10^{-6}$ $T_{260}:63,54 \times 10^{-6}$ $T_{280}:67,44 \times 10^{-6}$
Temperatura do ar (T_a) [$^{\circ}C$]	200, 220, 240, 260, 280
Tempo de torra (t) [min]	10
Temperatura inicial do grão (T_i) [$^{\circ}C$]	28
Temperatura do grão no cenário 1 (T) [$^{\circ}C$]	Equação 2.23
Temperatura no interior do grão no cenário 2 (T_i) [$^{\circ}C$]	Equação 2.29
Temperatura na superfície do grão no cenário 2 (T_R) [$^{\circ}C$]	Equação 2.32
Calor latente de vaporização (λ) [$kJ kg^{-1}$]	2790 (Schwartzberg 2002)
Prefator de Arrhenius (A) [$kW kg_{ss}^{-1}$]	116200 (Schwartzberg 2002)
Energia de ativação/Constante dos gases ideais (H_a / R_g) [K]	5500 (Schwartzberg 2002)
Calor de reação total produzido (H_{et})	232 [$kJ kg_{ss}^{-1}$] (Schwartzberg 2002)

Desta forma foram obtidos os números adimensionais de Reynolds, Nusselt, Prandtl, Biot e coeficiente de transferência de calor por convecção para cada temperatura de processo (Tabela 2).

Tabela 2. Números adimensionais e coeficiente de transferência de calor por convecção para diferentes temperaturas de torrefação.

$T (^{\circ}C)$	Pr	Re	Nu	$h (W m^{-2} ^{\circ}C^{-1})$	Bi
200	0,681	1,018	2,533	15,915	0,127
220	0,681	0,912	2,505	16,275	0,130
240	0,680	0,827	2,481	16,652	0,133
260	0,680	0,756	2,459	17,040	0,136
280	0,681	0,696	2,441	17,438	0,140

Como se observa na Tabela 2, o número de Biot aumenta com a temperatura de processo e seu valor está sobre o limite de validade para aplicar o método da capacitância global ($Bi \leq 0,1$). Pode se afirmar que a resistência exercida pela condução representa de 12 a 14% da resistência exercida pela convecção e que o incremento da temperatura do processo torna mais importante a resistência condutiva. Os valores quase constantes do número de Re e de Pr , indicam o efeito mínimo do aumento da temperatura de processo (80 °C) sobre as propriedades térmicas do ar e em consequência sobre o coeficiente de transferência h . Como será discutido nas seções seguintes, os valores de h calculados pela correlação Ranz-Marshall (convecção) são menores que os estimados pelo modelo devido aos mecanismos atuando sobre o processo (radiação e convecção).

A solução analítica da equação diferencial ordinária governante (Equação 2.8) é difícil de se obter, pois as propriedades físicas do grão (ρ , V , A , C_p) variam em relação a umidade e a temperatura. Tendo conhecimento das condições iniciais de temperatura e umidade, a solução numérica foi efetuada pelo método das diferenças finitas de forma explícita, calculando-se a temperatura e umidade do grão para cada instante de tempo posterior. O tamanho do passo para a discretização no tempo (Δt) foi determinado pela seguinte relação:

$$Fo \leq \frac{1}{4} \text{ (Incropera, 2011)}$$

Em que:

Fo = número de Fourier (tempo adimensional)

$$Fo = \frac{\alpha \Delta t}{L_c^2} \quad (2.18)$$

$$\alpha = \frac{k}{C_p \cdot \rho} \quad (2.19)$$

em que

α = difusividade térmica ($m^2 s^{-1}$).

Considerou-se $Fo = 0,2$ e valores médios e constantes de k , C_p e ρ (apenas para o cálculo de Δt , pois no modelo estas propriedades são variáveis):

$$0,2 = \frac{0,11 \cdot \Delta t}{1500 \cdot 800 \cdot (8,8056 \times 10^{-4})^2}$$

Determinando assim: $\Delta t \leq 1,69s$. Para facilitar os cálculos numéricos se estabeleceu $\Delta t = 1s$.

As derivadas da temperatura e umidade com o tempo foram discretizadas de forma explícita, calculando seu valor para cada instante de tempo posterior usando a planilha de cálculo do Microsoft Excel (T^{j+1}, X^{j+1}):

$$\frac{dT}{dt} = \frac{T^{j+1} - T^j}{\Delta t} \quad (2.20)$$

$$\frac{dX}{dt} = \frac{X^{j+1} - X^j}{\Delta t} \quad (2.21)$$

$$X^{j+1} = X^j - \Delta t \frac{4,32 \times 10^9 X^{j2}}{d_p^2} \exp\left[\frac{-9889}{T^j + 273,2}\right] \quad (2.22)$$

Substituindo na equação 2.8:

$$T^{j+1} = T^j - \Delta t \left(\frac{hA_s}{C_p \rho V} \right) (T^j - T_a) + \left(\frac{\lambda}{C_p} \right) (X^{j+1} - X^j) + \Delta t \frac{Q_{reac}}{C_p} \quad (2.23)$$

O valor do coeficiente global de transferência de calor (h) foi calculado usando a ferramenta solver de Microsoft Excel, minimizando o erro quadrado entre as temperaturas experimentais e estimadas.

2.2.3 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO 2

A superfície do grão exposta a radiação e a convecção, experimenta um incremento de temperatura mais rápido quando comparado com as camadas internas, onde a condução é o mecanismo de transferência de calor. Na Figura 2 é apresentado o corte longitudinal do grão de café exposto ao processo de torrefação. As linhas vermelhas representam as isocurvas da temperatura que variam na coordenada radial. A Figura 3 representa a rede nodal para a solução do problema por diferenças finitas considerando as variações espaciais e temporais. Os nós na posição radial estão representados pelo subscrito i, em quanto os nós no tempo são representados pelo sobrescrito j. O último nó na posição radial (R) representa a superfície do grão, em que a condição de contorno de convecção acontece junto com o resfriamento evaporativo.

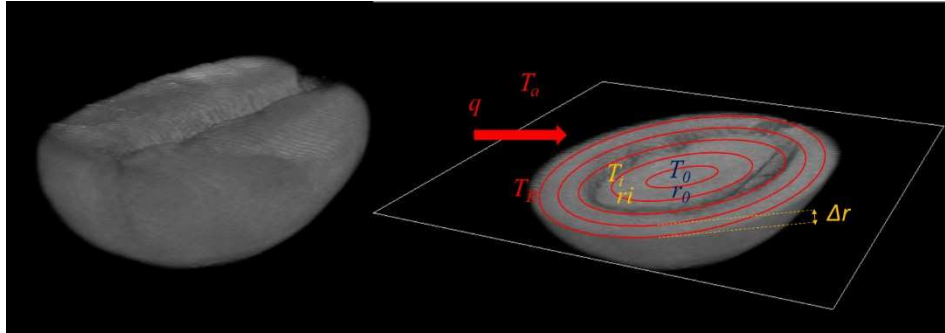


Figura 2. Representação da distribuição espacial da temperatura ao interior do grão de café durante o processo de torrefação.

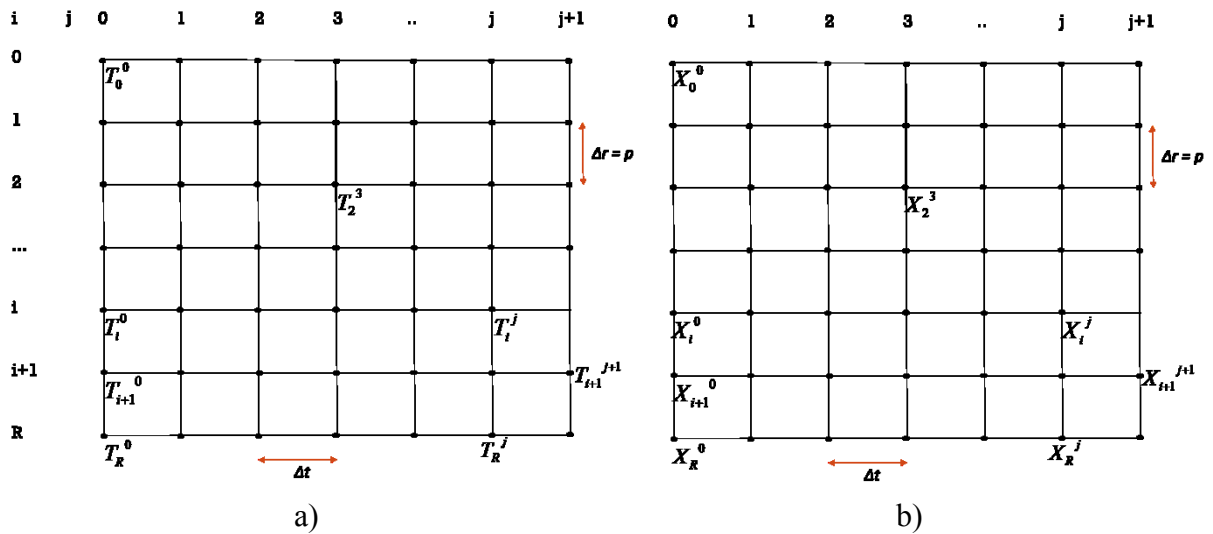


Figura 3. Rede nodal para a distribuição e evolução de: a) temperatura b) umidade no interior do grão de café.

Os valores de p e Δt foram determinados pela condição:

$$Fo \leq \frac{1}{4} \quad (\text{INCROPERA, 2011})$$

$$Fo = \frac{\alpha \Delta t}{p^2} \quad (2.24)$$

Conhecendo que o diâmetro de partícula do grão é aproximadamente 6 mm, 7 nodos foram estabelecidos dando um tamanho de passo $p = 0,5$ mm. Definindo $Fo = 0,2$, foi calculado o intervalo de tempo (timestep, Δt):

$$0,2 = \frac{0,11 \cdot \Delta t}{1500 \cdot 800 \cdot (5 \times 10^{-4})^2}$$

Determinando assim: $\Delta t \leq 0,54s$. Para facilitar os cálculos numéricos se estabeleceu $\Delta t = 0,5s$

As derivadas da temperatura e umidade com o tempo e com a posição foram discretizadas de forma explícita, calculando seu valor para cada instante de tempo posterior usando a planilha de cálculo do Microsoft Excel 2003 (T^{j+1}, X^{j+1}), considerando a temperatura e a umidade uniforme dentro do grão no tempo zero e evaporação só na superfície do grão:

$$T_0^0 = T_1^0 = T_2^0 = \dots = T_R^0 = 28^\circ C$$

$$X_0^0 = X_1^0 = X_2^0 = \dots = X_R^0 = 0,1296$$

As temperaturas nodais até R-1, foram calculadas iniciando no nó $i, j = 1, 1$ e calculando progressivamente os valores nos nós subsequentes:

$$\rho C_p \frac{\partial T_{(r)}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(kr^2 \frac{\partial T_{(r)}}{\partial r} \right) + Q_{reac} \quad (2.25)$$

Considerando k constante:

$$\rho C_p \frac{\partial T_{(r)}}{\partial t} = \frac{k}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_{(r)}}{\partial r} \right) + Q_{reac} \quad (2.26)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T_{(r)}}{\partial t} = \frac{2k}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + k \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \rho Q_{reac} \quad (2.27)$$

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} = \frac{2\alpha}{r} \frac{T_{i+1}^j - T_i^j}{p} + \alpha \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{p^2} + \rho Q_{reac} \quad (2.28)$$

Isolando:

$$T_i^{j+1} = \frac{2\alpha\Delta t}{r} \frac{T_{i+1}^j - T_i^j}{p} + Fo(T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j) + T_i^j + \frac{\Delta t Q_{reac}}{Cp} \quad (2.29)$$

A umidade para cada nó:

$$X^{j+1} = X^j - \Delta t \frac{4,32 \times 10^9 (X^j)^2}{d_p^2} \exp \left[\frac{9889}{T^j + 273,2} \right] \quad (2.30)$$

As temperaturas nodais na superfície (R) foram calculadas segundo a condição de contorno:

$$-hA(T_R^j - T_a) + \rho V \lambda \frac{X_R^j - X_R^{j-1}}{\Delta t} + \rho V Q_r = kA \frac{T_R^j - T_{R-1}^j}{\Delta r} \quad (2.31)$$

Isolando:

$$T_R^j = \frac{kT_{R-1}^j + phT_a + \frac{p\rho V}{A} \left(\lambda \frac{X_R^j - X_R^{j-1}}{\Delta t} + Q_{reac} \right)}{k + ph} \quad (2.32)$$

A temperatura média para cada instante de tempo foi calculada pela solução numérica da integral da temperatura entre os limites $r=0$ e $r=R$ para o volume equivalente do elipsóide:

$$\bar{T} = \frac{1}{V} \int T(r, \theta, \phi) dV \quad (2.33)$$

$$\bar{T} = \frac{1}{V} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^R T(r) r^2 dr d\theta d\phi \quad (2.34)$$

$$\bar{T} = \frac{4\pi}{V} \int_0^R T(r) r^2 dr = \frac{4\pi}{V} \sum_0^R T(r_i) r_i^2 \Delta r \quad (2.35)$$

O valor do coeficiente global de transferência de calor (h) da equação 2.32, foi calculado para cada temperatura de torrefação, usando a ferramenta solver de Microsoft Excel minimizando o erro quadrado entre as temperaturas experimentais e as temperaturas médias estimadas para cada instante de tempo.

2.3 RESULTADOS

2.3.1 Modelo 1: Análise concentrada

Na Tabela 3 estão apresentados os valores do coeficiente global de transferência de calor (h) para cada temperatura de processo, o erro médio relativo, erro médio estimado e o coeficiente de determinação. Na Figura 4 estão representados os perfis de temperatura do grão estimados pelo modelo e sua comparação com os dados experimentais.

Tabela 3. Valores do coeficiente global de transferência de calor calculado para diferentes temperaturas de torrefação

T (°C)	h (W m ⁻² °C ⁻¹)	P	SE	R^2
200	60,20	1,03	2,19	0,994
220	72,36	1,55	2,95	0,993
240	68,00	3,05	5,77	0,986
260	81,62	3,50	7,57	0,985
280	102,55	1,98	6,51	0,973

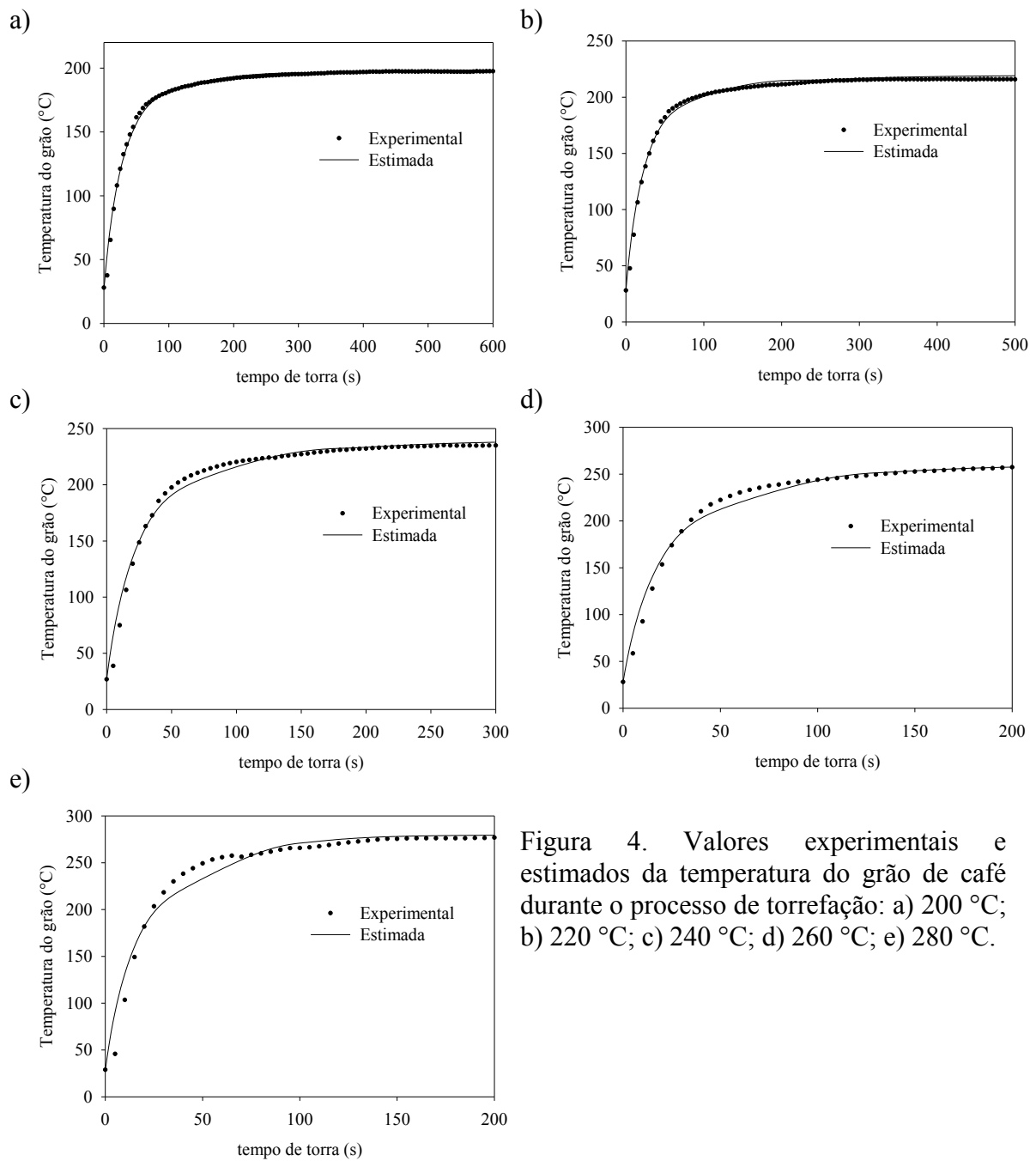


Figura 4. Valores experimentais e estimados da temperatura do grão de café durante o processo de torrefação: a) 200 °C; b) 220 °C; c) 240 °C; d) 260 °C; e) 280 °C.

Na figura 4 se observa a dependência da taxa de aquecimento do grão com a temperatura de processo. Estes resultados concordam com Schenker (2000) que, em condições isotérmicas em alta (260 °C) e em baixa temperatura (220 °C), definiu tempos de processo de 180 e 720 s, respectivamente para atingir o nível de torra médio. Os modelos desenvolvidos por Hernández (2002), Basile e Kikic (2009), Hernández et. al. (2007), Fabbrei et. al. (2011), Botazzi et. al. (2012) e Alonso-Torres (2013), descrevem um comportamento similar. Pode-se observar um melhor ajuste para as menores temperaturas de torrefação. Nas temperaturas maiores de 240 °C o modelo tende a subestimar os dados

quando o grão atinge temperaturas entre 180 e 230 °C aproximadamente. Isto pode ser causado pela intensidade das reações exotérmicas acontecendo nas altas temperaturas.

O coeficiente global de transferência de calor aumentou exponencialmente com a temperatura de processo o que é concordante com o rápido aumento de temperatura que experimenta o grão nas altas temperaturas de torrefação. Os valores do número de Biot obtidos para estes coeficientes foram de 0,48; 0,58; 0,54; 0,65 e 0,82 para temperaturas de torrefação de 200, 220, 240, 260 e 280 °C, respectivamente. Estes valores refletem a importância de se considerar a resistência condutiva. Basile e Kikic (2009) estabeleceram coeficientes globais de transferência de calor de 2,87 e 34,4 W m⁻² °C⁻¹ e números de Biot de 0,0058 e 0,8092 para torradores de cilindro rotativo e leito fluidizado respectivamente, sendo este último concordante com as condições do experimento.

O efeito dos termos fonte (evaporação e reações exotérmicas) na temperatura estimada pelo modelo se observa na Figura 5. Quando a evaporação é desprezada, o modelo superestima a temperatura durante o período de reação exotérmica, começando em 150 °C e até consumir os reagentes. Schwartzberg (2002) estabeleceu o fim das reações quando se atinge o calor de reação total H_{et} (Tabela 1). Pelo contrário, quando as reações exotérmicas são ignoradas, o modelo subestima a temperatura do grão devido ao resfriamento evaporativo iniciado quando o grão atinge 100 °C prolongando-se decrescentemente até o final do processo. Quando nenhum dos termos fonte é levado em conta, o modelo tende a atingir a temperatura de torrefação rapidamente caindo em um erro por superestimação.

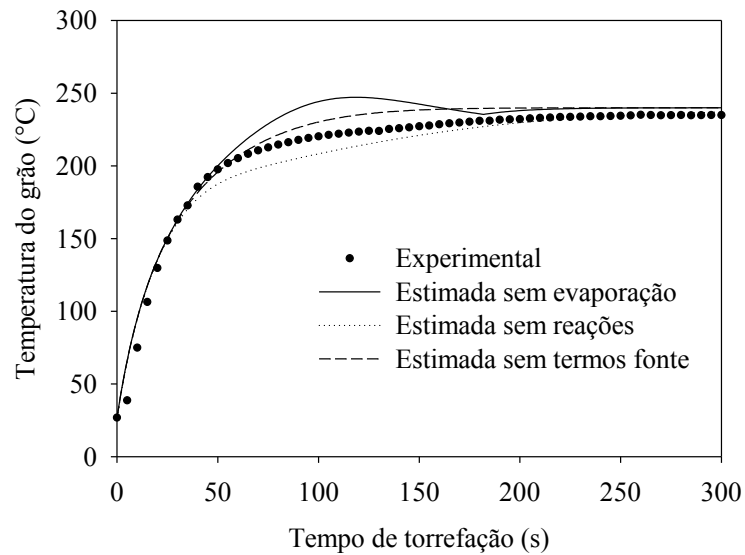


Figura 5. Efeito dos termos fonte (evaporação e reações exotérmicas) na temperatura do grão estimada pelo modelo a 240 °C.

O rápido aquecimento do grão justifica a pronunciada diminuição no teor de umidade (Figura 6). Basile e Kikic (2009) através de uma abordagem de capacidade calorífica global, considerando propriedades físicas do grão constantes, calcularam coeficientes externos de transferência de calor entre 12,7 e 82,7 $\text{W m}^{-2} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ para temperaturas de torra entre 180 e 240 °C em condições de leito fluidizado.

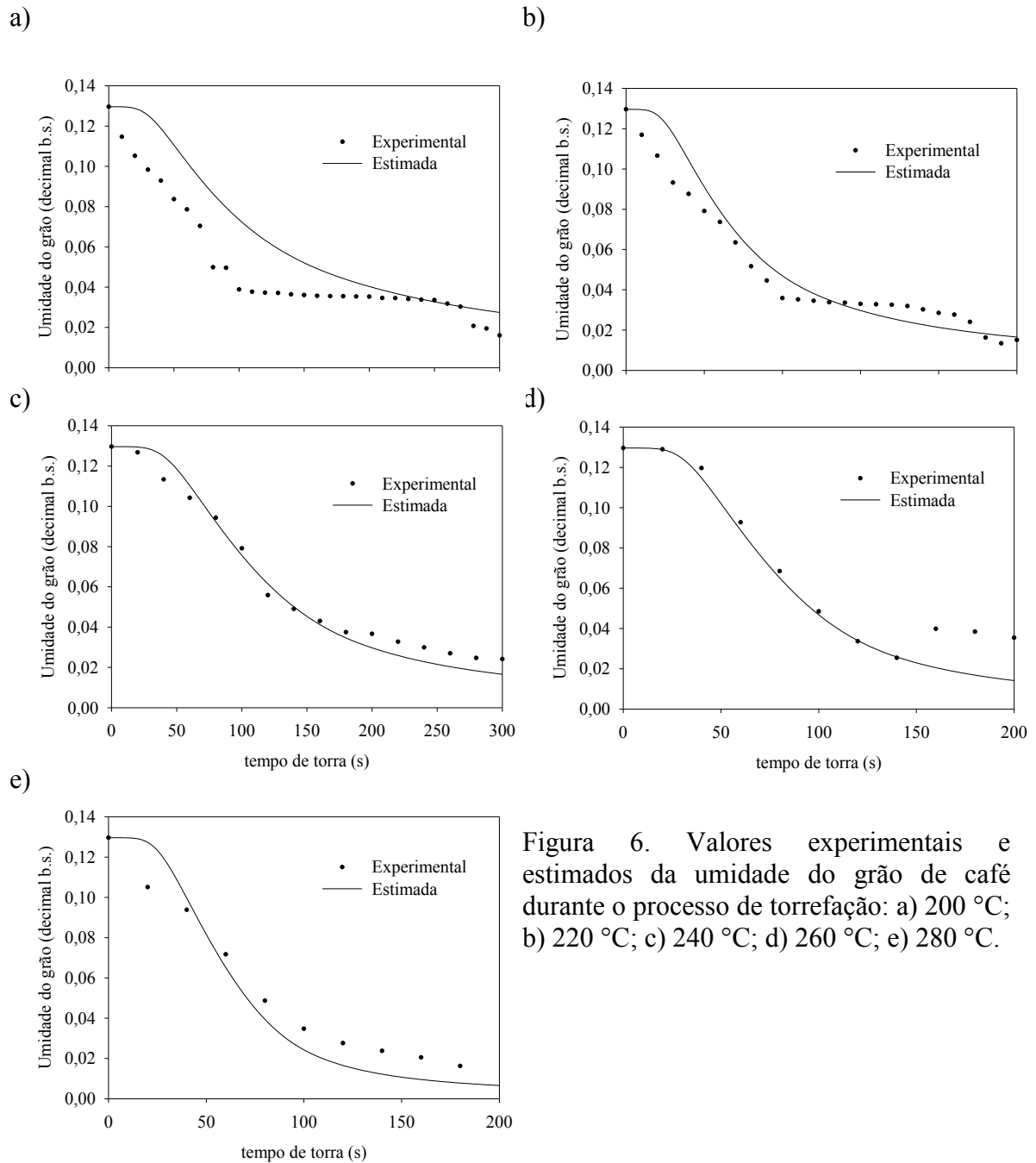


Figura 6. Valores experimentais e estimados da umidade do grão de café durante o processo de torrefação: a) 200 °C; b) 220 °C; c) 240 °C; d) 260 °C; e) 280 °C.

A evolução do conteúdo de umidade do grão durante o processo de torrefação (Figura 6) apresenta a tendência típica de uma curva de secagem de grãos. Pode se observar uma primeira etapa muito pequena correspondente ao aquecimento do grão até atingir aproximadamente 100 °C (temperatura de vaporização da água) na qual a umidade permanece quase constante. Depois, uma queda exponencial proporcional a temperatura do processo até atingir o teor de umidade de equilíbrio onde a curva tende a tornar-se assintótica. Esta umidade de equilíbrio depende da temperatura no interior do torrador e variou de 3% para 200 °C a menos de 1% para 280 °C. O modelo usado (Schwartzberg,

2002) embora considera a água gerada nas reações exotérmicas, não consegue ajustar-se com precisão nesta etapa do processo.

Schenker (2000) avaliou o efeito da umidade inicial do grão (desde 5 até 18% b.u.) na taxa de aquecimento observando um rápido incremento da temperatura dos grãos com umidades iniciais baixas, o que é esperado pelo menor requerimento energético para a evaporação em benefício do calor sensível (aquecimento do grão).

2.3.2 Modelo 2: efeito da difusão de calor e massa no interior do grão

Na tabela 4 são apresentados os valores do coeficiente de transferência de calor convectivo e dos coeficientes globais de transferência de calor calculados para os dois modelos.

Tabela 4. Coeficientes de transferência de calor estimados ($W m^{-2} °C^{-1}$).

T_a (°C)	h convectivo	Modelo 1		Modelo 2	
		h	R^2	h	R^2
200	15,91	60,20	0,994	71,60	0,9801
220	16,27	72,36	0,993	89,52	0,9754
240	16,65	68,00	0,986	86,59	0,9620
260	17,04	81,62	0,985	121,91	0,9607
280	17,43	102,55	0,973	160,28	0,9350

Com os valores do coeficiente global de transferência de calor calculado para o segundo modelo, os números de Biot para cada temperatura de processo são 0,57; 0,72; 0,69; 0,98 e 1,28. Estes valores refletem a importância da resistência condutiva no interior do grão e justificam o desenvolvimento do modelo considerando as variações espaciais e temporais.

Observa-se que a temperatura de processo tem pouco efeito sobre o valor de h obtido considerando só a convecção como mecanismo de transferência de calor e seus valores são menores quando comparados com os coeficientes globais calculados pelos modelos (Figura 7). O valor do coeficiente convectivo representa entre 10 e 21% do valor do coeficiente global de transferência de calor calculado pelo segundo modelo. Isso indica que o mecanismo dominante da transferência de calor nas condições do experimento, é a

radiação. Este resultado é consistente com o débil efeito que tem a velocidade do ar gerada pela rotação do cilindro sobre o coeficiente convectivo (Equação 2.14) e conseqüentemente sobre o fluxo de calor pela convecção.

O coeficiente de transferência de calor global calculado para os dois modelos incrementou-se com a temperatura de torra, sendo este incremento exponencial para temperaturas acima de 240 °C. Este resultado é consistente com a Lei formulada por Steffan Boltzman, na que o fluxo de calor pela radiação é proporcional ao exponencial da temperatura da superfície irradiando. Os valores de h obtidos para o segundo modelo são maiores que os valores obtidos para a análise concentrada e essa diferencia incrementa-se com a temperatura de torra. O anterior devido a que é preciso uma energia adicional para vencer a resistência condutiva no interior do grão, que se torna mais importante com o aumento da temperatura de processo provavelmente pelo maior tamanho dos poros formados durante a expansão da microestrutura do grão.

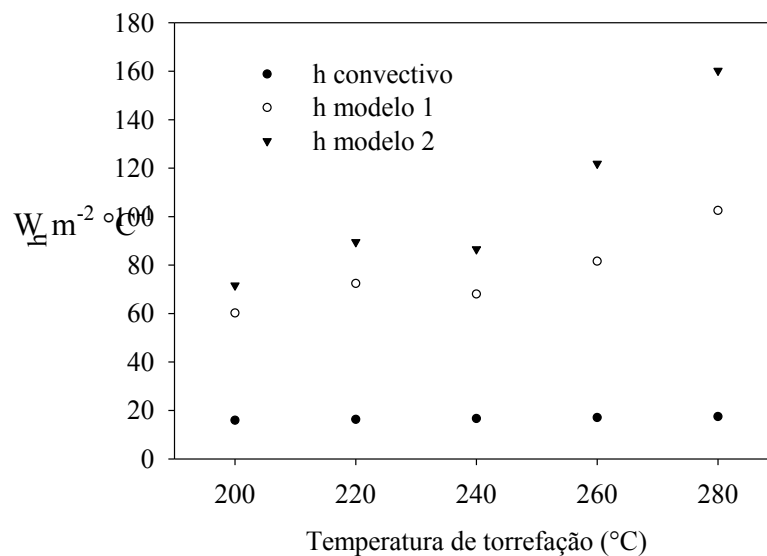


Figura 7. Variação do coeficiente de transferência de calor em função da temperatura de torrefação.

Na figura 8 é apresentada a evolução do gradiente de temperatura ao interior da matriz sólida e da diferença de temperatura entre o ar e a superfície do grão. Pode se observar que a temperaturas de processo superiores a 220 °C, a resistência interna domina o processo.

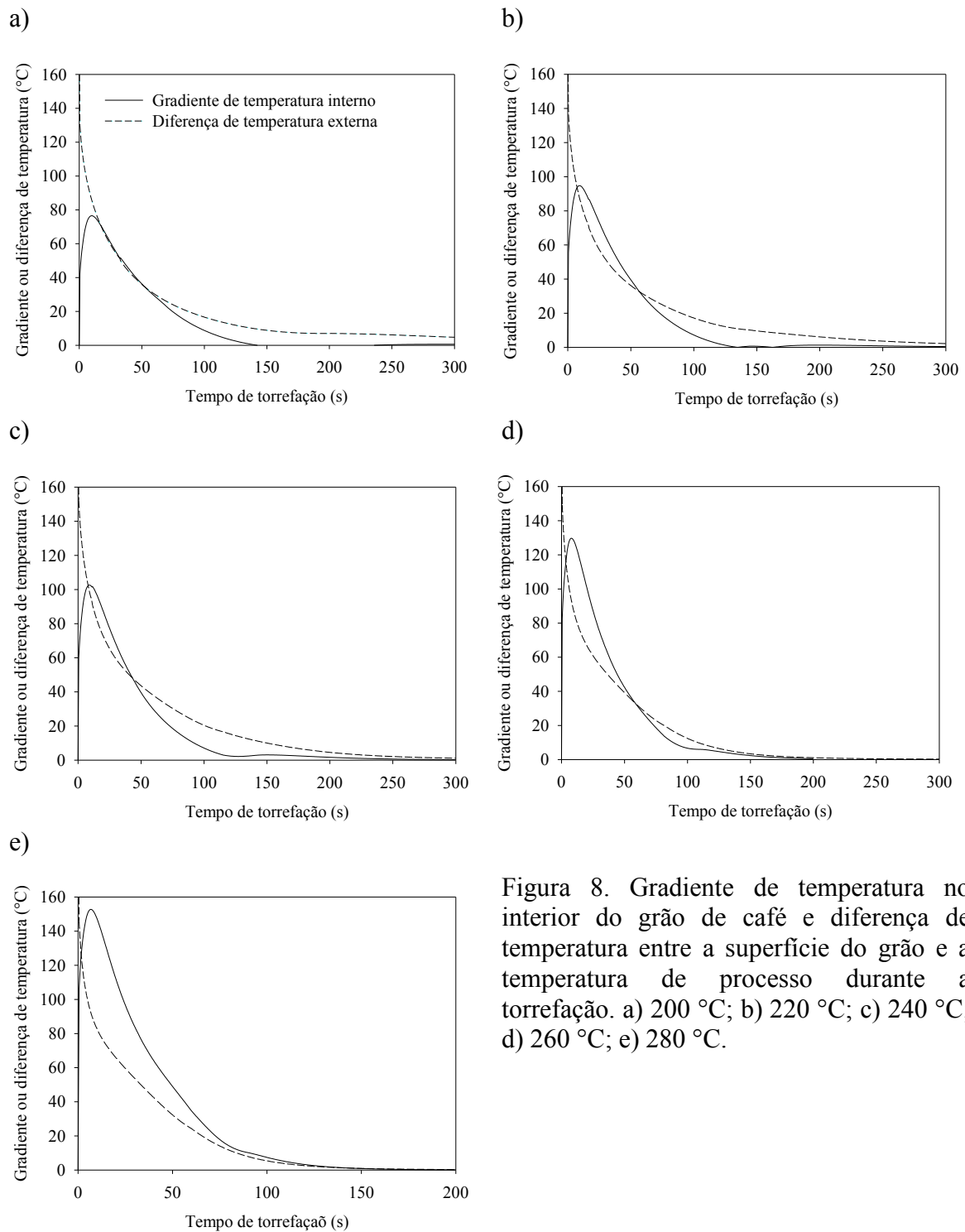


Figura 8. Gradiente de temperatura no interior do grão de café e diferença de temperatura entre a superfície do grão e a temperatura de processo durante a torrefação. a) 200 °C; b) 220 °C; c) 240 °C; d) 260 °C; e) 280 °C.

Na Figura 9 estão apresentados os dados experimentais e estimados da temperatura do grão no centro, superfície e média.

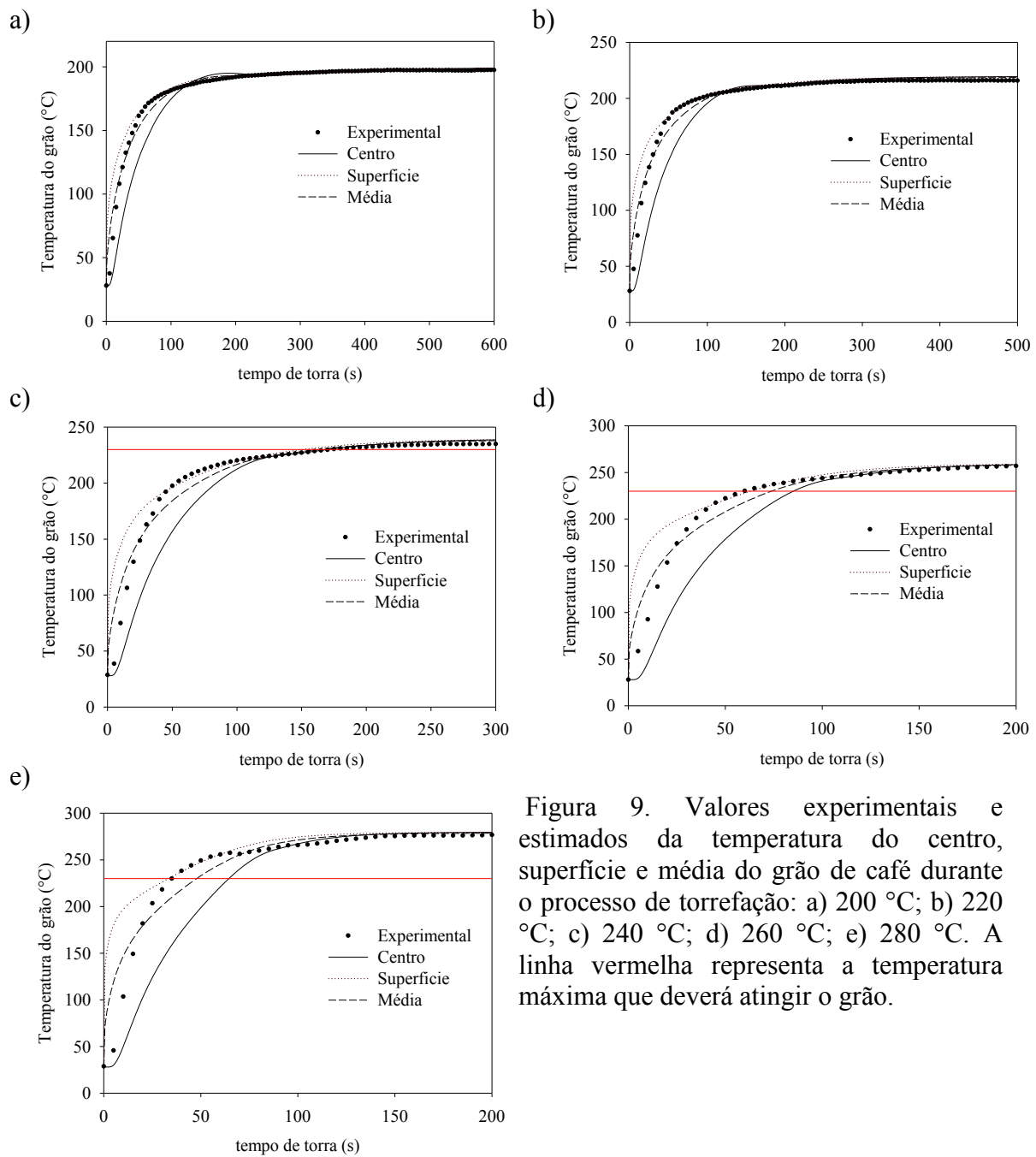


Figura 9. Valores experimentais e estimados da temperatura do centro, superfície e média do grão de café durante o processo de torrefação: a) 200 °C; b) 220 °C; c) 240 °C; d) 260 °C; e) 280 °C. A linha vermelha representa a temperatura máxima que deverá atingir o grão.

Observou-se que a temperatura experimental fica dentro do intervalo de temperatura superficial e do centro estimadas pelo modelo. Na medição experimental da temperatura, o termopar inserido dentro do grão registra a temperatura do centro, mas como o avançar do processo, um erro experimental pode acontecer devido ao orifício no grão e ao mesmo termopar, que ainda isolado parcialmente, pode atuar como condutor registrando a temperatura de zonas radiais próximas ao centro e mesmo da superfície. É por esta razão que o ajuste do modelo foi feito com a temperatura média.

Na Figura 9 a linha vermelha indica a temperatura máxima recomendada (230 °C) que o grão teria que atingir para desenvolver os compostos responsáveis pela cor, aroma e gosto. A cima desta temperatura as reações de carbonização se-iniciam em detrimento da qualidade do produto. É evidente o problema de operar em altas temperaturas: para o processo a 280 °C (Figura 9e) a temperatura no centro do grão atinge 230 °C em 40 s depois a superfície, e para este tempo a superfície atinge aproximadamente 260 °C. Estas condições resultam em uma torra poco homogênea, com partes do grão que ainda não desenvolveram todos os compostos aromáticos e com uma superfície muito torrada, oleosa, de cor muito escura e sabor amargo. Illy e Viani (1995) encontraram que a degradação incompleta dos ácidos clorogênicos leva a gosto amargo e metálico na bebida e as temperaturas de processo baixas (inferior a 220 °C) exigem longos períodos de processo provocando a perda de compostos voláteis e gosto amargo na bebida.

Alonso-Torres et. al. (2013) usando mecânica dos fluidos computacional e as equações propostas por Schawtzberg (2002) para simular a torra de um grão de café em leito fluidizado, calcularam uma diferença de temperatura entre a superfície e o centro do grão de 16 °C depois de 180 s de processo a 230 °C e velocidade do ar de 2 m s⁻¹. Nas condições do experimento do presente estudo, a velocidade do ar foi gerada apenas pela rotação do cilindro e se estabeleceu em 0,02 m s⁻¹ (Tabela 1), pelo que o aquecimento da superfície foi mais atenuado e a temperatura tornou-se homogênea depois de 150 s de processo.

Hernández et. al. (2007) observaram um desvio na cinética exponencial de aquecimento quando o grão ultrapassou 260 °C devido provavelmente a diminuição das reações exotérmicas responsáveis pelo aroma e ao início da combustão do grão de café. Este comportamento pode ser observado na Figura 8e, quando o grão atinge temperatura de 260 °C em aproximadamente 70 s.

A temperatura de processo de 240 °C (Figura 9c) gera condições ideais para obter um grão homogeneamente torrado dado que o grão inteiro atinge 230 °C antes de chegar ao nível de torra determinado e antes do tempo máximo de 250 s para torra escura, estudado no primeiro capítulo desta dissertação. Basile e Kikic (2009) simularam a evolução do gradiente interno de temperatura para condições de leito fluidizado a 220 °C,

determinando um valor máximo de 33% tornando-se desprezível depois de 100 s de processo.

Outra abordagem foi feita por Vargas (2014), que modelou o aquecimento da massa de grãos torrados em cilindro rotativo com foco em parâmetros acoplados constantes. O autor usou o modelo de Pabis e Henderson (1962) para a cinética de secagem e considerou um coeficiente global de transferência de calor. Não foi considerado o calor gerado pelas reações. A cinética de aquecimento da massa de grãos difere da cinética de aquecimento do grão individual o qual tende a atingir a temperatura de torrefação mais rapidamente. O modelo desenvolvido neste estudo não pretende estimar o tempo de torra de uma massa de grãos para atingir um nível de torra específico. O objetivo principal foi estimar a distribuição de temperatura no interior do grão como ferramenta complementar para enriquecer e melhorar modelos de aquecimento ao nível industrial e como ferramenta complementar nos estudos de formação de compostos responsáveis pelo aroma do café torrado.

2.4 CONCLUSÃO

Neste capítulo foram desenvolvidos dois modelos físicos para estimar a temperatura do grão de café durante o processo de torrefação. Os modelos são baseados nos fenômenos de transporte conjugado de transferência de calor (condutiva e convectiva) e massa, e foram desenvolvidos considerando a variação das propriedades físicas do grão (capacidade calorífica, massa específica, volume e área superficial), o que garante sua versatilidade. As principais simplificações feitas na modelagem foram agrupar os mecanismos de transferência de calor para o grão (convecção e radiação) em um coeficiente global de transferência de calor (h) e considerar a condutividade térmica do grão constante.

A evaporação tem um maior efeito sobre a temperatura estimada pelo modelo quando comparado com o efeito das reações exotérmicas. Embora os dois termos fonte tenham que ser considerados para conseguir um melhor ajuste aos dados experimentais.

A evolução do gradiente de temperatura na matriz interna e da diferença de temperatura entre a superfície do grão e a temperatura do ar, além dos números de Biot obtidos para os dois modelos, permitem afirmar que a resistência interna é o fenômeno dominante para temperaturas de torrefação superiores a 220 °C. Na prática isso explica a inconveniência de usar temperaturas de torrefação muito altas que resultam em torras pouco homogêneas.

Os valores do coeficiente global de transferência de calor calculado pelos dois modelos são entre 80 e 90% superiores ao coeficiente de transferência de calor convectivo calculado nas condições do experimento, permitindo concluir que o mecanismo de transferência de calor dominante do processo é a radiação.

Como dados de entrada, os modelos precisam das propriedades físicas iniciais do grão, da temperatura de torrefação e do coeficiente de transferência de calor. Estes modelos constituem uma ferramenta complementar para o controle e otimização em tempo real do processo de torrefação em condições nas que a radiação seja o principal mecanismo de transferência de calor. Podem contribuir também no entendimento da formação dos compostos responsáveis pelo aroma do café, dado que esta depende da evolução da temperatura do grão durante o processo de torrefação.

2.5 REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

- Alonso-Torres, B., Hernández-Pérez, J. A., Sierra-Espinoza, F., Schenker, S., e Yeretizian, C. “Modeling and Validation of Heat and Mass Transfer in Individual Coffee Beans during the Coffee Roasting Process Using Computational Fluid Dynamics (CFD).” *CHIMIA International Journal for Chemistry* 67 (4): 291–94. 2013.
- Basile, M, e Kikic, I. “A Lumped Specific Heat Capacity Approach for Predicting the Non-Stationary Thermal Profile of Coffee During Roasting.” *Chem. Biochem. Eng. Q.* 23 (2): 167–77. 2009.
- Bonnlander, B., Eggers, R., Engelhardt, U. H., Maier, H. G. “Roasting.” In *Espresso Coffee: The Science of Quality*, 398. 2005.
- Bottazzi, D., Farina, S., Milani, M., e Montorsi, L. “A Numerical Approach for the Analysis of the Coffee Roasting Process.” *Journal of Food Engineering* 112 (3): 243–52. 2012.
- Datta, A. K. **Biological and bioenvironmental heat and mass transfer**. Marcel Dekker Inc, 424. 2002.
- Fabbri, A., Cevoli, C., Alessandrini, L., e Romani, S. “Numerical Modeling of Heat and Mass Transfer during Coffee Roasting Process.” *Journal of Food Engineering* 105 (2): 264–269. 2011.
- França, A. S., Oliveira, L. S., Corrêa P. C. “Estudo da adequação de modelos semi-empíricos para descrever a variação do teor de umidade e voláteis durante o processo de torrefação de café.” *Revista Brasileira de Armazenamento*. Especial Café (4): 26-31. 2002.
- Goodman, B., Yeretizian, C., Stolze, K., Wen, D. “Quality aspects of coffees and teas: Application of electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy to the elucidation of free radical and other processes”. *Agricultural Sciences* 4 (8): 433 – 442. 2013.
- Hernández, J. A. 2002. *Étude de la torréfaction: modélisation et détermination du degré de torréfaction du café en temps réel*. Paris, Francia. [Thèse pour Docteur de L'ensia]: École Nationale Supérieure des Industries Agricoles et Alimentaires.
- Hernández, J. A., Heyd, B., Irls, C., Valdovinos, B., e Trystram, G. “Analysis of the Heat and Mass Transfer during Coffee Batch Roasting.” *Journal of Food Engineering* 78 (4): 1141–48. 2007.
- Hernández, J. A., Heyd, B., e Trystram, G. “Prediction of Brightness and Surface Area Kinetics during Coffee Roasting.” *Journal of Food Engineering* 89 (2): 156–63. 2008.
- Illy, A., Viani, R. **Espresso Coffee: The Chemistry of Quality**. London: Academic Press, 253. 1995.

- Incropera, F. P., Dewitt, D. P., Bergman, T. L., e Lavine, A. S. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. seventh ed. 2011.
- Pellegrini, N., Serafini, M., Colombi, B., Del Rio, D., Salvatore, S., Bianchi, M., Brighenti, F. "Total antioxidant capacity of plant foods, beverages and oils consumed in Italy assessed by three different in vitro assays". *Journal of Nutrition* 133, 2812–2819. 2003.
- Raemy, A. "Differential thermal analysis and heat flow calorimetry of coffee and chicory products". *Thermochimica Acta* 43, 229 - 236. 1981.
- Sacchetti, G., Di Mattia, C., Pittia, P., Mastrocola, D. "Effect of roasting degree, equivalent thermal effect and coffee type on the radical scavenging activity of coffee brews and their phenolic fraction". *Journal of Food Engineering* 90: 74 - 80. 2009.
- Schenker, Stefan. 2000. *Investigations on the Hot Air Roasting of Coffee Beans*. Zurich, Swiss. [Doctor's dissertation]: Swiss Federal Institute of Technology.
- Schwartzberg, H. G. 2002. "Modeling Bean Heating during Batch Roasting of Coffee Beans." In *Engineering and Food for the 21st Century*, 1036.
- Vargas, G. A. 2014. *Modelagem matemática da transferência de calor e massa do processo de torrefação do café*. Viçosa, Brasil. [Tese de Doutorado]: Universidade Federal de Viçosa.

CONCLUSÃO GERAL

Neste estudo, grãos de café foram torrados de forma individual em condições isotérmicas semelhante um leito fluidizado. A convecção e a radiação foram os mecanismos de transferência de calor que dominaram o processo.

Para explicar a expansão volumétrica e superficial do grão, diferentes modelos empíricos foram testados. O modelo Copace 2014 representou de forma aceitável o fenômeno, gerando uma expressão matemática que representa a expansão em função da umidade do grão e da temperatura de torrefação.

A massa específica do grão variou linearmente com o conteúdo de umidade, sendo esta mais acentuada nas altas temperaturas de processo.

A abordagem do problema mediante a análise concentrada pode ser usada para uma estimativa rápida e simples da temperatura média do grão durante o processo de torrefação. Quando comparados os termos fonte, a evaporação tem maior influência na temperatura estimada pelo modelo. Embora deva ser considerado o efeito combinado da evaporação e reações exotérmicas para evitar a superestimação da temperatura do grão.

Os valores obtidos para os números de Biot indicam a importância de se considerar a resistência condutiva no interior do grão. O gradiente de temperatura interno aumenta com o incremento da temperatura de processo. A resistência a transferência de calor na matriz interna, é o fenômeno dominante para temperaturas de processo superiores a 220 °C. Os coeficientes globais de transferência de calor calculados pelos modelos foram muito mais elevados que os coeficientes convectivos, pelo que se pode afirmar que a radiação é o principal mecanismo de transferência de calor nas condições do experimento.

O modelo desenvolvido considerando as variações espaciais da temperatura pode ser usado para determinar a temperatura do grão em qualquer instante de tempo e em qualquer posição radial. Além disso, constitui uma ferramenta complementar para o controle do processo em tempo real e para os estudos referentes a formação dos compostos responsáveis pelo aroma do café.