Mecánica Computacional Vol XXX, págs. 1575-1589 (artículo completo) Oscar Möller, Javier W. Signorelli, Mario A. Storti (Eds.) Rosario, Argentina, 1-4 Noviembre 2011

# SIMULACION COMPUTACIONAL DE LA DIFUSION DE GASES EN SISTEMAS DE ALMACENAMIENTO HERMÉTICO

# Alien Arias Barreto<sup>a</sup>, Rita Abalone<sup>a,b</sup>, Analía Gastón<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup>Facultad de Ciencias Exactas Ingeniería y Agrimensura.UNR. Av. Pellegrini 250. (2000) Rosario, rabalone@ fceia.unr.edu.ar,

<sup>b</sup>Instituto de Física Rosario (CONICET-UNRosario), 27 de Febrero 210 bis, 2000 Rosario,Argentina,

<sup>c</sup>Carrera de Investigador Científico. UNR, analiag@ fceia.unr.edu.ar

**Palabras claves**: Almacenamiento hermético, Conservación, Atmósfera automodificada, Simulación numérica.

Resumen. Mediante un modelo 3D acoplado de transporte de energía y materia, (contenido de humedad, O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>) se determina la evolución de la temperatura y humedad de los granos almacenados en silos-bolsa así como la difusión y evolución de la concentración de los gases de la atmósfera intergranaria. El sistema de ecuaciones resultantes fue implementado en COMSOL Multiphysics 4.2 y resuelto por el método de elementos finitos. Se analizaron condiciones altamente probables de ocurrir en el manejo de las bolsas en el campo como son el llenado del silo-bolsa con granos a diferentes contenidos de humedad y la pérdida de integridad de la bolsa debido a roturas. Para distribuciones iniciales no uniforme del contenido de humedad de los granos, debido a la difusión en dirección longitudinal, se producen zonas de transición en donde el nivel de concentración aumenta significativamente respecto al de referencia. Sin embargo, este aumento no es el resultado de un proceso de deterioro de la zona en cuestión. Perforaciones de 10 mm de diámetro por metro de bolsa alteran significativamente la evolución de la concentración de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> pudiendo generarse focos importantes de deterioro. Este análisis aporta información básica para la implementación de un protocolo de monitoreo de las bolsas basado en la comparación del nivel de concentración de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> con valores de referencia.

#### 1. INTRODUCCION

Ante el crecimiento de la producción granaria de los últimos 10 años en Argentina y la falta de capacidad de almacenamiento fijo, el silo-bolsa ha adquirido gran difusión. En la campaña 2010, 40 millones de toneladas de granos fueron almacenados mediante este sistema

Esta técnica consiste en el almacenamiento de granos en bolsas plásticas herméticas, donde el proceso respiratorio de los seres vivos del granel (ecosistema formado por granos, hongos, insectos, etc.) consume el oxígeno (O<sub>2</sub>) y genera dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) y vapor de agua (H<sub>2</sub>O) y libera energía. La constitución de esta nueva atmósfera, rica en CO<sub>2</sub> y pobre en O<sub>2</sub>, suprime, inactiva o reduce la capacidad de reproducción y/o desarrollo de insectos y hongos, como así también la propia actividad del grano, facilitando su conservación.

La concentración de los gases en los sistemas de almacenamiento en atmósferas automodificadas depende del balance entre la respiración del ecosistema, el ingreso de O<sub>2</sub> y la pérdida de CO<sub>2</sub> al medio ambiente debido a la permeabilidad de la cubierta plástica. A su vez, el ritmo de respiración es fuertemente dependiente del tipo, condición, temperatura y contenido de humedad del grano embolsado, de la concentración de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> de la atmósfera intergranaria y del tiempo de almacenamiento.

Recientemente, el Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria, Estación Experimental Balcarce (INTA-EEA Balcarce) implementó una nueva tecnología para monitorear los silosbolsa (Bartosik et al., 2008; Cardoso et al., 2008, Rodríguez et al. 2008). El procedimiento consiste en medir la concentración de CO<sub>2</sub> en algunos puntos de la bolsa y compararlos con un valor de referencia que indica condiciones adecuadas para el almacenamiento.

Analizar la evolución de la concentración de gases y el proceso de difusión dentro de la bolsa para distintas condiciones de almacenamiento aporta un conocimiento básico para contribuir a definir un protocolo de monitoreo de los silos-bolsas en cuanto a la localización de puntos de medición y frecuencia de muestreo. Con este propósito, se han desarrollado distintos modelos de simulación computacional para predecir la evolución de las variables relevantes relacionadas con la conservación de los granos. Gastón et al. (2009) presenta un modelo 2D para determinar la temperatura y contenido de humedad en función de las condiciones climáticas. Abalone et al., (2011a, b) presenta un modelo global (*lumped*) para predecir la evolución de la concentración promedio de CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> de la atmósfera intergranaria. Los mismos fueron validados comparando valores predichos con datos experimentales en experiencias a campo. Sin embargo, condiciones no uniformes de contenido de humedad inicial del grano embolsado limitan la aplicación de este último modelo (Abalone et al., 2011c). Así mismo, no pueden analizarse efectos locales debidos a la infiltración de O<sub>2</sub> a través de perforaciones de la cobertura plástica. Ambas situaciones tienen alta probabilidad de ocurrencia en el almacenamiento a campo.

En el presente trabajo se extienden los modelos de simulación a 3D y se incorpora la difusión de los gases a las ecuaciones de balance. En particular el modelo se aplicó para:

- 1. Comparar las predicciones de la concentración de gases del modelo 3D con el modelo global.
- 2. Analizar la evolución de la concentración de los gases para distribuciones no uniformes del contenido de humedad de los granos embolsados.
- 3. Analizar la evolución de la concentración de los gases considerando perforaciones de distinto tamaño.

#### 2. MATERIALES Y METODOS

### 2.1 Modelo físico. Silos-bolsa.

Los silos-bolsa tienen 2.70 m de diámetro y 60-75 m de largo, pudiéndose almacenar aproximadamente unas 200 toneladas de grano (Figura 1). La estructura de la bolsa está compuesta por capas de polietileno de alta (HDPE) y baja (LDPE) densidad y su espesor promedio es de 240 micrones. La cubierta interior es de color negro y la exterior de color blanco con estabilizadores para los rayos ultravioletas. En general los productores guardan su grano durante seis u ocho meses aunque las bolsas son diseñadas para una duración máxima de 2 años.

La Figura 2 muestra la aproximación propuesta de la geometría del silo-bolsa, el dominio de cálculo  $\Omega$  y su frontera  $\Gamma$ .  $\Gamma_I$  representa la cubierta superior a través de la cual intercambia energía y masa (CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>) con el medio ambiente,  $\Gamma_2$  la base impermeable a la transferencia de gases,  $\Gamma_3$  las secciones transversales del silo-bolsa. Dependiendo del caso a analizar, sobre esta superficie se consideran condiciones de simetría o aislación a los efectos de despreciar efectos de borde.



 $\Gamma_1$ 

Figura 1: Almacenamiento de granos a campo en silos-bolsa.

Figura 2: Dominio de cálculo.

# 2.2 Modelo Matemático. Balance de energía y materia:

Se introducen las siguientes hipótesis en la modelización del transporte de energía, de contenido de humedad del grano, de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> en el aire intergranario:

- 1. Se considera el lecho de granos ensilados como un continuo, con las fases aire y grano distribuidas uniformemente
- 2. En cada punto del lecho el aire intergranario se encuentra en equilibrio térmico y sorpcional con la masa de granos
- 3. Los gases se comportan como gases ideales
- 4. Se considera que la porosidad se mantiene constante
- 5. No existe producción de CO<sub>2</sub> debido a la respiración de insectos
- 6. La sorpción de CO<sub>2</sub> es despreciable
- 7. La masa de granos ocupa todo el volumen de la bolsa. No existe un volumen libre de aire entre la superficie interior de los granos y la cobertura plástica, que pueda ser el resultado de un llenado defectuoso
- 8. No se incluye en la transferencia de energía y masa por convección.

Planteando el balance de energía y materia en un volumen de control se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones, válido en el dominio de cálculo  $\Omega$  (Figura 2):

$$c_{b}\rho_{b}\frac{\partial T}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(k_{b}\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k_{b}\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k_{b}\frac{\partial T}{\partial z}\right)\right] + \rho_{b}L_{g}\frac{\partial W_{g}}{\partial t} + \rho_{bs}q_{H}Y_{CO2} \tag{1}$$

$$\rho_{b} \frac{\partial W_{g}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{ef} \left( \eta \frac{\partial W_{g}}{\partial x} + \omega \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_{ef} \left( \eta \frac{\partial W_{g}}{\partial y} + \omega \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_{ef} \left( \eta \frac{\partial W_{g}}{\partial z} + \omega \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right]$$

$$+ \rho_{bs} q_{w} Y_{CO2}$$

$$(2)$$

$$\varepsilon \frac{\partial CO_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{CO2}^* \left( \frac{\partial CO_2}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_{CO2}^* \left( \frac{\partial CO_2}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_{CO2}^* \left( \frac{\partial CO_2}{\partial z} \right) \right] + \rho_{bs} \, r_{CO2}$$
(3)

$$\varepsilon \frac{\partial O_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_{O2}^* \left( \frac{\partial O_2}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D_{O2}^* \left( \frac{\partial O_2}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ D_{O2}^* \left( \frac{\partial O_2}{\partial z} \right) \right] + \rho_{bs} r_{O2}$$
(4)

donde T, en K, es la temperatura del grano,  $W_g$ , en base seca (bs), es el contenido de humedad del grano (MC),  $O_2$  y  $CO_2$ , en % V/V, son la concentración de oxígeno y dióxido de carbono en el aire intergranario,  $\varepsilon$  es la porosidad,  $\rho_{bs}$ , en kg m<sup>-3</sup>, es la densidad de lecho seco,  $c_b$ , en Jkg<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>, es el calor específico del lecho,  $k_b$ , en Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>, es la conductividad térmica del lecho,  $D_w$  es un parámetro relacionado con la difusividad efectiva del vapor de agua en el lecho,  $L_g$ , en Jkg<sup>-1</sup>, es el calor latente de vaporización de la humedad en el grano,  $\eta$ , en Pa, es el cambio en la presión parcial debido al cambio en MC manteniendo la temperatura constante,  $\omega$ , en PaK<sup>-1</sup>, es el cambio en la presión parcial debido a un cambio en la temperatura manteniendo MC constante y  $D_i^*$ , en m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup> (con i=  $CO_2$ ,  $O_2$ ), es la difusividad efectiva a través de aire intergranario del dióxido de carbono y oxígeno, evaluado de acuerdo a Geankoplis (1998).

Los últimos términos de las ecuaciones (1) a (4) contabilizan la energía liberada, el vapor de agua producido, el  $CO_2$  generado y  $O_2$  consumido en el proceso de respiración de los granos. Este proceso se modeló considerando la combustión completa de un carbohidrato típico, de lo que resulta  $q_H$  igual a  $10.738~\rm Jmg^{-1}[CO_2]$ ,  $q_w$  igual  $4.09~10^{-5}~\rm kg[H_2O]mg^{-1}[CO_2]$ , siendo  $Y_{CO2}$  la velocidad de producción de  $CO_2$  en  $\rm mg[CO_2]s^{-1}kg^{-1}[materia seca]$ . La velocidad de producción de  $CO_2$ ,  $r_{CO2}$  en  $\rm m^3s^{-1}kg^{-1}[materia seca]$ , se calcula mediante la siguiente expresión:

$$r_{CO2}(t) = \frac{Y_{CO2}(t)}{1000M_{CO2}} \frac{RT_k}{P_{at}} \quad ; \quad r_{O2} = r_{CO2}$$
 (5)

siendo R la constante universal de los gases,  $T_k$ , en K, la temperatura absoluta y  $M_{CO2}$ , en Kgmol<sup>-1</sup>, la masa molecular del dióxido de carbono.

White et al. (1982) midió la cantidad de dióxido de carbono liberado por distintos cereales en la respiración, estableciendo modelos que pueden representarse mediante la siguiente expresión:

$$\log Y_{CO2} = a_1 + a_2 T_c + a_3 \theta + a_4 \theta^2 + a_5 M$$
 (6)

en donde  $\theta$  en días, es el tiempo de almacenamiento,  $T_c$  en °C es la temperatura del grano y M el contenido de humedad en base húmeda % bh.

El valor local de la energía liberada y del vapor de agua producido por respiración,

ecuaciones (1) y (2), puede calcularse para cada punto del silo-bolsa si se conoce la temperatura y el contenido de humedad. Sin embargo, como la ecuación (6) no depende en forma explícita del nivel de concentración de CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> de la atmósfera dentro de la bolsa, el proceso de transporte de estos gases en el espacio intergranario no influye en los valores locales de la temperatura y el contenido de humedad. Existen en la literatura, otras correlaciones de respiración para productos biológicos como frutas y hortalizas (Fonseca et al., 2001; Song et al., 2002) que si dependen explícitamente de la concentración de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>. Actualmente se está trabajando para obtener este tipo de correlaciones para los granos.

Finalmente cabe mencionar que la ecuación (6) contabiliza la producción de CO<sub>2</sub> debido a la actividad biológica de los granos y la microflora. Otra posible fuente de CO<sub>2</sub> proviene de la respiración de los insectos del granel. En el caso de los silos-bolsa, el grano se cosecha y se embolsa directamente en el campo, por lo que está libre de infestación. Esta es más común, cuando el grano se almacena en los sistemas convencionales (silos metálicos, celdas, etc.).

Una deducción de las ecuaciones (1) y (2) así como la definición de los parámetros  $D_w$ ,  $\eta$ ,  $\omega$ ,  $L_v$ , puede consultarse en Abalone et al. (2006) y Gastón et al. (2009).

#### 2.2.1 Condiciones de contorno:

Las condiciones de contorno asociadas a las ecuaciones (1) a (4) son:

$$-k\frac{\partial T}{\partial n} = h_c \left(T - T_{amb}\right) + \alpha G - \xi \sigma \left(T^4 - T_{cielo}^4\right) \qquad en \Gamma_1 \qquad (7)$$

$$T = T_{suelo}(x,0,z,t) \qquad en \Gamma_2 \qquad (8)$$

$$-k\frac{\partial T(x,y,0,t)}{\partial n} = -k\frac{\partial T(x,y,L_z,t)}{\partial n} = 0 \qquad en \Gamma_3 \qquad (9)$$

$$\eta D_{ef} \frac{\partial W_g}{\partial n} = -\omega D_{ef} \frac{\partial T}{\partial n} \qquad en \Gamma \qquad (10)$$

$$-D_{CO2}^{*} \frac{\partial CO_{2}}{\partial n} = \frac{P_{CO2}P_{atm}}{L_{e}} \left(CO_{2} - CO_{2out}\right) = h_{CO2} \left(CO_{2} - CO_{2out}\right) \quad en \ \Gamma_{I}$$
 (11)

$$-D_{O2}^{*} \frac{\partial O_{2}}{\partial n} = \frac{P_{O2}P_{atm}}{L_{e}} (O_{2} - O_{2out}) = h_{O2} (O_{2} - O_{2out}) \qquad en \Gamma_{1}$$
 (12)

$$-D_{CO2}^* \frac{\partial CO_2}{\partial n} = -D_{O2}^* \frac{\partial O_2}{\partial n} = 0 \qquad en \Gamma_2 + \Gamma_3 \tag{13}$$

La condición (10) implica que el silo es hermético a la transferencia de humedad.

En las ecuaciones (11) y (12)  $P_{atm}$  en Pa, es la presión atmosférica,  $L_e$  en m, es el espesor de la capa plástica del silo-bolsa,  $P_{O2}$  en m<sup>3</sup>ms<sup>-1</sup>m<sup>-2</sup>at<sup>-1</sup> es la permeabilidad equivalente al O<sub>2</sub> y  $P_{CO2}$  al CO<sub>2</sub> de la capa plástica. Estas permeabilidades se estiman considerando un modelo de resistencias en serie dado que el silo-bolsa está compuesto por capas de HDPE y LDPE (Abalone et al., 2011a, b):

$$P_{i} = \frac{2P_{iHD} P_{iLD}}{P_{iHD} + P_{iLD}} \quad ; \quad i = CO_{2}, O_{2}$$
 (14)

Cuando se considera que la superficie  $\Gamma_I$  presenta una perforación, sobre el área de la misma se imponen condiciones de contorno tipo Dirichlet para la concentración de  $CO_2$  y  $O_2$ .

#### 2.2.2 Condiciones iniciales:

Las condiciones iniciales correspondientes a las ecuaciones (1) y (2) son

$$T(x, y, z, t=0) = T_0(x, y, z)$$
 (15)

$$W_{\sigma}(x, y, z, t=0) = W_{0}(x, y, z) = f(z)$$
(16)

Como el silo-bolsa se encuentra al aire libre y contiene aire en su interior, para las ecuaciones (3) y (4) se tiene:

$$O_{2i}^{0}(x, y, z, t = 0) = 0.21$$
;  $CO_{2i}^{0}(x, y, z, t = 0) = 0.003$  (17)

$$O_{2out} = 0.21$$
 ;  $CO_{2out} = 0.003$  (18)

#### 2.2 Solución numérica

El modelo matemático fue implementado en COMSOL Multiphysics 4.2 y resuelto numéricamente usando el Método de Elemento Finito. La discretización se realizó con una malla no estructurada con una densificación sobre la frontera del dominio, donde se concentran los mayores gradientes de temperatura, humedad y concentración de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>. Se emplearon elementos tetraédricos cuadráticos y un esquema de integración de cuatro puntos de Gauss.

Para la resolución del sistema de ecuaciones se empleó el método iterativo GMRES (Generalized Minimum RESidual). El número máximo de iteraciones por espacio de tiempo fue fijado en 10<sup>4</sup> y la tolerancia relativa se mantuvo en el valor 0.01, que por defecto propone el programa para ambos parámetros. El GMRES tiene la ventaja en comparación con los demás métodos iterativos disponibles en COMSOL de que aunque requiere más memoria y tiempo de cálculo arroja resultados más robustos.

# 3. RESULTADOS OBTENIDOS

#### 3.1 Casos analizados

El modelo fue aplicado para simular el almacenamiento de granos de trigo desde Enero a Julio para las condiciones climáticas de la zona de Balcarce, provincia de Buenos Aires. Se consideró una temperatura inicial de embolsado del grano de 25°C, típica de esta zona agrícola y otra excepcionalmente elevada de 40°C y humedades iniciales en el rango 12-16% bh (base húmeda).

Tomando los valores reportados por Osborn et al., (1992), para las permeabilidades al oxígeno y dióxido de carbono del HDPE y LDPE y aplicando la ecuación (12), resulta  $P_{O_2}$  9.75  $10^{-8}$  m<sup>3</sup> md<sup>-1</sup> m<sup>2</sup> at<sup>-1</sup> y  $P_{CO_2}$  3.22 $10^{-7}$  m<sup>3</sup> md<sup>-1</sup> m<sup>2</sup> at<sup>-1</sup>. Para un espesor promedio de 240 µm la permeancia al O<sub>2</sub> es 4.06  $10^{-4}$  m<sup>3</sup> d<sup>-1</sup> m<sup>2</sup> at<sup>-1</sup> y al CO<sub>2</sub> 1.34  $10^{-3}$  m<sup>3</sup> d<sup>-1</sup> m<sup>2</sup> at<sup>-1</sup>.

Los valores encontrados en la literatura para el coeficiente de difusión efectivo del dióxido de carbono a través de un lecho de trigo varían entre  $3.7 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  (Ileleji et al., 2006) a  $7.610^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  (Shunmugan et al., 2005). Para este trabajo se consideró  $D^*_{CO2}$  igual a  $3.97 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$  y  $D^*_{O2}$  igual a  $5.22 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ de acuerdo a los valores de tortuosidad y porosidad del lecho que figuran en la Tabla 1.

En la Tabla 1 se listan los parámetros del lecho de trigo empleados en este trabajo.

Densidad del lecho de trigo [kgm <sup>-3</sup> ]	$ \rho_b = 824 $			
Porosidad del lecho	$\varepsilon = 0.38$			
Cond. térmica del grano de trigo [Wm <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	$k_g = 0.14 + 0.68W$			
Calor esp. de grano de trigo [Jkg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	$c_g = 1300 + 4187W$			
Ecuación de Henderson [Pa]	$K_H = 2.31 \ 10^{-5} \; ;  C_H = 55.813  N = 2.2857$			
CO <sub>2</sub> producido por respiración, mg [CO <sub>2</sub> ] /kg [materia seca] en 24 hs	$a_1 = -4.054;$ $a_2 = 0.0406;$ $a_3 = -0.0165;$ $a_4 = 0.0001;$ $a_5 = 0.2389$			
Tortuosidad	$\tau = 1.53$			

Tabla 1: Propiedades del grano y lecho de trigo

# 3.1.1 Evolución de la concentración de gases. Distribución inicial uniforme de temperatura y contenido de humedad de los granos

Para condiciones iniciales uniformes, las ecuaciones (15) y (16) se reducen a  $T(x, y, z, t=0)=T_0$  y  $W_g(x, y, z, t=0)=W_0$ . Por otro lado, dado que la radiación solar incidente es independiente de la dirección longitudinal del silo (salvo en los extremos del silo generando efectos de borde que no se consideran en este trabajo), este problema se reduce a un análisis 2D.

La Figura 3 muestra, para una sección transversal del silo-bolsa en el plano xy, perfiles típicos de temperatura (a), contenido de humedad (b) y producción de CO<sub>2</sub> (c). Los mismos corresponden a las peores condiciones de almacenamiento, es decir, grano húmedo y caliente a 16 %bh y 40°C, al mediodía del primer y décimo día de almacenamiento.

Las fluctuaciones de temperatura en respuesta a las condiciones climáticas se concentran en una capa de unos 30 cm debajo de la superficie (Figura 3a). En el centro, a pesar de la energía liberada durante la respiración no se registra un aumento de la temperatura debido a que la razón (área de intercambio/ volumen del silo-bolsa) resulta elevada (Gastón et al., 2009). La migración de la humedad hacia la base y superficie de la bolsa, opuesta a los gradientes de temperatura, resulta del orden de 1%bh (Figura 3b). La velocidad de producción de CO<sub>2</sub> sigue el comportamiento de la distribución de la temperatura (Figura 3c).

La Figura 4 muestra las correspondientes distribuciones de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>. A pesar que en la zona central la respiración es de dos a tres veces más intensa que en la periferia de la bolsa, los gradientes de concentración son del orden de 0.05% V/V/m, como consecuencia del transporte por difusión.

Para cada paso de tiempo, integrando la distribución local de  $O_2$  y  $CO_2$  en  $\Omega$  se determinó la evolución de la concentración promedio. Los resultados para (40C -12%bh) y (40C-16 %bh) se presenta en la Figura 5. La misma incluye las evoluciones predichas con el modelo global (Abalone et al., 2011a, b) para las mismas condiciones. Esta comparación permite cuantificar el efecto de promediar los gradientes de temperatura y humedad en la evaluación del término fuente de consumo de  $O_2$ , que es fuertemente dependiente de estas variables. El modelo global emplea la temperatura promedio y el contenido inicial de humedad en la ecuación (5), mientras que el modelo 3D valores locales. Para grano seco (12%bh) las diferencias son despreciables mientras que para grano húmedo resultan menores a 1% V/V.

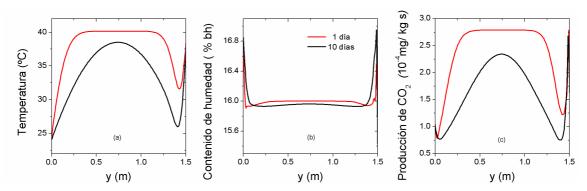


Figura 3: Perfil de temperatura(a), contenido de humedad (b) y velocidad de respiración (c) en dirección vertical para una sección transversal del silo-bolsa. Condiciones iniciales de embolsado 40°C y 16%bh.

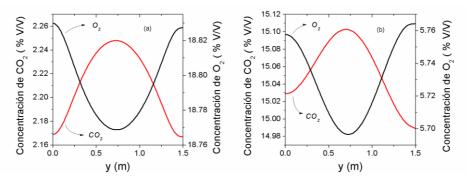


Figura 4: Perfil de concentración de CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> en dirección vertical para una sección transversal del silo-bolsa al cabo de un día (a) y 10 días (b) de almacenamiento. Condiciones iniciales de almacenamiento 40°C y 16%bh.

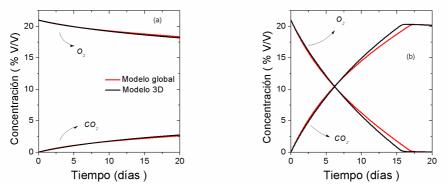


Figura 5: Comparación de la evolución de la concentración media O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> predicha con el modelo global y el modelo 3D. Temperatura inicial 40°C. MC 12%bh (a). MC 16%bh (b).

De este conjunto de resultados pueden obtenerse varias conclusiones relacionadas a la implementación de un protocolo de monitoreo de las bolsas. Gradientes de concentración del orden de 0.05% V/V/m difícilmente sean medibles en las bolsas en el campo, por lo que a los fines prácticos, puede considerarse que la distribución es uniforme. Desde el punto de vista teórico, esta distribución uniforme es previsible dado que la razón de la resistencia interna/resistencia externa a la transferencia de gases  $(Bi=Vh_i/AD_i^* i=CO_2,O_2)$  resulta del orden de  $10^{-4}$ .

En concordancia con esta predicción teórica, en las experiencias realizadas a campo no se detectó una estratificación de las concentraciones en el eje vertical de los silo-bolsa (Bartosik et al., 2008; Cardoso et al., 2008). Este comportamiento juega a favor de la adopción de un

protocolo de monitoreo de las bolsas, basado en el nivel de CO<sub>2</sub>. Para una dada sección transversal de la bolsa, el muestreo en uno o dos lugares debajo de la superficie (valores locales de la concentración) serían suficientes para reunir información sobre el estado de conservación del grano, ya que si bien la zona afectada (por ejemplo un foco con mayor generación de CO<sub>2</sub> en la base del silo) puede no ser la zona testeada, su efecto rápidamente se difunde hacia esta última.

Dado que la evolución de la concentración en cualquier punto de la bolsa (valor local) resulta prácticamente coincidente con la evolución promedio, puede concluirse que para distribuciones uniformes del contenido de humedad y la temperatura, el modelo global, más simple, puede emplearse para generar las curvas de referencia para las distintas condiciones de almacenamiento según la zona agrícola. Diferencias del orden de 1%V/V entre el modelo global y 3D son del mismo orden de magnitud que los errores experimentales involucrados en las mediciones de la concentración de los gases en las bolsas en el campo.

# 3.1.2 Evolución de la concentración de gases. Efecto de una distribución inicial no uniforme de contenido de humedad de los granos

El llenado de un silo-bolsa (200 toneladas) se realiza cargando grano proveniente de tolvas de aproximadamente 20 toneladas de capacidad. Por diversos factores, el contenido de humedad de los grano de una tolva a otra puede variar de 2 a 4% bh. Para simular una distribución inicial con estas características y analizar la evolución de la concentración en la dirección longitudinal del silo, se propuso una función tipo escalón  $W_g(x, y, z, t=0) = f(z)$  (ecuación (16)), combinando valores correspondientes a grano húmedo y seco: 12m de la bolsa a 16% bh y el resto a 12% bh; 12m a 14% bh y el resto a 12% bh.

Por simetría, la Figura 6, correspondiente a media bolsa, muestra la condición inicial de almacenado (a), la concentración de  $CO_2$  (b) y la de  $O_2$  (c) en la dirección longitudinal del silo-bolsa, para la combinación 14-12% bh y la Figura 7 para 16-12% bh. En ambos casos, la temperatura inicial fue de  $40^{\circ}$ C.

En ambos gráficos se observa una zona de "transición", debido a la difusión, donde los valores de concentración son sustancialmente diferentes a los correspondientes a un embolsado uniforme fijados como referencia (ver Tabla 2). Para la condición 14-12% bh, la longitud es del orden de 6m, mientras que para 16-12% bh del orden de 12 m.

Estos resultados muestran la importancia de llevar un registro de las humedades de embolsado a lo largo de la bolsa, a fin de realizar una correcta interpretación de los valores medidos durante el monitoreo. En este caso, los valores más elevados de CO<sub>2</sub> en la zona de transición no son el resultado de un proceso de deterioro, sino del transporte desde la zona húmeda a la seca. Por otro lado, si no existe un registro de humedades iniciales por tolva, realizando un monitoreo temprano (5 días después de embolsado) con un espaciamiento de unos 6 m entre puntos de muestro podría detectarse el llenado no uniforme. En la Tabla 2 se presentan los valores de referencia para 16, 14 y 12% bh y los correspondientes a zonas extremas del silo. Al cabo de un mes de embolsado, los cambios en estas zonas son del orden del 1% V/V. Si sólo se testea el silo en el extremo seco a 12% bh, diferencias de esta magnitud son comparables a los errores en las mediciones a campo, por lo que la presencia de zonas húmedas factibles de deterioro, podrían no ser detectadas.

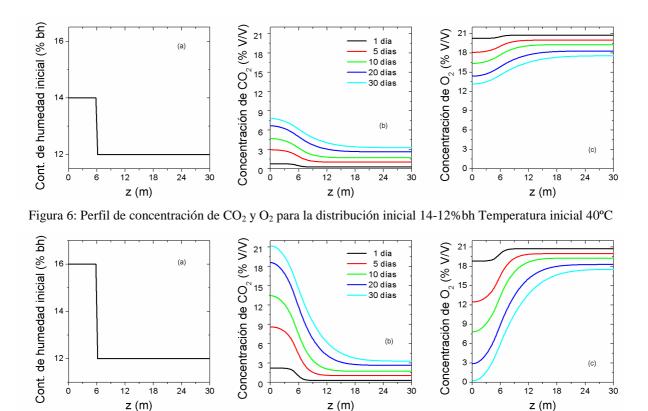


Figura 7: Perfil de concentración de CO<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> para la distribución inicial 16-12% bh Temperatura inicial 40°C

Contenido de humedad inicial	$O_2\%(V/V)$	O <sub>2</sub> %(V/V)	$CO_2\%(V/V)$	CO <sub>2</sub> %(V/V)
Contemdo de numedad miciai	10 días	30 días	10 días	30 días
16%	8.4	0.0	12.4	19.5
14%	16.7	13.8	4.2	6.8
12%	19.5	18.5	1.5	2.3
16-12%				
Zona a 16% entre $0 \le z \le 6m$ (z=3m)	9.0	1.6	12.1	19.5
Zona a 12% entre 15≤ z ≤30m	19.3	17.5	1.7	3.3
14-12%				
Zona a 14% entre $0 \le z \le 6m$ (z=3m)	16.7	13.5	4.4	7.4
Zona a 12% entre 15≤ z ≤30m	19.3	17.5	1.7	3.3

Tabla 2: Comparación del nivel de O<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> para una distribución de humedad uniforme y una tipo escalón.

# 3.1.3 Evolución de la concentración de gases. Efecto de perforaciones de la cobertura plástica

El intercambio de gases intergranarios con el medio ambiente depende de la permeabilidad del silo-bolsa. La misma es función del espesor y de la combinación de tipo de polietileno fijada en el proceso de fabricación. Por otro lado, una inspección cuidadosa de los silos-bolsa en el campo, revela la presencia de pequeñas perforaciones producidas por animales o rastrojo. Este daño puede cambiar significativamente la permeabilidad efectiva (cobertura plástica + perforaciones), modificando la evolución de la concentración de los gases así como generando zonas localizadas donde la combinación del oxígeno disponible para la respiración, temperatura y humedad relativa intergranaria sean propicias para el deterioro del grano.

Dado que la presencia de estas perforaciones es aleatoria, es difícil caracterizar la permeabilidad efectiva de las bolsas en el campo. A fin de estimar la magnitud de los cambios

de concentración que éstas pueden producir, se simuló la evolución de la concentración en un silo con perforaciones de distinto diámetro y se compararon los resultados con los de un silobolsa sin perforaciones (caso base). Se consideraron perforaciones de 3, 5 y 10 mm de diámetro por metro de silo-bolsa, semejantes a las producidas por el rastrojo en el campo. Se consideró trigo a 13% bh y a 15% bh, embolsado con una temperatura inicial de 25°C.

La Figura 8 muestra los resultados para 13% bh. A mayor diámetro de la perforación, mayor la diferencia con respecto al caso base. La concentración de CO<sub>2</sub> disminuye 0.75, 1 y 2 % V/V, mientras que la del O<sub>2</sub> aumenta 1.5, 2 y 4.5 % V/V al cabo de 180 días para una perforación por metro de silo de 3, 5, 10 mm de diámetro, respectivamente. La Figura 9 muestra los resultados para 15% bh con cambios muy significativos con respecto al caso base, con diferencias máximas de 2% V/V para el CO<sub>2</sub> y 6 % V/V para el O<sub>2</sub>.

Tanto para grano seco como húmedo, con una perforación de 10 mm de diámetro por metro de silo-bolsa, el nivel de O<sub>2</sub> comienza a aumentar durante la última etapa (120-180 días). Esto se debe a que a medida que avanza el invierno, al disminuir la temperatura del grano decrece la velocidad de respiración y el ingreso de O<sub>2</sub> resulta mayor que el consumo. En el silo húmedo sin perforaciones siempre el consumo resulta mayor que el ingreso de O<sub>2</sub>, alcanzándose la condición de anaerobiosis favorable para la conservación a cabo de los 90 días. La disponibilidad de O<sub>2</sub> en una bolsa húmeda aumenta el riesgo de deterioro del grano porque la actividad biológica de la microflora podría reactivarse. Así mismo, al continuar respirando aumentará la pérdida de materia seca del grano, pudiendo superarse límites admisibles para el empleo del grano para semilla (Abalone et al., 2011b). Para las perforaciones de 3 y 5mm, la Figura 9a y 9b muestra que los niveles de O<sub>2</sub> se mantienen por debajo del 1.5% V/V, cercano a la condición de anaerobiosis.

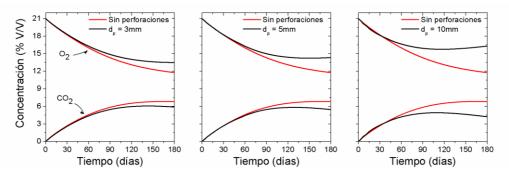


Figura 8: Comparación de la evolución de la concentración promedio de O2 y CO2 para un silo-bolsa sin perforaciones y con una perforación de 3mm, 5mm y 10mm de diámetro, 13% bh y 25°C.

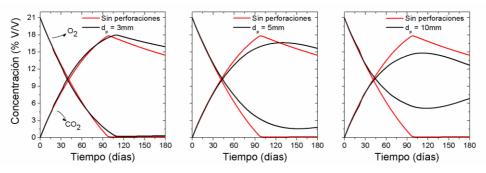
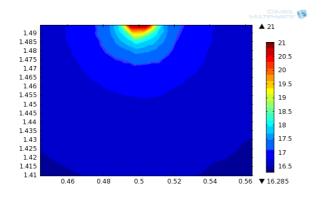


Figura 9: Comparación de la evolución de la concentración promedio de O2 y CO2 para un silo-bolsa sin perforaciones y con una perforación de 3mm, 5mm y 10mm de diámetro, 15% bh y 25°C

Para la perforación de 10 mm de diámetro, la Figura 10 y la Figura 11 muestran una zona de unos 10cm de radio donde el O<sub>2</sub> es superior a 17 y a 10% V/V, para grano a 13% bh y a 16% bh, respectivamente. Una eventual infiltración de agua aumentará el contenido de humedad y con esto la humedad relativa del aire intergranario, resultando este sector un foco de deterioro.



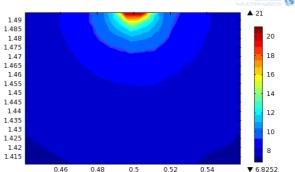


Figura 10: Distribución de  $O_2$  alrededor de una perforación de 10 mm de diámetro, en el plano yz, al cabo de 180 días para grano a 13% bh

Figura 11: Distribución de O<sub>2</sub> alrededor de una perforación de 10 mm de diámetro, en el plano *yz*, al cabo de 180 días para grano a 15% bh

#### **CONCLUSIONES**

Mediante la aplicación de un modelo 3D acoplado de transporte de energía y masa se analizó la evolución de la concentración de  $O_2$  y  $CO_2$  en un silo-bolsa. Las principales conclusiones que se obtienen de este estudio en relación a la implementación de un protocolo de monitoreo de las bolsas basado en la comparación del nivel de  $CO_2$  con valores de referencia son las siguientes:

- 1. Para condiciones de embolsado homogéneas en temperatura y humedad, la concentración de los gases en toda la bolsa es uniforme. En este caso, para las condiciones más adversas de embolsado (grano húmedo y caliente), las predicciones del modelo 3D difieren a lo sumo en 1%V/V respecto del modelo global. Para construir las curvas de referencias para un amplio rango de condiciones iniciales y zonas agroclimáticas puede emplearse el modelo global, más simple.
- 2. Es conveniente tener un registro del contenido de humedad de cada tolva o tanda de granos que se embolsa. Debido a la difusión en dirección longitudinal se producen zonas de transición en donde el nivel de concentración aumenta significativamente respecto al de referencia. Sin embargo, este aumento no es el resultado de un proceso de deterioro de la zona en cuestión.
- 3. De no contar con este registro, un testeo espaciado unos 6m a lo largo de la bolsa dentro de los primeros días de embolsado permite obtener información respecto a la distribución de humedades iniciales a lo largo de la bolsa.
- 4. Una perforación de 10 mm de diámetro por metro de bolsa altera significativamente la evolución de la concentración de  $O_2$  y  $CO_2$ . Para grano con humedades superiores a 15% bh y a alta temperatura, los niveles de  $O_2$  son superiores al 6% V/V y la actividad biológica de la microflora podría reactivarse.

### **AGRADECIMIENTOS**

Los autores agradecen a las siguientes Instituciones: ANPCYT/FONCYT (PICT 2008 0460), Universidad Nacional del Rosario (PID ING295) y al INTA-PRECOP Proyecto: Eficiencia en la Postcosecha, por el financiamiento del presente trabajo.

#### **NOMENCLATURA**

 $O_2$ 

```
parametros de la ecuación de respiración, velocidad de producción de CO<sub>2</sub>,
a_1, a_2, a_3, a_4, a_5
                         adimensional, °C<sup>-1</sup>, s<sup>-1</sup>, s<sup>-2</sup>, adimensional, respectivamente
           área de intercambio de gases del silo bolsa por metro de silo-bolsa, (m<sup>2</sup>)
A_{s}
           coordenadas cartesianas
x, y
           calor específico del lecho de granos (Jkg<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>)
c_b
           velocidad del material seca consumida en la respiración aeróbica, en mg [materia
d_m
           seca] kg<sup>-1</sup> [materia seca] en 24 h
           difusividad efectiva del vapor de agua en el lecho (m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>)
D_{ef}
           difusividad efectiva de los gases a través del lecho, i = O_2, CO_2, (m^2s^{-1})
D_i
G
           radiación solar incidente sobre la superficie del silo-bolsa (Wm<sup>-2</sup>)
           coeficiente de transferencia de calor por convección (Wm<sup>-2</sup> K<sup>-1</sup>)
h_c
           conductividad térmica del lecho de granos (Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>)
k_b
           dimensión longitudinal del silo-bolsa (m)
L_{7}
           espesor del plástico del silo-bolsa (m)
L_e
           calor de desorpción del agua en el grano (calor de vaporización) (Jkg-1)
L_g
           contenido de humedad del grano (base húmeda, kg / kg grano húmedo)
           masa molecular del CO<sub>2</sub>, 44 gramos mol<sup>-1</sup>
M_{CO2}
           dirección normal
P_{atm}
           presión atmosférica, 101325 Pa
           permeabilidad del plástico al O<sub>2</sub>, m<sup>3</sup>md<sup>-1</sup>m<sup>-2</sup>at<sup>-1</sup>
P_{02}
           permeabilidad del plástico al CO<sub>2</sub>, m<sup>3</sup>md<sup>-1</sup>m<sup>-2</sup>at<sup>-1</sup>
P_{CO2}
           permeabilidad efectiva del plástico, i= O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>
P_i
           calor de respiración, 10.738 J mg<sup>-1</sup> [CO<sub>2</sub>]
q_H
           vapor de agua producido en la respiración, 4.09 10<sup>-5</sup> kg [H<sub>2</sub>O] mg<sup>-1</sup> [CO<sub>2</sub>]
q_w
           velocidad de producción de O<sub>2</sub>, en m<sup>3</sup>s<sup>-1</sup> kg materia seca
r_{O2}
           velocidad de producción de CO<sub>2</sub>, en m<sup>3</sup>s<sup>-1</sup> kg materia seca
r_{CO2}
           constante universal de los gases, 8.314 J mol<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>
R
           tiempo (s)
T
           temperatura (°C)
T_k
           temperatura absoluta (K)
           temperatura inicial de los granos (°C)
T_0
           volumen del lecho de granos, m<sup>3</sup>
V
           contenido de humedad del grano (base seca, kg / kg grano seco)
W_0
           contenido de humedad inicial de los grano (base seca, kg / kg grano seco)
           velocidad de producción de CO<sub>2</sub>, mg [CO<sub>2</sub>] kg<sup>-1</sup> [materia seca] en 24 h
Y_{CO2}
           concentración de CO<sub>2</sub>, % V/V
CO_2
```

concentración de O2, % V/V

# **Letras Griegas**

- $\alpha$  absortividad del silo-bolsa
- $\varepsilon$  porosidad (m<sup>3</sup> de aire/ m<sup>3</sup> de lecho)
- $\Gamma$  frontera del dominio
- $\eta$  cambio de presión parcial  $p_v$  respecto al contenido de humedad, a temperatura constante, (Pa)
- $\rho_b$  densidad del lecho de granos (kg grano húmedo/m<sup>3</sup> del lecho)
- $\rho_{bs}$  materia seca por volumen de lecho (kg grano seco /m<sup>3</sup> del lecho)
- $\sigma$  constante de Stefan-Boltzmann, 5.6697  $10^{-8}$  Wm<sup>-2</sup> K<sup>-4</sup>
- $\omega$  cambio de presión parcial  $p_v$  respecto a la temperatura, a contenido de humedad constante,  $(PaK^{-1})$
- $\xi$  emisividad del silo-bolsa

### **Subíndices**

a aire intersticialamb ambiente

cielo cielo

b grano bulk

g grano 0 inicial suelo suelo

# **REFERENCIAS**

- Abalone, R., A. Gastón, R. Bartosik, L. Cardoso and J. Rodríguez,. Gas concentration in the interstitial atmosphere of a wheat silo-bag. Part I: Model development and validation. *Journal of Stored Products Research*. doi: 10.1016/j.jspr.2011.05.004. 2011a.
- Abalone, R., A. Gastón, R. Bartosik, L. Cardoso e J. Rodríguez. Gas concentration in the interstitial atmosphere of a wheat silo-bag (2010b). Part II: Model sensitivity and effect of grain storage conditions. *Journal of Stored Products Research*. doi: 10.1016/j.jspr.2011.05.003. 2011b.
- Abalone, R. y A. Gastón "Mathematical modelling of oxygen and carbon dioxide concentration profiles in the interstitial atmosphere of silo-bags". *Proc of XXXIV CIOSTA CIGR V Conference 2011: Efficient and safe production processes in sustainable agriculture and forestry*, 29 Junio al 1 Julio, Viena, Austria. (CD), 2011.
- Abalone, R. M., A. Gastón, A. Cassinera y M. A. Lara. Modelización de la distribución de la temperatura y humedad en granos almacenados en silos. *Mecánica Computacional* Vol. XXV, 233-247, 2006.
- Bartosik, R. E., M. L. Cardoso y J.C. Rodríguez. Early detection of spoiled grain stored in hermetic plastic bags (silo-bags) using CO<sub>2</sub> monitoring. *Proc. of the 8th International Conference on Controlled Atmosphere and Fumigation in Stored Products*, 21-26 September, Chengdu, China, 550-554, 2008.
- Cardoso, M.L., R.E. Bartosik, J.C. Rodríguez y D. Ochandio. Factors affecting carbon dioxide concentration in interstitial air of soybean stored in hermetic plastic bags (silo-bag). *Proc. of the 8th International Conference on Controlled Atmosphere and Fumigation in Stored Products*, 21-26 September, Chengdu, China, 565-568, 2008.

- Fonseca, S.C., F.A.R. Oliveira y J.K. Brecha. Modelling respiration rate of fresh fruits and vegetables for modified atmosphere packages: a review. *J. Food. Engineering*, 52: 99-119, 2002.
- Gastón, A., R. Abalone, R.E. Bartosik, y J.C. Rodríguez. Mathematical modelling of heat and moisture transfer of wheat stored in plastic bags (silo-bags). *Biosystems Engineering* Vol 104(1): 72-85. ISSN 1537-5110. doi: 10.1016/j.biosystemseng.2009.06.012, 2009.
- Geankoplis, C. J. Transport processes and unit operations, 3th Edition, CECSA, México, 1998.
- Ileleji, K. E., D. E. Maier, C. Blat y C. P. Woloshuk Detection of a developing hot spot in stored corn with a CO<sub>2</sub> sensor. *Applied Engineering in Agriculture*, 22: 275-289, 2006.
- Navarro, S, .E. Donahaye y S. Fishman. The future of hermetic storage of dry grains in tropical and subtropical climates. *Proc. of the 6<sup>th</sup> International Working Conference on Stored-Product Protection*, 17-23 April, Canberra, Australia, 130-138, 1994.
- Osborn, K.R., and W.A Jenkins. *Plastic Films. Technology and Packaging Applications*. Theonomic Publishing Co, Lancaster, Penn, 1992.
- Rodríguez, J. C., R.E. Bartosik, M.L. Cardoso y D. Crocce. Factors affecting carbon dioxide concentration in interstitial air of wheat stored in hermetic plastic bags (silo-bag). *Proc. of the 8th International Conference on Controlled Atmosphere and Fumigation in Stored Products*, 21-26 September, Chengdu, China, 589-592, 2008.
- Shunmugam, G., D. S. Jayas; N. D. G. White y W E Muir. Diffusion of carbon dioxide through grain bulks. *Journal of Stored Products Research*, 41: 131-144, 2005.
- Song, Y., N. Vorsa y K.L. Yam. Modeling respiration-transpiration in a modified atmosphere packaging system containing blueberry, *Journal of Food Engineering*, 53: 103-109. 2002.
- White, N.D.G, R.N. Sinha y W.E. Muir. Intergranular carbon dioxide as an indicator of biological activity associated with the spoilage of stored wheat. *Canadian Agricultural Engineering*, 24(1): 35-42, 1982.