**AGROCENTRO**

**Modelos Físicos-Matemáticos de Difusión de agua en granos**

***Physical-Mathematical models of water Diffusion in grains***

**Williams Morales González1, Jesús E. Hernández Ruiz2, Bárbara S. Martínez Chinea3**

1- Estudiante 4to Año Licenciatura en Física y Alumno Ayudante Laboratorio de Física Molecular y Termodinámica del Dpto. de Física. Facultad de Matemática, Física y Computación. Universidad Central ‘’Marta Abreu’’ de Las Villas, Carretera a Camajuaní Km 5½ Santa Clara 54 830. Villa Clara. Cuba. E-mail: wmorales@uclv.cu, wilianmorales@nauta.cu

2- Profesor Titular del Dpto. de Física. Facultad de Matemática, Física y Computación. Universidad Central ‘’Marta Abreu’’ de Las Villas, Carretera a Camajuaní Km 5½ Santa Clara 54 830. Villa Clara. Cuba.

3- Empresa de Silos y Molinos (EMSIL). UEB Villa Clara, Cuba.

**Resumen:** En el presente artículo se realiza un estudio teórico de la difusión de humedad en granos almacenados por tiempos prolongados en Silos Metálicos Refrigerados (SMR). Se describen algunos de los modelos físicos-matemáticos reportados en la literatura especializada en el tema. Se presentan y discuten, la formulación y soluciones de los modelos de difusión de humedad en granos de geometría esférica. Finalmente, se presentan las conclusiones y se describen brevemente los estudios que en el futuro serán realizados, para obtener los regímenes adecuados de operación de los sistemas refrigerados que contemple el conocimiento del comportamiento de cada tipo de grano en función del contenido de humedad y de la temperatura.

***Abstract:*** *In this paper the theorical study of moisture diffusion in grains, that remains for long time in Metallic Refrigerate Silos (MRS) is described. Some of the physical-mathematical models reported in the specialized literature in this thematic are described. The formulation and solutions of the moisture diffusion models in spherical geometry grains are presented and discussed. Finally, the conclusions are presented and the studies that will be carried out in the future are briefly de-scribed, to obtain the adequate operating regimes of the refrigerated systems that includes knowledge of the behavior of each type of grain according to the moisture content and the temperature.*

**Palabras Clave:** Difusión; Humedad; Granos; Silos Metálicos Refrigerados.

***Keywords:*** *Diffusion; Moisture; Grains; Metallic Refrigerate Silos.*

**1. Introducción**

Los granos son materiales higroscópicos y en ellos ocurre transporte de humedad por difusión, los altos contenidos de humedad junto a favorables condiciones de temperaturas favorecen el desarrollo de bacterias, hongos e insectos, además de que la actividad metabólica de los granos, insectos y hongos generan calor, agua y CO2; lo que trae consigo una degradación, de sus propiedades nutritivas, mecánicas y físicas, en general de la calidad; el valor económico, alimenticio, agrícola e industrial de los granos y semillas dependen de ésta calidad.

El problema del transporte de humedad en granos ha recibido gran atención en el pasado como es el caso de (Pixton and Griffiths, 1971; Thorpe, 1981; Thorpe, 1982; Deshpande et al., 1994) y en el presente (Montanuci et al. 2013; Pérez et al., 2014). En este sentido, la literatura especializada reporta ampliamente el estudio de la hidratación, como es el caso del Modelo de Peleg (1988), y de la difusión de humedad y agua en diferentes tipos de granos y su modelación analítica y numéricamente de este proceso empleando en su mayoría modelos Fickianos de difusión, por general en estructuras esféricas y cilíndricas de diferentes tipos de granos (Hsu, 1984; Lu and Siebenmorgen, 1992; Casada, 2002). También, se reporta el estudio del transporte global de humedad en silos y otras estructuras de almacenamiento de granos como (Smith y Sokhansanj, 1990; Thorpe et al., 1991; Thorpe et al., 1991A; Jian et al., 2009; G. Xanthopoulos and J.L. Woods. 2003).

1. **Humectación de los Granos**

Situados en ambientes con contenidos de humedad superiores a la que ellos mismos contienen, inicialmente se recubren de agua, la que posteriormente se difunde en su estructura (Hsu, 1984). Esto adquiere una connotación especial en las condiciones de climas tropicales y húmedos, como el cubano.

Debido a todo esto, el cuidado y control que se requiere sobre las variables físicas de humedad y temperatura en las diferentes etapas que involucran el manejo de los granos.

Sin embargo, por tratarse de la etapa más prolongada, es durante el almacenamiento el momento en que se extreman las medidas de control de estas variables. La Empresa de Silos (EMSIL), en Cuba, es la encargada del almacenamiento y la conservación de los granos de importación y de producción nacional, por tiempo prolongado con la calidad requerida.

La durabilidad de los granos está básicamente determinada por su capacidad para resistir la penetración de la humedad y otros agentes agresivos. La durabilidad es, por tanto, críticamente determinada por la velocidad con la cual la humedad se infiltra y se mueve a través de la estructura del grano. La adsorción y desorción de humedad por los granos puede conducir al desarrollo de tensiones internas, y éstas como las externas son la causa de las fisuras del núcleo de los granos (Muthokumarappan y Gunasekaran, 2008). La humectación del grano produce grietas y fisuras, lo cual aumenta la tasa de difusión de humedad (Pérez et al., 2014). También, la penetración de humedad en diversos tipos de granos puede proveer un mecanismo y camino para la penetración de mayor cantidad de agua y al mismo tiempo de agentes agresivos y dañinos a los granos. La humectación de los granos está estrechamente relacionada con la temperatura.

Para prevenir que el grano absorba humedad del medio ambiente, es recomendable secarlo bien y almacenarlo dentro de un recipiente cerrado que prevenga la libre entrada de la humedad; el Silo Metálico Refrigerado (SMR) ofrece una barrera física a la entrada de humedad y de esta forma se puede almacenar grano por un año o más, con humedades en equilibrio inferiores que las encontradas en el medio ambiente.

El presente trabajo tiene el propósito de desarrollar modelos físicos-matemáticos, reportados en la bibliografía especializada, que son una fuerte y necesaria herramienta para determinar los tiempos óptimos de almacenamiento de diferentes tipos de granos y los regímenes óptimos de operación de los SMR, para con consumos mínimos de energía en los SMR obtener los niveles adecuados de temperatura en función del contenido de humedad, para evitar la aparición de gérmenes y garantizar que no se degraden las propiedades de los granos almacenados más allá de los límites permisibles.

**2. Metodología**

Como resultado del estudio de la literatura especializada en el tema de Difusión de agua en granos, se seleccionaron modelos físicos-matemáticos, aplicables a un ensayo general de humectación y de remojo.

1. **Modelos físicos matemáticos para la Difusión de Humedad en granos**

La teoría matemática de la difusión, primero enunciada por Fick (1855), es considerada en detalles por Crank (1956) y otros (Pixton, S. W. and Griffiths, H. J. ,1971).

La teoría de la difusión en un medio isotrópico es basada en la hipótesis de que el ritmo de transferencia de la sustancia difusida por unidad de área de la sección es proporcional al gradiente de concentración medido normal a la sección, i.e.

Donde es el ritmo de transferencia por unidad de área de la sección, es la concentración, y la coordenada espacial normal a la sección. , es la constante de proporcionalidad, definida como el coeficiente de difusión, El signo negativo en la ecuación se debe a que la difusión ocurre en la dirección del decrecimiento de la concentración (Pixton and Griffiths, 1971)

La ecuación diferencial de la difusión, con constante coeficiente de difusión en un medio isotrópico, es derivada de la ecuación (I) y se reduce a:

Las ecuaciones (I) y (II) son la 1ra y 2da Ley de Fick de la difusión, respectivamente.

La ecuación para la difusión en coordenadas esféricas propuesta por Crank (1975) es:

Dónde es la concentración de humedad, es el tiempo,es la distancia radial,y es el coeficiente de difusión, Si el coeficiente de difusión es constante, entonces la ecuación (1) se puede simplificar de la forma:

La absorción y el equilibrio de humedad dependen en el mismo mecanismo de difusión por el movimiento de agua, la ecuación (2) debería ser descriptiva durante estos dos periodos. Las condiciones de frontera para estos dos periodos, sin embargo, son diferentes. Asumiendo que la humedad inicial de los granos es uniformemente distribuida y la concentración de humedad al centro del grano es finita, las condiciones iniciales y de frontera para el periodo de absorción quedan expresadas de la siguiente manera (Hsu, 1983):

Donde es la concentración de humedad inicial, es la concentración de saturación, y es el radio del grano,

Durante el periodo de equilibrio, los alrededores inmediatos al grano están esperando a estar cerca de la saturación, y un pequeño movimiento de humedad es de esperar entre el grano y sus alrededores. Bajo las circunstancias, la superficie del grano está asumida impermeable tal que el movimiento de humedad es restringido dentro del grano solamente. La inicial distribución de concentración será la misma como que al final del periodo de absorción. Así, las condiciones iniciales y de frontera para el periodo de equilibrio son (Hsu, 1983):

Donde es el perfil de humedad al final del periodo de absorción.

La solución de la ecuación (2), sujeta a las condiciones de frontera presentadas en (3), fue presentada por Crank (1975):

Donde es el tiempo de absorción , la ecuación (5) es válida para todo excepto para . Tendiendo al límite cuando , la ecuación (5) se convierte en:

Integrando la ecuación (5) en todo el volumen del grano esférico se obtiene (Crank, 1975):

Donde es la fracción del total de agua absorbible, absorbida después del tiempo, (Hsu, 1983).

La solución general de la ecuación (2), sujeta a las condiciones de frontera presentadas en (4) para el periodo de equilibrio, también fue presentada por Crank (1975):

Donde son las raíces positivas de

Ya que la ecuación (5) es el perfil de humedad del grano del fin de un periodo de absorción, esta debería ser también el perfil de la etapa inicial del periodo de equilibrio. Sustituyendo la ecuación (5) en la ecuación (8) tenemos (Hsu, 1983):

Donde es el tiempo de equilibrio *.* Esta ecuación permite un enlace entre los dos periodos. Por la integración de la ecuación (10), la solución específica para el periodo de equilibrio es obtenida:

De nuevo, pasando al límite cuando , la ecuación (11) se convierte en:

Las ecuaciones (11) y (12) son las únicas en que la distribución de humedad durante el periodo de equilibrio es descrita como una función no solo del tiempo de equilibrio, y la posición radial, también del tiempo transcurrido durante la absorción, Estas expresiones significan el efecto de la absorción en equilibrio (Hsu, 1983).

Para tiempos largos, la ecuación (7) puede ser ajustada para el cálculo del coeficiente de difusión (Agudelo, 2009):

El coeficiente de difusión puede ser calculado de la pendiente del lado izquierdo de la ecuación anterior versus el tiempo (Agudelo, 2009):

Generalmente la dependencia de la difusividad de la temperatura se describe por el modelo de Arrhenius de la forma (Sopade, 1990):

Donde es una constante; es la energía de activación, es la constante universal de los gases igual a , y es la temperatura,

El modelo de Peleg (1988) es una propuesta matemática simple, que además de su fácil manejo, ha sido validado en el modelamiento de fenómenos de absorción de agua para una gran cantidad de materiales, en general granos (Agudelo, 2009).

Según (Peleg, 1988) tenemos:

Dónde , contenido de humedad en el tiempo *t.* ; es contenido de humedad inicial. , constante de Peleg. , constante de capacidad de Peleg. (No depende de la temperatura)., tiempo de rehidratación. ; ,

Si hacemos un ajuste lineal de la ecuación (15) tenemos:

El Ritmo de absorción es:

Contenido de humedad en equilibrio :

Según (Sopade, 1992) tenemos la relación de Arrhenius:

Dónde , es la energía de activación, constante universal de los gases. , temperatura. , constante de Arrhenius referente a T.

Energías de activación bajas se traduce en una mayor facilidad para que el agua ingrese dentro del material (John, 2009).

Si hacemos un ajuste lineal de la ecuación (18) tenemos:

Según (Montanuci, 2013) tenemos las propiedades termodinámicas:

Dónde , es la Entalpía*.* , Entropía. , Energía libre de Gibbs. , constante de Boltzman., constante de Planck..

**3. Resultados y discusión**

Se emplea el ensayo general de humectación, el que comprende dos ensayos parciales. En el primero de ellos, se determina experimentalmente la calidad de los diferentes tipos de granos en función del incremento porcentual en masa húmeda con el tiempo de exposición de éstos, a una intemperie altamente humectante artificialmente creada para este fin. La data que se obtiene permite encontrar por técnicas de ajuste no lineal la ley empírica que correlaciona la calidad del grano, determinada a partir de las propiedades nutritivas, mecánicas o físico-química de los granos, con su incremento en masa húmeda. En el segundo ensayo, se determinan experimentalmente el incremento en masa húmeda de los diferentes tipos de granos en función del tiempo de exposición de éstos, en atmósferas con humedades relativas y temperaturas típicas del clima tropical húmedo, hasta alcanzar el equilibrio y empleando técnicas de ajuste lineal y no lineal, se ajusta la data experimental según los modelos matemáticos propuestos, de acuerdo con la geometría del grano, en general esférica, para estimar los coeficientes efectivos de difusión de la humedad en los diferentes tipos de granos para las diferentes humedades relativas y temperatura prefijadas, además de la energía de activación y otras propiedades termodinámicas como entalpía, entropía y energía libre de Gibbs.

Empleando los resultados de ambos ensayos de humectación y las expresiones de cálculo de los tiempos óptimos de almacenamiento, obtenidas como resultado de modelar el proceso de difusión de humedad y absorción de agua en los diferentes tipos de granos, se calculan los tiempos óptimos de almacenamiento de los diferentes tipos de granos a una temperatura y humedad dada.

**4. Conclusiones**

En Cuba hasta el momento no se ha llevado a cabo una investigación científica sobre éste tema debido a la reciente implementación de la conservación de granos en el país. En la última década se han realizado ingentes esfuerzos para la adquisición, instalación y operación de Silos Metálicos Refrigerados (SMR) para el almacenamiento y conservación de granos tales como chicharos, maíz y frijoles entre otros.

La refrigeración, como principal método de conservación, requiere al mismo tiempo de un riguroso control de la humedad y del conocimiento de la dependencia temperatura vs. humedad para cada tipo de grano almacenado, pues de lo contrario se pueden ocasionar gastos excesivos de energía por concepto de sobreenfriamiento, o lo que es más peligroso aún, buscando ahorros de energía, no se logren los niveles adecuados de temperatura en función del contenido de humedad para cada tipo de grano, y producirse el consecuente deterioro de la propiedades de los granos almacenados.

De aquí la importancia del estudio de modelos físicos-matemáticos de difusión de humedad y absorción de agua, para modelar estos procesos en los granos almacenados en los SMR por tiempo prolongados, y obtener los regímenes adecuados de operación de los sistemas refrigerados que contemplen el conocimiento del comportamiento de la temperatura en función del contenido de humedad en cada tipo de grano.

Actualmente se trabaja en la realización de un ensayo de rehidratación en diferentes tipos de granos, entre ellos maíz, frijoles y chícharo, a varias temperaturas por tiempos prolongados, en el laboratorio de la Posición de Silos Carbó Servía de la Empresa de Silos y Molinos (EMSIL) UEB Villa Clara, para una vez obtenidas las datas, aplicar lo antes expuesto en éste trabajo.

**5. Referencias bibliográficas**

1. Agudelo, O. J. (2009) Law enforcement Fick and Peleg model for study of water uptake in navel cargamanto yellow (phaseolus vulgaris l.) and peas seca (pisan sativa) during rehydration. Revista Publicaciones e Investigación Vol. 3, No. 1
2. Casada, M.E. (2002) Moisture adsorption characteristics of wheat and barley. Transactions of the ASAE Vol. 45. No. 2, 361-368.
3. Chung, D. S. and Converse, H. H (1971) Effect of Moisture Content on Some Physical Properties of Grains. TRANSACTIONS OF THE ASAE, 612-620.
4. Crank, J. (1975) The mathematics of diffusion. 2a ed. New York: Oxford University Press.
5. Deshpande, S. D., Bal S. and Ojha, T. P. (1994) A Study on Diffusion of Water by the Soybean Grain During Cold Water Soaking. Journal of Food Engineering Vol. 23, 121 – 127.
6. Febles, A. D. (2016) Evaluación del proceso de conservación de maíz en los silos metálicos refrigerado (SMR) de la posición Cuba Libre. Trabajo de Diploma. Departamento de Química e Ingeniería Química, Facultad de Ciencias Técnicas, Universidad de Matanzas Sede “Camilo Cienfuegos”.
7. Feitó, M. C. (2014) PLANIFICACIÓN DEL PROCESO ENFRIAMIENTO EN EL ALMACENAMIENTO DE MAÍZ EN SILOS METÁLICOS REFRIGERADOS. B. CEPPA, Curitiba, Vol. 32, No. 2, 333-345
8. G. Xanthopoulos and J.L. Woods (2003) A two-dimensional Model of Grain Storage with Dynamic Visualisation: Predictions for Temperature, Moisture Content, Germination and Respiration - a case study for rapeseed. Agro Thesis Vol. 1, No. 1: 19-27
9. Hernández Guzmán, J.A. and Carballo Carballo, A (2017) Almacenamiento de granos y semillas. Editado por: Secretaría de Agricultura. México. 8p. Disponible en: (Consultada en febrero de 2017).
10. Hsu, K. H. (1984) A theoretical approach to the tempering of grains. Cereal Chem. Vol. 61, No. 5, 466-470.
11. Jian, F., Jayas, D.S. and White, N.D.G. (2009) Temperature fluctuations and moisture migration in wheat stored for 15 months in a metal silo in Canada. Journal of Stored Products Research Vol. 45, 82–90.
12. Khankari, K. K., Morey, R. V. and Patankar, S. V. (1994) Mathematical model for moisture diffusion in stored grain due temperature gradients. Transactions of the ASAE VOL. 37, No. 5, 1591-1604.
13. Lu, R. and Siebenmorgen, T. J. (1992) Moisture diffusivity of long-grain rice components. Transactions of the ASAE Vol. 35, No. 6, 1955-1961.
14. Martínez López, Enrique. Importancia de la metrología en la determinación del contenido de humedad en granos, Centro Nacional de Metrología (CENAM) de México (Presentación, IV Encuentro Nacional de Metrología Eléctrica, 2012) (consultada en febrero de 2017).
15. Montanuci, F.D., Matos Jorge, L. M. and Matos Jorge R.M. (2013) Kinetic, thermodynamic properties, and optimization of barley hydration. Food Science and Technology Vol. 33, No. 4, 690-698.
16. Muthokumarappan, K. y Gunasekaran, S. (2008) Chapter 3: Modeling moisture diffusion in food grains during adsorption. p. 54 En: Food processing operations modeling. Design and analysis. Eds.: S. Jun y J.M. Irudayaraj, CRC Press Taylor & Francis Group. © 2009.
17. Navarro, S., Noyes, R., Armitage, D. and Maier, D. (2002) Objectives of aeration. En: The Mechanics and Physic of Modern Grain Aeration Management, eds. S. Navarro y R. Noyes. New York: CRC Press.
18. Nelson, S. O. (1981) Review of factors influencing the dielectric properties of cereals grains. Cereal Chem. Vol. 58, No. 6, 487-492.
19. Nelson, S. O., and A. W. Kraszewski. (1990) Grain moisture content determination by microwave measurements. Transactions of the ASAE Vol. 33, No. 4, 1303-1307.
20. Nelson, S. O., Trabelsi, S. and Kraszewski A. W. (1998) Advances in sensing grain moisture content by microwave. Transactions of the ASAE Vol. 41, No.2, 483-487.
21. Nelson, S. O., Trabelsi, S. and Kraszewski, A. W. (2001) RF Sensing of Grain and Seed Moisture Content. IEEE Sensors J. Vol. 1, No. 2, 119-126.
22. Paucar Nemacho, L. M. Respiración y patología de los granos y semillas (Presentación) Universidad Nacional del Santa, Perú. Disponible en: http://biblioteca.uns.edu.pe/saladocentes/archivoz/curzoz/001\_4ta\_clase\_granos\_ysemillas.pdf (consultada en febrero de 2017).
23. Peleg, Micha. (1988) An empirical model for the description of moisture sorption curves, Journal of Food Science. v. 53, p. 1216-1217,1219.
24. Pérez, J. et al. (2014) Numerical Modeling of Heterogeneous Moisture Diffusion in Milled Rice Grains: Diffusion Coefficient as a Function of Moisture, Temperature and Time. Food Science and Technology Research Vol. 20, No. 1, 59-64.
25. Pixton, S. W. and Griffiths, H. J. (1971) Diffusion of Moisture through Grain. J. Stored Prod. Res. Vol. 7, 133-152.
26. Reuss, R., Danicevski, K. and Annist, P.C. (1994) The impact of temperature, moisture content, grain quality and their interactions changes in storage vessel atmospheres. Proceedings of the 6th International Conference of Stored Product Protection, Vol. I p. 178-182. Publisher CAB International, Wallingford, Oxin, UK.
27. Sadaka, S. and Bautista, R. (2014) Grain Drying Tools: Equilibrium Moisture Content Tables and Psychrometric Charts. Publicado por: Division of Agriculture and Extension. University of Arkansas System. Disponible en: https://www.uaex.edu/publications/pdf/FSA-1074.pdf (consultada en febrero de 2017).
28. Seifi, R.F. and Alimardani, R. (2010) The Moisture Content Effect on Some Physical and Mechanical Properties of Corn (Sc 704). Journal of Agricultural Science Vol. 2, No. 4; 125-134.
29. Smith, E. A. and Sokhansanj, S. (1990) Moisture Transport Caused by Natural Convection in Grain Stores. J. Agric. Engng. Res. Vol. 47, 23-34.
30. Stapley, A. G. F. Fryer, P. J. and Gladden, L. F. (1998) Diffusion and Reaction in Whole Wheat Grains during Boiling. AIChE Journal Vol. 44, No. 8, 1777-1789.
31. Thorpe, G. R. (1981) Moisture diffusion through bulk grain. J. Stored Prod. Res. Vol. 17, 39-42.
32. Thorpe, G. R. (1982) Moisture diffusion through bulk grain subjected to a temperature gradient. J. Stored Prod. Res. Vol. 18, 9-12.
33. Thorpe, G.R., Tapia, J.A.O. and Whitaker, S. (1991) The diffusion of moisture in food grains. I. The development of a mass transport equation. Journal of Stored Products Research Vol. 27, No. 1, 1–9.
34. Thorpe, G.R., Tapia, J.A.O. and Whitaker, S. (1991) The diffusion of moisture in food grains. II. Estimation of the effective diffusivity. Journal of Stored Products Research Vol. 27, No. 1, 11–30.
35. Uddin, M. S., Armstrong, P. R. and Zhang, N. (2005) Accuracy of grain moisture content prediction using temperature and relative humidity sensors. Applied Engineering in Agriculture Vol. 22, No. 2, 267-273.