

## El método de las líneas y su aplicación en problemas de ingeniería de alimentos: secado en lechos fluidizados

Francisco Vidal Caballero Domínguez

Universidad Simón Bolívar

### Resumen

*Se determinó, por medio de simulación numérica, el comportamiento de las cinéticas de secado en un secador de lecho fluidizado para las semillas de amaranto (*Amaranthus hypochondriacus*), a temperaturas de alimentación del aire de 40, 50, 60 y 70 °C, con un contenido de humedad inicial de 0.20 (kg de agua/ kg de sólido seco). Las simulaciones demandan la solución de un sistema mixto de ecuaciones diferenciales parciales y ordinarias (EDP y EDO), lo anterior debido al control de la difusión sobre este proceso.*

*El método de las líneas consiste en tomar tramos de la longitud característica del problema, manteniendo la funcionalidad del tiempo. De este modo, la ecuación parcial es representada por un conjunto de ecuaciones ordinarias, las cuales pueden acoplarse con las ecuación restante provenientes del balance de energía.*

*La implementación del método fue exitosa y las predicciones alcanzadas con el modelo estudiado dan cierto grado de confiabilidad, pues los resultados se ajustan a datos de trabajos experimentales. Asimismo, las diversas simulaciones no muestran cambios importantes con pequeñas modificaciones en las diversas correlaciones utilizadas, como el coeficiente de difusión y la capacidad calorífica del grano. Sin embargo, la correlación para el coeficiente de actividad es muy sensible a pequeñas modificaciones. Esto puede ser motivo de un estudio adicional.*

**Palabras clave:** método de las líneas, PDE, Lecho fluidizado, secado, calor de vaporización– desorción.

### Abstract

*In this work fluidized bed drying curves were made by numeric simulation, the material inside the bed was amaranth grains (*Amaranthus hypochondriacus*) with different feeding air temperatures and initial humidity of 0.2 (dry basis). The system is described as a set of partial and ordinary differential equations (PDE and ODE) because of diffusion control; so lines method (MOL) replace a PDE by a set of ODE where every ODE perform a fraction of characteristic total length, finally, the rest of ODE's was coupled and then was solved like a augmented set of ODE's.*

*The applied method was successful and results obtained were compared with experimental works and were concluded that our simulations lead to better agreements. Small modifications on diffusion coefficient and grain's heat capacity was made in complementary simulations without meaningful changes, however we must be careful with activity coefficient correlation, because the simulations showed sensible behavior under small changes of this property. Additional studies on this property must be done.*

**Keywords:** PDE, Method of lines, fluidized bed, drying, heat of desorption-vaporization.

## Introducción

La solución de ecuaciones diferenciales parciales (PDE) en ingeniería y ciencias es una constante. Sin embargo, no es una tarea trivial pues depende del sistema de coordenadas base, de las condiciones iniciales y de frontera presente y de la naturaleza misma de la PDE. Esta última característica permite discriminar las PDE en ecuaciones lineales y no lineales. Los métodos de solución de PDE existentes son analíticos (y numéricos) para las ecuaciones lineales y sólo numéricos para las no lineales. Existen diversos métodos numéricos para su solución, desde diferencias finitas, colocación ortogonal y elemento finito (Villadsen y Michelsen, 1978).

Con los avances de la computación y el uso de librerías, un método ha sido mencionado constantemente en la literatura científica y se conoce como el método de las líneas. De hecho, es un planteamiento híbrido con respecto a las diferencias finitas, pues toma el mismo fundamento de la definición de derivada. Sea, pues, la siguiente ecuación de segundo grado típica en cualquier rama de la ingeniería:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

La primera y segunda derivada se aproxima a partir de las siguientes expresiones provenientes de la serie de Taylor:

$$\frac{du}{dt} = \frac{u_i^{t+1} - u_i}{t_{i+1} - t_i} = \frac{u_i^{t+1} - u_i}{\tau} \quad (2)$$

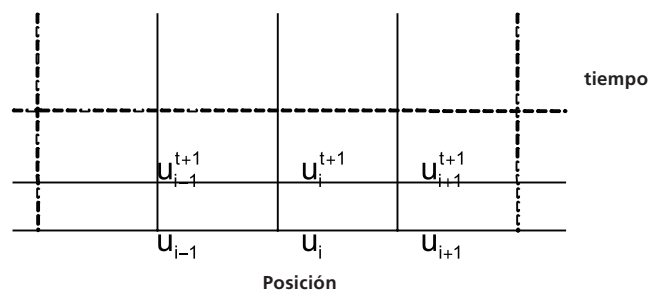
$$\frac{d^2u}{dx^2} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h} \quad (3)$$

El detalle de las anteriores definiciones es descrito en el texto de Nieves y Domínguez (1995). Obsérvese que al sustituir las expresiones (2) y (3) en (1), además de que  $\tau$  es un intervalo de tiempo y  $h$  es una longitud característica, ambas se fijan de acuerdo a la complejidad del problema:

$$\frac{u_i^{t+1} - u_i}{\tau} = k \left[ \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h} \right] \Rightarrow u_i^{t+1} = \frac{\tau k (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1})}{h} + u_i \quad (4)$$

Así, las incógnitas son las  $u_i$  en el tiempo  $t+1$  ( $u_i^{t+1}$ ). Los superíndices establecidos de esta forma se asocian al tiempo, mientras que los subíndices al espacio y se conocen como nodos en la literatura (ver figura 1) La forma de obtener el número de ecuaciones que se desee es con base en el número de nodos  $n$ . Lo anteriormente descrito es el método de diferencias finitas del tipo explícito (Osizik, 1968).

Figura 1. Nodos y su relación en el método de las líneas



Para plantear la ecuación  $i$ , es necesario el nodo anterior ( $i-1$ ) y el nodo posterior ( $i+1$ ). En caso de no existir se ligan las condiciones de frontera

El método de las líneas sólo realiza una modificación al esquema anterior; la ecuación (4) es representada para implementarse de la siguiente forma (Wouwer et al., 2001):

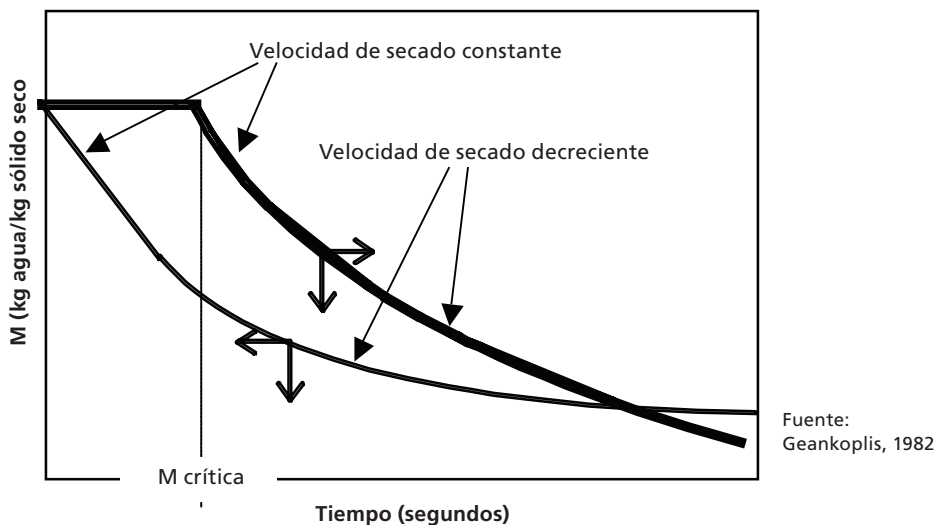
$$\frac{du_i}{dt} = k \left[ \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h} \right] \quad (5)$$

Esta estrategia permite obtener una ecuación diferencial ordinaria (ODE) por cada nodo  $i$  (o línea por representar un intervalo de la longitud total). De este modo, el conjunto de todos los nodos representa el total del fenómeno. Finalmente, la solución consiste en resolver un sistema de ecuaciones diferenciales donde cada nodo es resuelto como función del tiempo. Por esta razón el método puede ser aplicado a problemas de ingeniería.

Recientes aplicaciones han sido reportadas en la literatura. Caballero y Vicente (2005) implementaron el método en 2 dimensiones para establecer los perfiles en la superficie de un catalizador a partir de un sistema de PDE. Hirota y Ozawa (2006) establecen técnicas de transformación de longitud de arco para acelerar los cálculos. En otros campos este método ha sido aplicado para simular la transferencia de calor por radiación en tres dimensiones (Selçuk y Ayranc, 2003).

La aplicación a realizar en el presente trabajo se ubica en el ámbito del secado de alimentos. Esta operación se define como la transferencia simultánea de masa y energía, empleando calor para evaporar la humedad. Ésta, a su vez, se remueve de la superficie del sólido por medio de un agente externo como el aire (Brooker, et al., 1974). En términos generales, el proceso de secado de un sólido puede presentar dos periodos de secado, uno a velocidad constante y el otro a velocidad decreciente, lo cual dependerá del mecanismo que lo controla.

Figura 2. Curvas de secado y los diversos mecanismos



La curva gruesa muestra el comportamiento característico de un periodo de velocidad constante con una derivada igual a cero al comienzo. El periodo decreciente no cuenta con ese comportamiento (curva delgada)

El periodo de velocidad constante de secado ha sido estudiado ampliamente con respecto a las aplicaciones en alimentos (Geankoplis, 1982). Productos con contenidos altos de humedad como papas y betabeles, presentan este comportamiento durante su secado, y como característica principal está la existencia de una capa de agua que se mantiene cubriendo la superficie.

En el periodo de velocidad decreciente, la superficie de la partícula a secar no está cubierta por una capa de agua y la resistencia interna a la humedad es mayor que la resistencia externa. Esto trae como consecuencia una disminución de la velocidad de secado durante el curso del proceso. La figura 2 muestra lo anterior en

la parte baja de la curva de secado y su derivada. Otra característica importante es la existencia de un gradiente de humedad dentro del producto o el mecanismo que controla el secado es la difusión de la humedad en el interior de la semilla y por eso las moléculas de agua tardan en abandonar el grano. Lo anterior es una característica en cereales y semillas postcosecha (Broker et al., 1974).

### La tecnología de los lechos fluidizados

Los sistemas que involucran sólidos y gases se pueden clasificar por el movimiento que presentan los sólidos. A bajas velocidades de gas, el fluido se filtra por los huecos de las partículas sin movimiento alguno y el sólido se encuentra en un lecho fijo. Si la velocidad aumenta, las partículas se alejan entre sí y llegan a arrastrarse por el fluido. De esta forma, los sólidos se encuentran en fluidización.

En el universo de las tecnologías relacionadas con el secado, el lecho fluidizado aplicado para este fin ofrece las siguientes ventajas: a) altas velocidades de transferencia de masa y calor entre las partículas y el gas, provocada por el mezclado intensivo debido a la presencia de burbujas, y b) control adecuado de temperaturas evitando posibles degradaciones térmicas en sólidos biológicos y alimenticios. Entre las desventajas a tomar en cuenta se mencionan: a) un aumento de potencia en el compresor o ventilador por las altas caídas de presión que se presentan en el lecho fluidizado, al aumentar el tamaño del secador, y b) los sólidos a secar en estos equipos deben ser resistentes para no sufrir desgaste o roturas. Si este factor no es de importancia para la selección, debe tenerse en mente la necesidad de recuperaciones periódicas de finos.

Este trabajo se orienta al estudio del secado de amaranto, cultivo de gran importancia en México por sus cualidades nutritivas y que además posee la ventaja de ser un grano prácticamente esférico, adecuado por ser un sólido ideal desde el punto de vista de la fluidización y del modelado matemático.

Dadas las características de este sólido, es posible adaptar los modelos homogéneos propuestos por Zahed y Epstein (1992) para predecir su comportamiento; su elección se debe a que ambos modelos no manejan parámetros ajustables. Por lo contrario, estos parámetros (termodinámicos, físicos y

de transporte) son obtenidos de experimentos independientes a la cinética de secado. Con lo anterior es posible también realizar un análisis de sensibilidad de parámetros que contribuya al diseño de este tipo de equipos.

## Objetivo

El objetivo principal de este trabajo es la aplicación del método de las líneas para resolver PDE presentes en el secado de granos, por ser un esquema de fácil aplicación y de gran precisión. El método permitirá llevar a cabo simulaciones para la determinación de la humedad (M) y la temperatura en un secador de lecho fluidizado (T) a partir del modelo de Zahed y Epstein (1992).

## Método

La solución de la ecuación de difusión a estado no estacionario de la geometría del sólido y de las condiciones de frontera que prevalezcan en la interfase sólida. Para el caso del grano de amaranto, se considera una geometría esférica:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = D_{\text{eff}} \left[ \frac{\partial^2 M}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial M}{\partial r} \right] \quad (6)$$

Como la humedad (M) es función de la posición, se define un contenido promedio de humedad en los granos ( $M_p$ ) como:

$$M_p(t) = \frac{4\pi R}{V_s} \int_0^R r^2 M(r, t) dr \quad (7)$$

De acuerdo a Zahed y Epstein (1992), el modelo propuesto se resuelve con las siguientes ecuaciones: balance de masa y energía considerando la temperatura a la salida del aire (igual a la del grano por considerarse mezclado perfecto) para cualquier tiempo t, como función de los parámetros, Y,  $M_p$  y  $\Delta H$

Balance de masa:

$$m_A(Y - Y_1) = -m_B \frac{dM_p}{dt} \quad (8)$$

Balance de energía:

$$m_A[(C_A + Y_1 C_V)(T_1 - T) - (Y - Y_1)\Delta H] = m_B(C_p) \frac{dT}{dt} \quad (9)$$

$$t=0; \quad T=T_0; \quad M_p=M_0 \quad (10)$$

La forma de calcular  $M_p$  proviene de la solución a la ecuación de difusión en coordenadas esféricas (6) y las condiciones en la frontera e inicial modificadas de la siguiente forma:

$$t = 0, \quad 0 \leq r \leq R_p, \quad M = M_0 = M_p \quad (11)$$

$$t \geq 0, \quad r = 0, \quad \frac{\partial M}{\partial r} = 0 \quad (12)$$

$$t \geq 0, \quad r = R_p, \quad \frac{\partial M}{\partial r} = -\frac{m_A(Y - Y_1)V_s}{m_B D_{\text{eff}} A_s} \quad (13)$$

La ecuación (6) es remplazada por el esquema del método de las líneas en coordenadas esféricas de la siguiente forma (Ozisik, 1968):

$$\frac{\partial M_i}{\partial t} = \frac{D_{\text{eff}}}{(\Delta r)^2} \left[ \left(1 - \frac{1}{i}\right)M_{i-1} - 2M_i + \left(1 + \frac{1}{i}\right)M_{i+1} \right] \quad (14)$$

El subíndice  $i$  se refiere a las diferentes posiciones del radio de la esfera; éstas son las longitudes características mencionadas anteriormente. Si  $i = 0$ , se refiere al centro de la misma y se asocia con la condición (12); a  $i = n$  se refiere al número de ecuaciones que en su totalidad representan el radio  $R$  (también la suma de los  $\Delta r$  o incrementos de radio). Por esta razón se asocia a la condición (13); de  $1 \leq i \leq n-1$  son los puntos internos de la esfera que representa el amaranto. Para cada tiempo se resuelve en conjunto (14), (11), (12) y (13) y el resultado permite el cálculo de  $M_p$  a partir de un método numérico. En este caso se utilizó el método del trapecio (Nieves y Domínguez, 1995). Posteriormente, se acopla la ecuación (9) y la condición inicial (10). Hecho lo anterior, se actualizan los parámetros y las variables se resuelven cíclicamente hasta un tiempo final previamente determinado.

Los diversos parámetros necesarios en la ecuación (9) correspondiente al balance de energía y la condición frontera (13), se tomaron del trabajo de Vizcarra, Martínez y Caballero (2003, ver apéndice). Con toda esta información se implementó el método de Gear (1971), tomado de las rutinas del IMSL (International Mathematical and Statistical Libraries) incluidas en el programa Digital Visual Fortran 5.0 para su solución.

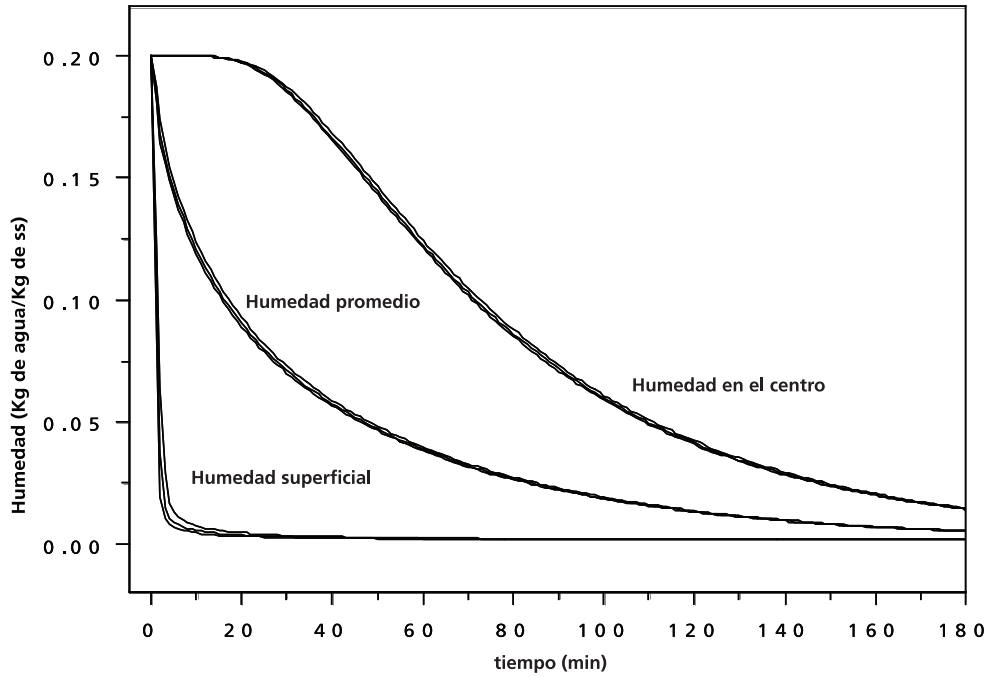
## Resultados

El esquema del método de las líneas fue aplicado con éxito a la simulación del secador. Los resultados obtenidos muestran que el secado en el interior del grano no se ve afectado por las diferentes velocidades de aire manejadas en el secador. Lo anterior confirma la dificultad de extraer el agua hacia la superficie del grano, problema debido a la difusión. La masa original alimentada consta de 0.5 Kg de granos de amaranto y se emplea un tiempo de 180 minutos desde una humedad inicial de 0.2 kg de agua / kg de sólido seco (ver figura 3).

Si se compara el comportamiento de la humedad en las figuras 3 y 4, se observa una disminución del tiempo de secado. Lo anterior se debe a la temperatura y a su relación directa con coeficiente de difusión. Por esta razón, la resistencia al transporte de humedad desde el interior de la semilla disminuye.

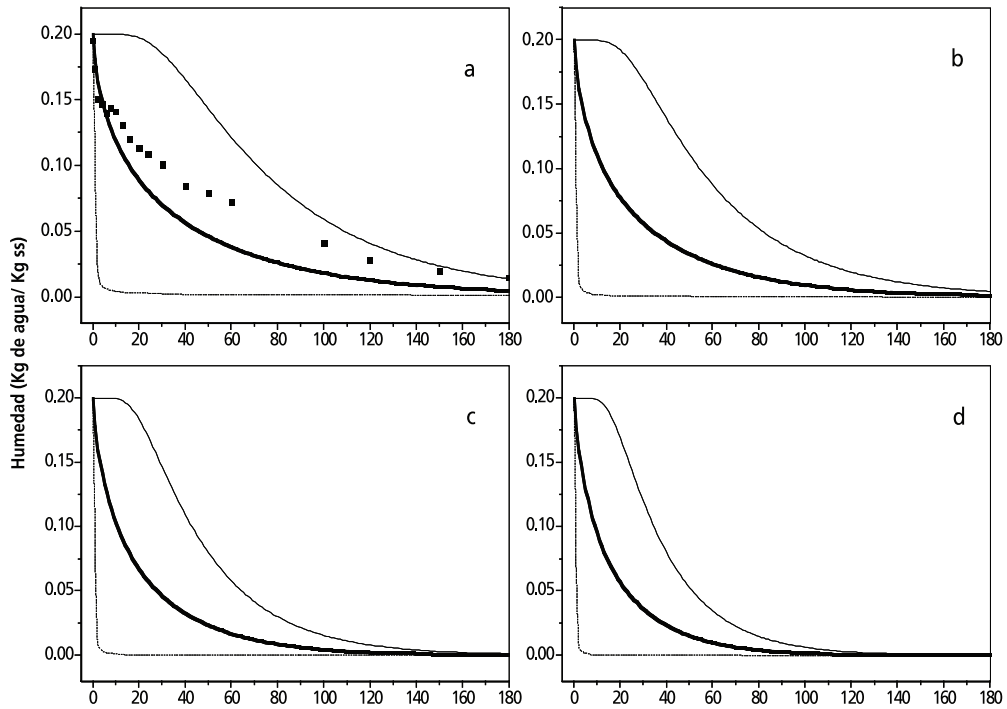
Los comportamientos diversos de la humedad en el interior del grano de amaranto (figura 4), muestran los diversos perfiles desde el centro de la semilla hasta su exterior. En las cercanías del centro, la humedad se mantiene sin cambio. Por esta razón se observa un pequeño período de velocidad constante que disminuye a

Figura 3. Perfil de Humedad en un secador de lecho fluidizado



La curva gruesa muestra el comportamiento característico de un periodo de velocidad constante con una derivada igual a cero al comienzo. El periodo decreciente no cuenta con ese comportamiento (curva delgada)

Figura 4. Perfiles de humedad en el secador a diferentes temperaturas



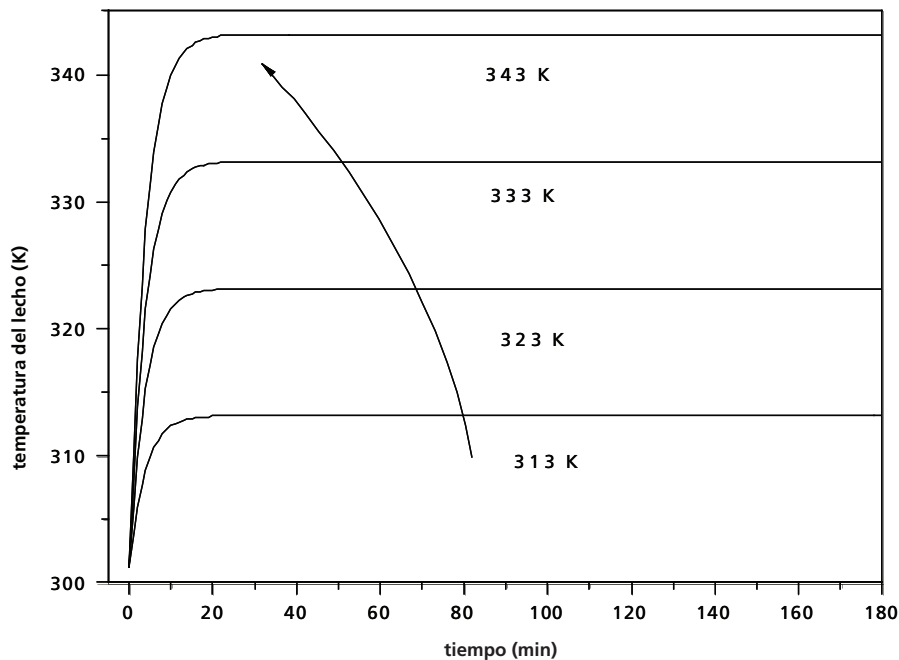
Las curvas mostradas alcanzan rápidamente la temperatura de alimentación del aire y, por lo tanto, la difusión de la humedad controla el proceso

medida que la temperatura aumenta de 313 K (figura 4a) hasta 343 K (figura 4d), caso contrario a la humedad en la superficie que rápidamente decae.

La figura 4a muestra datos experimentales obtenidos de Caballero (1999) y éstos se encuentran entre la humedad promedio y la humedad en el centro del grano. Lo anterior confiere confiabilidad a las simulaciones realizadas.

Finalmente, los perfiles de temperatura se observan en la figura 5: el lecho se calienta de manera rápida, confirmando nuevamente el control de la velocidad del proceso mantenido por la difusión de la humedad.

Figura 5. Perfiles de temperatura en un secador de lecho fluidizado



Las curvas mostradas alcanzan rápidamente la temperatura de alimentación del aire y, por lo tanto, la difusión de la humedad controla el proceso


## Discusión

El modelo de Zahed y Epstein (1992) originalmente publicado, utilizó la ecuación de Henderson (Pfof *et al.*, 1976), una correlación del coeficiente de actividad en función de la temperatura y la humedad en la superficie. Aquí la derivada parcial del coeficiente de actividad con respecto a la temperatura proporciona el calor de vaporización - desorción necesario en la ecuación 4. En este trabajo la ecuación de este tipo posee una singularidad y, por este motivo, se utilizó la ecuación de GAB (Tolaba *et al.*, 1995).

A pesar de la nueva generación de modelos como el de Abdel-Jabbar (*et. al.*, 2000), el modelo de Zahed y Epstein (1992) es de parámetros no ajustables y por esta razón su aplicación requiere considerar parámetros característicos, provenientes de experimentos independientes.

## Conclusión

La implementación del método de las líneas para la solución del balance de materia en el secado de un lecho con granos de amaranto, proporcionó soluciones rápidas y sin problemas de convergencia y estabilidad presentes en el método de diferencias finitas, donde los tamaños muy pequeños ocasionan tiempos altos de cálculo. La ventaja que tiene este método, si se compara con esquemas de mayor robustez como la colo-

cación ortogonal y el elemento finito (Villadsen y Michelsen, 1978), es su sencillez de implementación y permite un análisis de mayor profundidad hacia el fenómeno, más que a la solución numérica misma. Las curvas de secado de amaranto mostraron un comportamiento de velocidad decreciente, similar a los granos como el maíz, arroz y trigo, donde la difusión es una de sus características. 

## Agradecimientos

A las alumnas Montserrat Mata y Elena santillán por su valiosa colaboración en el presente trabajo.

## Referencias

- Abdel-Jabbar, N. Jumah, R. y Ali Al-Haj. (2000). Dynamic Analysis of Continuous Well-Mixed Fluidized / Spouted Bed Dryers. *Drying Technology*, (20), 37-54.
- Brooker, D.B. Bakker-Arkema, F. W. Hall, C. W. (1974). *Drying cereal grains*. Connecticut: The AVI publishing company.
- Caballero, D. F. (1999). *Secado de Amaranto: Simulación y Modelado en Lechos Fluidizados*. Tesis de maestría en Ingeniería Química. Universidad Autónoma Metropolitana, México.
- Caballero, F., Vicente, L. (2005). Coupled difusión on the NO + H<sub>2</sub> reaction on Pt(100): chemical wave pattern formation by defects. *Chemical Engineering Journal*, (106), 229-240.
- Geankoplis, C. J. (1982). *Procesos de transporte y operaciones unitarias*. México: Compañía continental editorial S. A.
- Gear, C. W. (1971). *Numerical Initial value problems in ordinary differential equations*. New Jersey: Prentice Hall.
- Hirota, C., Ozawa K. (2003). The method of lines solution of the discrete ordinates method for radioactive heat transfer in enclosures containing scattering media. *Numerical Heat Transfer Part B: Fundamentals*, (43), 179-201.
- Nieves, A., Domínguez, F. C. (1995). *Métodos Numéricos aplicados a la Ingeniería*. México: Compañía continental editorial S. A.
- Osizik, M. N. (1968). *Boundary value problems of heat conduction*. New York: Dover.
- Pfost, H. B. Maurer, S. G. Chung, D. S. y Milliken, G. A. (1976). *Summarizing and Reporting Equilibrium Moisture Data for Grains*, Chicago: Paper No. 76-3520 presented at 1976 Winter Meeting of ASAE.
- Tolaba, W. P. Suarez, C. y Viollaz P. (1995). Spreading Pressure – Water Activity and Moisture Relationship in Starchy Materials. *Drying Technology*, 13 (8 & 9), 2097 -2111.
- Villadsen, J. y Michelsen, M. L. (1978). *Solution of Differential Equations Models by Polynomial Approximation*. New Jersey Prentice Hall.

Vizcarra, M.G, Martinez, V.C. y Caballero, D. F. (2003). Thermal and Moisture Diffusion properties of amaranth seeds. *Biosystems Engineering*, (86), 441-446.

Wouwer, A.V. Saucez, P. Schiesser, W. E. (2001). *Adaptive Method of Lines*. United States of America: Chapman and Hall.

Zahed, A.H. y Epstein, N., (1992). Batch and continuous spouted bed drying of cereal grains: The thermal equilibrium model, *Can. J. Chem. Eng.*, (70), 945-953.

## Apéndice

Nomenclatura y valores utilizados en la simulación:

A <sub>s</sub> (m <sup>2</sup> )	Área superficial del sólido 3.142x10 <sup>-6</sup> .
C <sub>w</sub> (J/kg K)	Capacidad calorífica del agua 4184
C <sub>A</sub> (J/kg K)	Capacidad calorífica del gas seco 1013.
C <sub>v</sub> (J/kg K)	Capacidad calorífica del vapor de agua 1885.
w	Agua.
ss	Sólido seco.
as	Aire seco.
M (kg <sub>w</sub> / kg <sub>ss</sub> )	Porcentaje del contenido de humedad.
M <sub>p</sub> (kg <sub>w</sub> / kg <sub>ss</sub> )	Contenido de humedad promedio.
M <sub>o</sub> (kg <sub>w</sub> / kg <sub>ss</sub> )	Humedad inicial 0.2.
m <sub>A</sub> (kg/min)	Flujo másico de aire seco 0.1592, 0.2189 y 0.2792 respectivamente.
m <sub>B</sub> (kg)	Cantidad de granos dentro del lecho 0.56.
R <sub>v</sub> (J/kg w K)	Constante de los gases sobre el peso molecular del agua 462.
T (K)	Temperatura del lecho fluidizado.
t (min)	Tiempo.
T <sub>1</sub> (K)	Temperatura del aire a la entrada del equipo 313, 323, 333 y 343.
Y <sub>1</sub> (kg <sub>w</sub> /kg <sub>as</sub> )	Humedad del aire en la entrada del secador 0.002.
V <sub>s</sub> (m <sup>3</sup> )	Volumen del sólido 5.236x10 <sup>-10</sup> .

Correlaciones utilizadas en la simulación:

C<sub>B</sub> = 6.72 T – 793.53  
Capacidad calorífica del sólido seco (J / kg K).

$$D_{\text{eff}} = 4.95 \times 10^{-6} \exp\left(\frac{-2830.5}{T}\right)$$

Coefficiente de difusión efectivo (m<sup>2</sup>/min).

$$\frac{a_w}{M} = \frac{k(1-C)}{m_m} a_w^2 + \frac{(C-2)}{m_m C} a_w + \frac{1}{km_m C}$$

Actividad de agua donde:

$$k = 0.0246 \exp(1124.59/T)$$

$$C = 0.2694 \exp(775.43/T)$$

$$m_m = 0.000332 (1236.72/T)$$

$$P_v = 100 \exp\left[27.0214 - \frac{6887}{T} - 5.31 \ln\left(\frac{T}{273.15}\right)\right]$$

Presión de vapor del agua pura (Pa)

$$Y = \frac{0.622 a_w P_v}{P - a_w P_v}$$

Humedad absoluta del aire que sale del secador (Kg w/ kg as).

$$\Delta H = R_v T^2 \left[ \frac{6887}{T^2} - \frac{5.31}{T} + \frac{da_w}{a_w} \right]$$

Entalpia de vaporización - desorción (J/kg w).