

**SIMULACIÓN DE GASES EN CÁMARAS DE ALMACENAMIENTO DE  
FRUTA  
(AG01 0407)**

Barreiro P.<sup>(1)</sup>, Fabero J.C.<sup>(2)</sup>, Bielza C.<sup>(3)</sup>, Bielza S.<sup>(3)</sup>, Sanz R.<sup>(4)</sup>, Correa E.<sup>(1)</sup>, Ruiz-Altisent M.<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Laboratorio de Propiedades Físicas (LPF). ETSIA.UPM.

Avda. Complutense s/n.

28040 Madrid. España.

<sup>(2)</sup> Dpto. Arquitectura de Computadores y Automática. UCM.

<sup>(3)</sup> Dpto. de Inteligencia Artificial. FI-DIA.UPM.

<sup>(4)</sup> Dpto. de Estadística. ETSIA.UPM

pbarreiro@iru.etsia.upm.es

### **Abstract**

Simulation of Gases in Fruit Cold Storage Chambers: Nowadays there is an increasing use of low Oxygen (LO) and ultra low Oxygen (ULO) atmospheres for long term cold storage of fruits. Some physiological disorders associated with these postharvest technologies point to the presence of small spatial gradients in gas concentration as the major cause. However, it is extremely difficult to perform experimental tests measuring spatial gas gradients with sufficient resolution. In this study a spatio-temporal gas simulation software has been developed as a decision tool with the aim to evaluate various stowage and fruit conditions, as well as containers design.

Palabras clave: Automatas celulares, fisiología postcosecha, sistemas de ayuda a la decisión.

Keywords: cellular Automata; postharvest physiology, decision support systems.

### **1. Introducción**

Actualmente se conoce el beneficio derivado de la tecnología de conservación en atmósferas de bajo oxígeno en el caso de diversas variedades de frutas y hortalizas frescas (Herrero y Guardia, 1991). Existe una acción del bajo nivel de oxígeno sobre la intensidad respiratoria y la producción de etileno de los frutos, la cual ralentiza su proceso de maduración y permite un mejor mantenimiento de las características de calidad y un buen control de algunas fisiopatías como el escaldado superficial. Las alteraciones fisiológicas constituyen un problema de interés tanto económico como científico. En condiciones de bajo oxígeno (*Low Oxygen*, LO) y ultra bajo oxígeno (*Ultra Low Oxygen* ULO) pequeños gradientes espaciales en la concentración del O<sub>2</sub> y del CO<sub>2</sub> pueden ser determinantes en la aparición de daños al producto durante la frigoconservación, y quizás de ahí el carácter errático de su aparición en cámaras comerciales.

La simulación de fenómenos espacio-temporales es todavía hoy una asignatura pendiente en las herramientas de computación, debido a su extremada complejidad cuando se expresa en términos de ecuaciones algebraicas. Es posible, como alternativa innovadora, emplear una técnica denominada autómatas celulares (Cellular Automata, CA). Los CA son modelos de simulación discretos basados en la disposición de células

Hasta aquí quedan expresadas las reglas empleadas por el modelo LGCA para el movimiento de partículas gaseosas en un medio homogéneo en términos de difusión pura. Sin embargo, en el movimiento de gases es interesante incluir otros fenómenos como la colisión de partículas gaseosas o la agitación molecular. La colisión de partículas en un modelo LGCA se efectúa a nivel intra-celda. Sólo se considera colisión en los casos en que las celdas contengan dos partículas. Los posibles resultados se consideran bajo la hipótesis de conservación del momento de las partículas. El modelado de la agitación molecular, en cambio, implica que una partícula pueda modificar su trayectoria debido a su estado de vibración. En modelos LGCA este fenómeno sólo se contempla a nivel intra-celda cuando la celda contenga una única partícula.

### 3.2. Definición de dominios en el modelo espacial

A la hora de simular el almacenamiento de frutos en cámaras frigoríficas hay que definir tanto el medio poroso (gas) como el continente (recipiente y paredes de la cámara) y la fruta. El software desarrollado dispone de una herramienta de dibujo que permite de forma sencilla definir en la pantalla los distintos dominios: aire, continente y piel. La definición de la escala en la ventana de simulación permite estimar el volumen correspondiente a un pixel (voxel,  $\mu\text{l}$ ), así como el peso y la superficie externa de los frutos. Este hecho va a favorecer la individualización de los frutos a partir de datos fisiológicos generales expresados por kilo de peso fresco.

Los continentes son por definición medios impermeables. Este hecho implica que toda celda espacial identificada como continente permanece vacía indefinidamente. Toda partícula que intente penetrar en una celda definida como continente saldrá rebotada con ángulo igual al de incidencia. Se han caracterizado todas las posibles transiciones en una tabla de consulta empleada internamente por el programa de simulación. La fruta se ha modelizado como combinación de dos tipos de medios: epidermis o piel (contorno o perímetro del fruto), y pulpa (interior del fruto). La piel es un medio poroso y como tal exhibe propiedades similares a las celdas de aire (gas). El aspecto que diferencia las celdas de aire y las de piel es que en éstas últimas tienen lugar procesos metabólicos como son la transpiración y respiración del fruto, así como la emisión de etileno (ver apartado 3.3). En cuanto a la pulpa, ésta se ha definido como impermeable y por tanto muestra las mismas propiedades que los recipientes.

### 3.3. Modelos cinético-moleculares de gases

**Modelo psicrométrico del aire:** Existe un procedimiento normalizado para el cálculo de datos psicrométricos (ASAE –American Society of Agricultural Engineering-, 1984) según el cual la proporción de agua en el aire ( $H$ , g de vapor/kg aire seco) es función de la temperatura ( $T$ , °K), la presión atmosférica ( $P_{\text{atm}}$ ,  $\text{N/m}^2$ ) y la humedad relativa ( $HR$ , %). En nuestro caso, conocidas las densidades del aire y del vapor de agua es posible derivar la proporción volumétrica inicial de vapor de agua y de ahí el número de partículas de vapor de agua en la ventana de simulación. El número de partículas de vapor de agua se irá modificando con la transpiración de los frutos, de manera que en cada actualización de tiempo habrá de recalcularse de forma inversa  $H$ , y  $HR$ . La presión atmosférica ( $P_{\text{atm}}$ ) se verá modificada siempre que varíe el número de partículas de gas en un recipiente de volumen y temperatura constante según la teoría cinético-

o celdas idénticas, cada una con un número finito de estados posibles. Para simplificar la construcción de modelos CA cuando se desea establecer principios de conservación se ha ideado un tipo específico: Autómata Celular de Gases en Retículo (Lattice Gas Cellular Automata, LGCA). Este modelo en el límite macroscópico lleva a la ecuación de Navier-Stokes cuando el retículo (*Lattice*) posee suficiente simetría (vecindario hexagonal en simulaciones de 2 dimensiones, Wolf-Gladrow, 2000).

## 2. Objetivos

Desarrollo de un modelo de simulación espacio-temporal para recintos cerrados, de la producción de compuestos volátiles (etileno fundamentalmente), así como de la modificación de la composición atmosférica ( $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$  y vapor de agua) derivada de la actividad fisiológica (respiración y transpiración) de los frutos. Deberá posibilitar la evaluación de nuevos diseños para contenedores y grados de estiba.

## 3. Métodos

La simulación de gases en cámaras de almacenamiento de fruta incluye distintas fases de modelización: 1) difusión espacial de los gases y propiedades de los medios, 2) psicrometría del aire, y 3) fenómenos fisiológicos de los frutos (transpiración, respiración y emisión de etileno).

### 3.1. Modelo espacial LGCA de difusión de gases

En nuestro caso, se desea modelar el movimiento de cuatro gases: oxígeno, dióxido de carbono, vapor de agua y etileno, por lo que se ha optado por efectuar cuatro representaciones espaciales correspondientes a cada una de dichas especies químicas. Estas representaciones están vinculadas entre sí dado que el modelo cinético molecular subyacente así lo exige (véase apartado 3.3).

Los LGCA (Lattice Gas Cellular Automata) son modelos espacio temporales en los que el espacio se encuentra discretizado en una red de celdas. Para la simulación del movimiento de gases en dos dimensiones debe emplearse un teselado hexagonal, es decir, el espacio se define a partir de un conjunto de triángulos equiláteros en cuyos vértices se sitúan las celdas. Cada celda tiene seis vecinos con los que puede intercambiar partículas. Por otra parte, dentro de cada celda puede coexistir un máximo de siete partículas con posiciones fijas. La visualización del espacio se realiza otorgando a cada celda un valor de intensidad luminosa que caracterice el número total de partículas por celda (0 a 7 partículas).

El modelo LGCA establece que el movimiento se produzca a espacios de tiempo discretos y en dos fases: movimiento dentro de una celda e intercambio con las celdas vecinas. Todas las celdas se actualizan simultáneamente en la red. Este criterio permite un movimiento lineal de las partículas, isotrópico en las seis direcciones del espacio. La visualización de los cambios debe producirse para un instante completo de tiempo, es decir, una vez producido el movimiento dentro y entre celdas.

**Establecimiento de la situación inicial de la atmósfera:** a partir de la proporción volumétrica de cada gas (oxígeno, dióxido de carbono, vapor de agua y etileno) se establece el número de partículas aleatorizando su localización en la ventana de simulación.

**Asociación de probabilidades a las tasas de transpiración, de respiración y de emisión de etileno indicadas en los apartados anteriores:** para el cálculo de las probabilidades es preciso introducir un concepto denominado frecuencia de actualización (freq, h<sup>-1</sup>) que permite aplicar una resolución temporal diferente a los fenómenos fisiológicos (transpiración, respiración y emisión de etileno) respecto al empleado en la difusión de gases (s<sup>-1</sup>, equivalente a un coeficiente de difusión del orden de 10<sup>-6</sup> m<sup>2</sup>/s). A su vez dado que las tasas volumétrica de transpiración y respiración suelen ser del orden de cientos de veces superior a la tasa volumétrica de emisión de etileno, resulta conveniente emplear frecuencias distintas para ambos sucesos. Como norma general una frecuencia de 360 h<sup>-1</sup> es adecuada para simular el proceso de transpiración respiración, mientras que una frecuencia de 2 h<sup>-1</sup> resulta adecuada para simular la emisión de etileno.

El cálculo de la probabilidad (P) de emisión de partículas por fruto asociada a una determinada tasa volumétrica puede derivarse de forma sencilla de acuerdo con la expresión matemática citada a continuación. Este principio es válido tanto para la transpiración como para la emisión de etileno.

$$\text{Tasa}(\mu\text{l} / \text{fruto h}) = \text{Voxel} \left( \frac{\mu\text{l}}{\text{celda}} \right) \times \frac{1}{7} \left( \frac{\text{celda}}{\text{partículas}} \right) \times N \left( \frac{\text{partículas piel}}{\text{fruto}} \right) \times \text{freq}(\text{h}^{-1}) \times P$$

En el caso de la respiración podría emplearse asimismo esta premisa, sin embargo, parece más correcto enfocar el proceso de transformación de oxígeno en dióxido de carbono como dependiente del número de colisiones de partículas de oxígeno (Nc) sobre la superficie de la piel, viéndose la expresión anterior transformada ligeramente. Una vez determinadas las probabilidades de transpiración, emisión y respiración podemos efectuar la discretización de los modelos cinético moleculares.

**Proceso discreto de transpiración-respiración:** para cada instante en el que se cumpla un lapso de tiempo igual a la frecuencia de transpiración respiración tendremos:

$$\Delta \text{CO}_2(\text{n}^\circ \text{partículas}) = \text{redondear} \left( P_{\text{respiración}} \times Nc \left( \frac{\text{part oxígeno en la piel}}{\text{fruto}} \right) \right)$$

$$\Delta \text{O}_2(\text{n}^\circ \text{partículas}) = -\Delta \text{CO}_2(\text{n}^\circ \text{partículas})$$

$$\Delta \text{vapor agua}(\text{n}^\circ \text{partículas}) = \text{redondear} \left( P_{\text{transpiración}} \times N \left( \frac{\text{partículas piel}}{\text{fruto}} \right) \right)$$

Donde P<sub>respiración</sub> y P<sub>transpiración</sub> refiere respectivamente a las probabilidades de respiración y de transpiración deducidas en el apartado anterior; la función de redondeo está programada como un proceso estocástico. Con estos valores podemos determinar de nuevo la Presión atmosférica, y la humedad relativa de acuerdo con lo expresado en el modelo psicrométrico, así como la pérdida total de agua por transpiración.

molecular de los gases (Morcillo,1984). Por este motivo este parámetro ha de ser recalculado, y afecta a las variables psicrométricas.

**Modelo de transpiración-respiración:** la transpiración es la pérdida de agua de los frutos. El motor del movimiento del agua en comportamientos separados por una membrana semipermeable es la diferencia en el potencial de agua entre el fruto y el ambiente (Nobel, 1984). El potencial de agua en el fruto (ψ<sub>fruto</sub>) es asimilable a su potencial osmótico (ψ<sub>π</sub>), mientras que el potencial de agua en el ambiente (ψ<sub>0</sub>) es función fundamentalmente de la humedad relativa. La tasa de transpiración (Trmol, moles/kg h) depende de los potenciales de agua ya mencionados (ψ<sub>fruto</sub> y ψ<sub>0</sub>, N/m<sup>2</sup> ó Pa), de la superficie externa de fruto (A, m<sup>2</sup>), y del coeficiente de transferencia de masa (h, moles/m<sup>2</sup> Pa s). Conocida la tasa de transpiración en moles (Trmol), es posible derivar la tasa de transpiración volumétrica (Trvol, μl/h) a partir de la ecuación de los gases perfectos. La tasa de transpiración ha de ser actualizada en cada instante de tiempo dado que el potencial de agua del fruto y la humedad relativa del ambiente varían. La transformación de la tasa de transpiración en probabilidad de emisión de partículas de vapor de agua se contempla en el apartado 3.4.

La respiración es una reacción metabólica que viene definida por la siguiente expresión estequiométrica: C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub> + 6O<sub>2</sub> → 6CO<sub>2</sub> + 6H<sub>2</sub>O. La tasa de respiración en el ámbito de la postcosecha se expresa en términos de producción de dióxido de carbono (ml/kg h) y puede oscilar entre 3 y 30 ml/kg h según el estado de madurez y la temperatura (datos de la Universidad de California, <http://postharvest.ucdavis.edu/>), por ello es de vital interés poder caracterizar el estado fisiológico fruto a fruto en una simulación. Conociendo o estimando el peso del fruto es posible derivar la tasa de emisión en ml/fruto h. Este modelo estequiométrico permite el cálculo de la variación del número de moles de hexosa (H) y de agua del fruto (W) fundamentales en la determinación del potencial de agua del fruto. La conversión de la tasa de respiración en una probabilidad de emisión de partículas está expresada en el apartado 3.4.

**Modelo de emisión de etileno:** en el ámbito de la postcosecha, la tasa de producción de etileno se expresa en microlitros por kilo de peso fresco de fruta y hora (μl/kg h). Este valor que oscila entre 1 y 150 (μl/kg h) según el estado fisiológico y la temperatura de almacenamiento (datos de la Universidad de California). Estos valores pueden transformarse en una tasa de emisión por fruto conociendo o estimando el peso de los mismos. La tasa de emisión de etileno se transforma en probabilidad de emisión de partículas en el apartado 3.4.

### 3.4. Procesos estocásticos en la modelización de gases

Dado que los LGCA son modelos espacio-temporales discretos es imprescindible cuantizar: 1) la situación atmosférica inicial, y 2) los modelos expresados en los apartados anteriores. Este hecho implica la existencia de una unidad mínima de gas (partícula), que se emitirá o consumirá con una determinada probabilidad según el proceso fisiológico caracterizado, y que se desplazará posteriormente de acuerdo con el fenómeno de difusión.

**Proceso discreto de emisión de etileno:** para cada instante en el que se cumpla un lapso de tiempo igual a la frecuencia de emisión tendremos:

$$\Delta \text{etileno (n}^\circ \text{ partículas)} = \text{redondear} \left( P_{\text{emisión}} \times N \left( \frac{\text{partículas piel}}{\text{fruto}} \right) \right)$$

$P_{\text{emisión}}$  refiere a la probabilidad de emisión de etileno deducida en el apartado anterior.

#### 4. Resultados y discusión

Se ha desarrollado en Visualbasic 6.0 un software de simulación bajo las premisas expresadas en el apartado 3. La Figura 1 muestra un ejemplo de simulación. En el momento actual este software está en proceso de validación experimental.

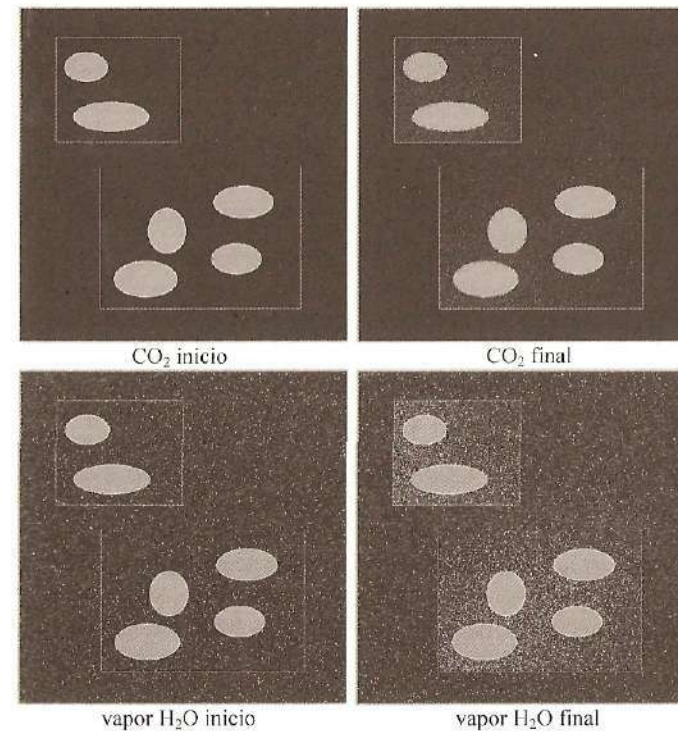


Figura 1. Inicio y fin de simulación (0-1800s) partiendo de atmósfera normal (20°C, 40%HR, 20% O<sub>2</sub>, 0.03% CO<sub>2</sub>) con frutos de igual estado fisiológico (sólidos solubles: 12°Brix, respiración: 20 mlCO<sub>2</sub>/kg h, emisión etileno: 80µl/kg h). Dióxido de carbono (arriba), y vapor de agua (abajo).

#### 5. Agradecimiento

A CICYT y UPM por su financiación en los respectivos proyectos: ALI 98 0960 CO2-01/02 y UPM AM0101.