

MODELAGEM NUMÉRICA DE UMA EMBALAGEM ATIVA

DYONATHAN FELIPE KREUZ^{1,2*}, CARLOS AUGUSTO FERNANDES
DAGNONE³, WANDERSON GONÇALVES WANZELLER^{2,4}

1 INTRODUÇÃO

As embalagens de um produto alimentício têm diversas funções que vão além de meramente conte-lo. Em sua composição podem ser empregados diversos materiais com o objetivo de contribuir para o prolongamento da validade do produto, aumentando assim a chamada “vida de prateleira”. A indústria tem investido no desenvolvimento de tecnologias que diminuem a interação entre o alimento e a embalagem, e vice-versa. Essas são, por exemplo, as chamadas embalagens ativas. Esta é formada em camadas (em geral três), sendo que as duas camadas externas são materiais inertes e a central um material reagente. Em sua composição podem ser usados os seguintes polímeros: PEBD, PELBD, PEAD, PP, PET, PEN, PVC-U, PVdC, PS, EVOH, PA 6. A literatura sobre o tema é um tanto ampla, porém as modelagens apresentadas são em *softwares* pagos. No modelo de Di Maio et al. (2017), que empregou o COMSOL, a embalagem foi modelada como um filme fino com 3 camadas, sendo que na central tem-se um absorvedor de O₂. Em 2015 Bedani *et al.* compararam resultados experimentais e simulados (COMSOL) de um filme fino. Ferrari et al. (2009) usaram MATLAB na modelagem de um filme fino multicamada, com uma camada absorvedora de O₂. Nossa proposta é resolver, numericamente, o problema de multicamada não linear, abaixo especificado, empregando métodos numéricos tradicionais e ferramentas computacionais gratuitas. Tal abordagem permite um amplo controle nos cálculos e assim, uma confiabilidade maior nos resultados.

2 OBJETIVOS

Desenvolver um código numérico para a modelagem de uma embalagem ativa seguindo toda a formulação do problema encontrada na literatura.

3 METODOLOGIA

Supondo uma embalagem composta por 3 materiais e que o fluxo de O₂ possa ocorrer apenas na direção x. O modelo matemático pode ser definido pelas Eq. (1, 2, 3 e 4) (Di Maio, 2017):

¹ Estudante, UFFS, *campus Laranjeiras do Sul*, contato: dyonathanfk2008@hotmail.com

² Grupo de Pesquisa: Modelagem Teórica e Simulações de Sistemas Físicos - MTSSF

³ Doutor, UFFS, *campus Laranjeiras do Sul*

⁴ Doutor, UFFS, *campus Laranjeiras do Sul*, **Orientador**.

$$\frac{\partial C_1(x,t)}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C_1(x,t)}{\partial x^2}, 0 < x \leq a (t > 0) \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_2(x,t)}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 C_2(x,t)}{\partial x^2} - k C_2(x,t) \epsilon, a < x \leq b (t > 0) \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_3(x,t)}{\partial t} = D_3 \frac{\partial^2 C_3(x,t)}{\partial x^2}, b < x \leq d (t > 0) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \epsilon(x,t)}{\partial x} = -\nu k C_2(x,t) \epsilon \quad (4)$$

sendo: $C_i(x,t)$ ($i=1, 2, 3$) é a concentração de O_2 , D_i ($i=1, 2, 3$) é o coeficiente de difusão nas respectivas camadas 1, 2 e 3; k é o coeficiente de reação, ϵ é a concentração de O_2 na camada reativa; ν é o coeficiente estequiométrico do O_2 . Temos como condições de contorno e inicial as Eq. (5, 6, 7 e 8):

$$C_1(0,t) = C_3(0,t) = s C_{ext} \quad (5)$$

$$D_1 \frac{\partial C_1(a,t)}{\partial x} = D_2 \frac{\partial C_2(a,t)}{\partial x} \quad (6)$$

$$D_2 \frac{\partial C_2(b,t)}{\partial x} = D_3 \frac{\partial C_3(b,t)}{\partial x} \quad (7)$$

$$C_1(x,0) = C_2(x,0) = C_3(x,0) = 0 \quad (8)$$

Onde s é o coeficiente de solubilidade do O_2 no material da camada e C_{ext} é a concentração de O_2 no ambiente externo a embalagem. Uma rápida análise das Equações (1 a 4) deixa clara a característica não linear dessas. Então, será necessário empregar um método numérico

apropriado (Arenalles, 2008; Franco, 2008). Nesse trabalho empregamos o método explícito. As Equações (1, 2, 3 e 4) foram discretizadas como Eq. (9 e 10):

$$T_i^{j+1} = \frac{D_r \Delta t}{\Delta x} (T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j) + T_i^j [1 - kv H_r \Delta t Y_i^j], r=1, 2, 3 \quad (9)$$

$$Y_i^{j+1} = Y_i^j [1 - kv \Delta t T_i^j] \quad (10)$$

Sendo T e Y as funções $C(x,t)$ e $\varepsilon(x,t)$ no espaço discreto, respectivamente. Note que, $H_1 = H_3 = 0$ e $H_2 = 1$. O índice j (i) representa o tempo (espaço). Para a inclusão das condições de contato perfeito [eqs (6 e 7)] expandimos a função $C_i(x,t)$ em torno dos pontos $x=a$ e $x=b$ pela direita e pela esquerda, obtendo:

$$C_i(x + \Delta x, t) = C_i(x, t) + C_i' \Delta x + \frac{C_i'' (\Delta x)^2}{2} \quad (11)$$

$$C_i(x - \Delta x, t) = C_i(x, t) - C_i' \Delta x + \frac{C_i'' (\Delta x)^2}{2} \quad (12)$$

As duas últimas parcelas das equações acima, o termo da segunda derivada espacial é substituído pela derivada temporal [Eq. (1)] (M. Arsher, 1960). Assim, temos a Eq. 13:

$$T_i^{j+1} = T_i^j + \frac{D_m \Delta t}{(\Delta x)^2} [T_{i+1}^j - T_i^j] + \frac{D_{m-1} \Delta t}{(\Delta x)^2} [T_{i-1}^j - T_i^j], m=2, 3 \quad (13)$$

Para a estabilidade da solução numérica é necessário que o fator $D_r \Delta t / [(\Delta x)^2]$ conhecido como número de *Courant*, seja, no máximo, $1/2$ (Iserles, 2008). Mas, em nossos problemas teremos 3 valores. Então, vamos empregar uma adaptação do método 2, citado em M. Arsher (1960), ou seja: a) escolhemos o valor da discretização espacial Δx ; b) calculamos

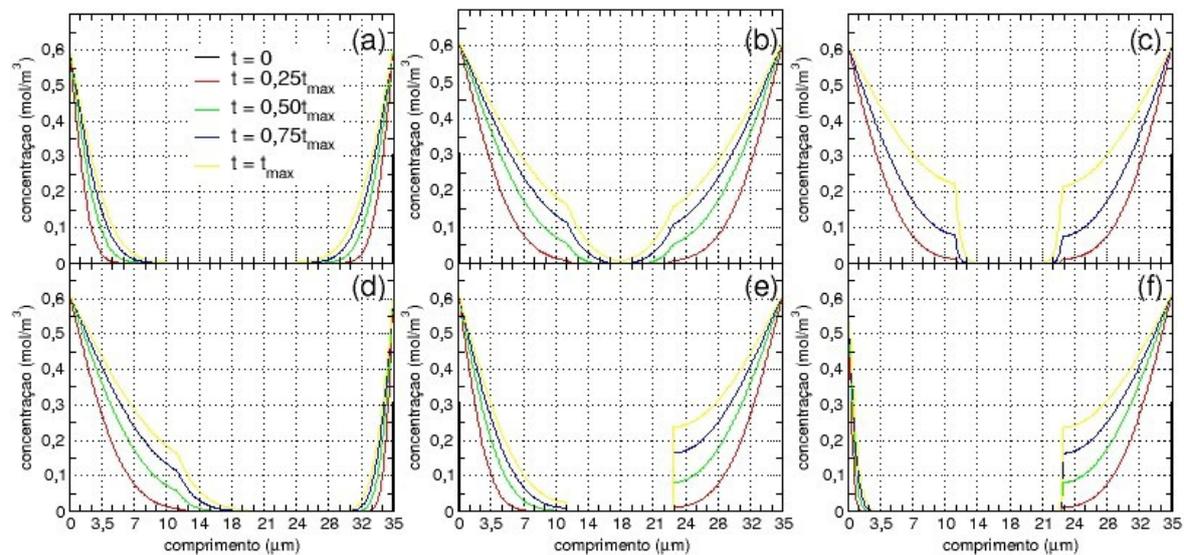
$\Delta t = \min_{r=1,2,3} \left(\frac{(\Delta x)^2}{2D_r} \right)$; c) usamos a Eq. (11) para calcular a concentração de O₂ no material 1;

d) usamos a Eq. (19) para calcular a concentração de O₂ na interface 1; e) usamos a Eq. (11) para calcular a concentração de O₂ no material 2; f) usamos a Eq. (19) para encontrar a concentração de O₂ na interface 2; g) evoluímos a quantidade Y [Eq. (12)]; h) usamos a Eq. (11) para calcular a concentração de O₂ no material 3.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

O objeto de estudo foi uma embalagem com 35 μm de espessura, dividido em três segmentos iguais. Usamos as seguintes combinações de materiais: PE/EVOH/PE, PET/EVOH/PET, PET/PP/PET, PET/EVOH/PE, PS/VCD/PE e PS/PA6/PET. Os 3 primeiros arranjos são conhecidos na literatura como ABA e os outros três como ABC. Na Figura 1 temos os perfis de concentração de O₂ das embalagens em estudo, para 6 valores de tempo distintos.

Figura 1: Perfis das concentrações de O₂ dentro das seis embalagens estudadas.



5 CONCLUSÃO

Nossa proposta foi de elaborar um código numérico que possibilitasse o estudo de uma embalagem ativa empregando ferramentas computacionais gratuitas e métodos numéricos tradicionais. Nossos resultados mostram que o objetivo foi alcançado de modo satisfatório. O

código poderá ser usado em diversas configurações de embalagens ABA e ABC no futuro.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARENALLES, S.; DAREZZO, A. **Cálculo numérico: Aprendizagem com apoio de software**, pag. 189 a 223. Editora Thompson, 2008.

ASCHER, M; **Explicit Solutions of the One-Dimensional Heat Equation for a Composite Wall**, Mathematics of computation, 14 (1960) 346-353. <https://doi.org/10.1090/S0025-5718-60-99228-0>

BEDANE, T; Di MAIO, L; SCARFATO, P; INCARNATO, L; MARRA, F; Modeling and sensitivity analysis of mass transfer in active multilayer polymeric film for food applications, AIP Conference Proceedings 1695, 020062 (2015). 15). <https://doi.org/10.1063/1.4937340>

Di Maio, L., Marra, F., Bedane, T. F., Incarnato, L., & Saguy, S. (2017). Oxygentransfer in co-extruded multilayer active films for food packaging. *AIChE Journal*, 63(11), 5215–5221. <https://doi.org/10.1002/aic.15844>

Ferrari, M. C., Carranza, S., Bonnacaze, R. T., Tung, K. K., Freeman, B. D., & Paul, D. R. (2009). Modeling of oxygen scavenging for improved barrier behavior: Blend films. *Journal of Membrane Science*, 329(1–2), 183–192. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2008.12.030>

FRANCO, N. B. **Cálculo numérico: método das diferenças finitas**, Pearson Prentice Hall, 2006.

ISERLES, A. **A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations**, Cambridge Uni. Press. 2008

Palavras-chave: camada absorvedora, barreira ao O₂, modelagem, FORTRAN 77
Nº de Registro no sistema Prisma: PES-2020-0287.

Financiamento: Fundação Araucária.