

## MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA DESIDRATAÇÃO OSMÓTICA EM PEDAÇOS DE ABACAXI UTILIZANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

Dionísio Borsato\*, Ivanira Moreira, Marcelo Medre Nóbrega e Mariete Barbosa Moreira

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, CP 6001, 86051-990 Londrina - PR, Brasil

Rui Sérgio dos Santos Ferreira da Silva

Departamento de Ciência e Tecnologia de Alimentos, Universidade Estadual de Londrina, CP 6001, 86051-990 Londrina - PR, Brasil

Evandro Bona

Coordenação de Alimentos, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Campo Mourão, CP 271, 87301-006 Campo Mourão - PR, Brasil

Recebido em 2/12/08; aceito em 15/4/09; publicado na web em 26/8/09

MODELING AND SIMULATION OF THE OSMOTIC DEHYDRATION PROCESS OF PINEAPPLE'S PIECES USING THE FINITE ELEMENT METHOD. Water loss and sugar gain were modelling during the osmotic dehydration process of pieces of pineapple. The transfer of solute to the fruit and the water to the solution was based on Fick's 2nd law. The three dimensional model was solved by the finite element method with the usage of the software COMSOL Multiphysics 3.2. The main and cross diffusion coefficients and the Biot number were determined on the simulation and the deviation between the experimental and the simulated data were 4,28% to sucrose and 1,66 to the water.

Keywords: finite elements; multicomponent diffusion; osmotic dehydration.

### INTRODUÇÃO

Uma das principais causas da deterioração de alimentos frescos e também conservados é a quantidade de água livre presente. Um dos processos utilizados para a remoção da água é a desidratação osmótica que consiste na imersão direta do alimento em uma solução concentrada de solutos. Devido ao gradiente de concentração entre os componentes do alimento e da solução, um processo de transferência de massa começa a ocorrer: a água sai do alimento e vai para a solução, enquanto o soluto migra da solução para o alimento.<sup>1-3</sup>

A influência das variáveis de processo, como concentração dos agentes osmóticos, temperatura, tempo de desidratação, geometria do alimento e agitação, tem sido estudada.<sup>4-6</sup>

A difusão multicomponente nos alimentos pode ocorrer não somente devido às características do alimento, mas também porque muitos solutos podem ser adicionados intencionalmente ao mesmo. Além disso, algumas vezes é inconveniente ou praticamente impossível medir experimentalmente a concentração de cada espécie individualmente.<sup>7</sup>

Quando vários solutos se difundem, assume-se a lei generalizada de Fick, pois além do coeficiente de difusão principal de cada soluto, são necessários também os coeficientes de difusão cruzados, que nem a influência de um soluto no fluxo do outro soluto.<sup>8</sup>

Vários estudos de difusão em alimentos, utilizando as leis de Fick para sistemas binários e ternários, vêm sendo desenvolvidos como na desidratação osmótica de pedaços de carne,<sup>9</sup> de tecidos biológicos de plantas,<sup>10</sup> de abóboras,<sup>11</sup> de tomates,<sup>12</sup> de abacaxis<sup>6</sup> e de cubos de melão.<sup>13</sup>

Um conjunto de técnicas numéricas atualmente muito usada na ciência, tecnologia e engenharia de alimentos, que permite resolver sistemas de equações diferenciais que simulem sistemas em condições mais realistas é o método de elementos finitos.<sup>14</sup>

O método de elementos finitos (MEF) é capaz de simular fenômenos, como a transferência de calor e/ou de massa, dinâmica de fluidos, elasticidade, assim como processos químicos e biológicos responsáveis pela perda de qualidade dos alimentos.<sup>15</sup>

De acordo com Puri e Anantheswaran,<sup>16</sup> as principais vantagens do MEF são: a variação espacial das propriedades materiais pode ser tratada com relativa facilidade; regiões irregulares podem ser modeladas com grande precisão; o método é o mais indicado para problemas não lineares; as dimensões dos elementos podem ser facilmente alteradas; a interpolação espacial é muito realista e, os problemas com as mais diversas condições de contorno podem ser facilmente trabalhados.

Diversos autores vêm estudando o método de elementos finitos em alimentos.<sup>16</sup> Lomauro e Bakshi utilizaram a técnica para prever o conteúdo de umidade de vários alimentos e com diversas geometrias.<sup>17</sup> Já Wang e Sun fizeram uma revisão sobre a aplicação deste método em processos industriais.<sup>14</sup>

O objetivo deste trabalho foi determinar os coeficientes de difusão envolvidos no processo de desidratação osmótica de pedaços de abacaxi utilizando a segunda lei de Fick generalizada e o método de elementos finitos.

### PARTE EXPERIMENTAL

#### Preparo das amostras

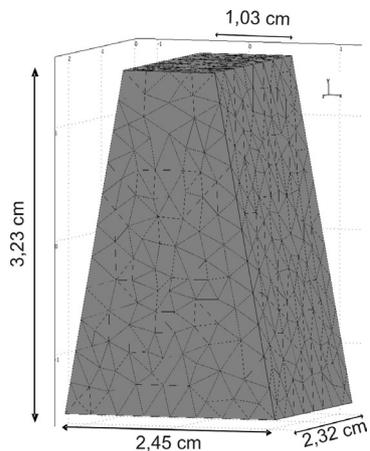
Foram utilizados abacaxis pérola (*Ananas comosus*) adquiridos em um supermercado na região de Londrina - PR. Os abacaxis foram descascados e cortados em fatias na região onde o diâmetro não variasse de maneira considerável, de modo a se obter elementos com maior semelhança possível. Além disso, como há uma grande variação no teor de açúcar entre a base e o topo da fruta apenas a região central foi usada para se obter amostra mais homogênea. O centro da fatia foi retirado e, posteriormente, para melhor aproveitamento, os elementos foram cortados na forma de tronco de pirâmide de base retangular, com dimensões médias mostradas na Figura 1.

#### Preparo da solução osmótica

Foi utilizado como agente osmótico uma sacarose comercial da marca Alto Alegre, adquirida no comércio local. A solução foi preparada

\*e-mail: dborsato@uel.br

com uma concentração de açúcar refinado de, aproximadamente, 60°Brix. Para garantir que a concentração da solução osmótica permanecesse constante e, também, a homogeneidade da mesma durante todo o processo de desidratação o volume de solução utilizado foi de aproximadamente 20 vezes maior que o volume ocupado pelos pedaços de abacaxis.<sup>18,19</sup> Antes do início e no término do processo de desidratação foi retirada uma amostra da solução inicial para quantificação do açúcar presente.



**Figura 1.** Dimensões do pedaço de abacaxi submetido à solução osmótica, malha tetraédrica e convenção adotada para os eixos imaginários para identificação da simetria

Como a solução de sacarose apresentou densidade maior que os pedaços de abacaxi, foi utilizada uma rede de plástico para garantir que todas as amostras permanecessem imersas durante todo o processo de desidratação permitindo, com isso, manter as mesmas condições de contorno em todas as faces.

O estudo da desidratação osmótica no abacaxi foi feito em solução estática, em recipiente fechado para evitar a evaporação, mantida sob refrigeração para a manutenção da temperatura de  $20 \pm 1$  °C durante todo o processo.

### Amostragem

As amostras dos troncos de pirâmide de abacaxi foram coletadas, em duplicata, em intervalos compreendidos nas 46 h de experimento.

### Determinação da umidade

A porcentagem de umidade das frutas foi determinada, por gravimetria, através de secagem das amostras em estufa a 100 °C até peso constante.<sup>20,21</sup>

### Determinação da sacarose

A sacarose foi determinada por meio de um refratômetro de ABBE.<sup>22</sup>

### Formulação em elementos finitos aplicada ao processo de desidratação osmótica

Para a formulação da difusão simultânea em elementos finitos foram feitas as seguintes considerações ou hipóteses simplificadoras:

Foi modelada a difusão de um soluto em um abacaxi tridimensional que ocupa o volume  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ , associado a um sistema de coordenadas cartesianas  $x, y, z$ .

O coeficiente de difusão foi considerado constante em relação à concentração (independente do tempo e posição).

Nessas condições, estudou-se o processo de desidratação de abacaxi, considerando-o imerso numa solução aquosa estática contendo sacarose na proporção em massa de 60%. A concentração  $C_1(x,y,z,t)$  do soluto utilizado e a concentração  $C_2(x,y,z,t)$  de água num ponto  $P(x,y,z) \in \Omega$  e num instante  $t$ , podem ser descritas a partir das Equações de Onsager<sup>23</sup> para as concentrações dos solutos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial t} &= D_{11} \nabla^2 C_1 + D_{12} \nabla^2 C_2 \\ \frac{\partial C_2}{\partial t} &= D_{21} \nabla^2 C_1 + D_{22} \nabla^2 C_2 \end{aligned} \quad (1)$$

onde  $D_{ii}$  são os coeficientes principais,  $D_{ij}$  são os coeficientes cruzados, que acoplam os fluxos e  $\nabla^2(\cdot) = \nabla \cdot \nabla(\cdot)$ , é o operador laplaciano.

No processo de desidratação, as condições iniciais são dadas por

$$\begin{aligned} C_1(x, y, z, 0) &= C_{1,0} \\ C_2(x, y, z, 0) &= C_{2,0} \quad x, y, z \in \Omega \end{aligned} \quad (2)$$

onde  $C_{1,0}$  e  $C_{2,0}$  são conhecidas. As condições de contorno para o processo de difusão sem agitação ficam sendo:<sup>24</sup>

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1(\pm R, t)}{\partial \eta} &= \frac{h_m}{\lambda_m} [C_1 - C_{1,s}] \\ \frac{\partial C_2(\pm R, t)}{\partial \eta} &= \frac{h_m}{\lambda_m} [C_2 - C_{2,s}] \end{aligned} \quad \text{com } x, y, z \in \partial\Omega, t > 0 \quad (3)$$

onde,  $h_m$  (g/cm<sup>2</sup>.h) é o coeficiente de transferência de massa,  $\lambda_m$  (g/cm.h) é a condutividade mássica;  $\partial\Omega$  é o conjunto de pontos da superfície que contorna o contínuo;  $C_{1,s}$  e  $C_{2,s}$ , são as concentrações dos solutos que banham o pedaço de abacaxi;  $\partial/\partial\eta$  é o operador da derivada normal. Os coeficientes  $h_m$  e  $\lambda_m$  estão relacionados com o número de Biot pela Equação

$$Bi = \frac{h_m \cdot Ri}{\lambda_m}; \quad i = 1, 2, 3. \quad (4)$$

O processo de desidratação foi simulado utilizando uma malha contendo elementos tetraédricos e assumiu-se como constante o volume da amostra em todo o processo.

### Teste estatístico

A comparação entre dados teóricos e experimentais do teor de sólidos dissolvidos e de água foi feita por meio do desvio percentual,<sup>25</sup> como forma de avaliar a qualidade do ajustamento.

$$\%desvio = 100 \sqrt{\sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{\bar{C}_{calc} - \bar{C}_{exp}}{\bar{C}_{exp}} \right)_i \right]^2} \frac{1}{N} \quad (5)$$

onde:  $\bar{C}_{calc}$  = concentração média estimada pela solução numérica;  $\bar{C}_{exp}$  = concentração experimental média; N = número de observações consideradas.

### Ajuste dos coeficientes de difusão e do número de Biot

Os coeficientes de difusão e o número de Biot foram ajustados através do método de otimização simplex<sup>26</sup> associado às funções de

desejabilidade.<sup>27</sup> Um algoritmo de otimização<sup>28</sup> propôs combinações para os coeficientes de difusão e número de Biot. Estes valores foram avaliados através do MEF.

### Programação computacional

Para a simulação do processo de desidratação osmótica foi utilizado o software COMSOL Multiphysics, e foi processado em um computador Core 2 Duo com 2 Ghz de memória. A solução do sistema foi pelo método do gradiente conjugado.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

As amostras, antes de se iniciar o processo de desidratação osmótica, apresentaram em média, na solução aquosa, 11% de sólidos e 89% de água. As características iniciais da solução osmótica podem ser observadas na Tabela 1.

**Tabela 1.** Características iniciais da solução osmótica\*

Temperatura durante a desidratação	20 ± 1 °C
Densidade (g/cm <sup>3</sup> )	1,2875
Sacarose (g / 100 g <sub>sacarose + água</sub> )	58,5
Água (g / 100 g <sub>sacarose + água</sub> )	41,5
Volume de abacaxi: volume de solução	1: 20

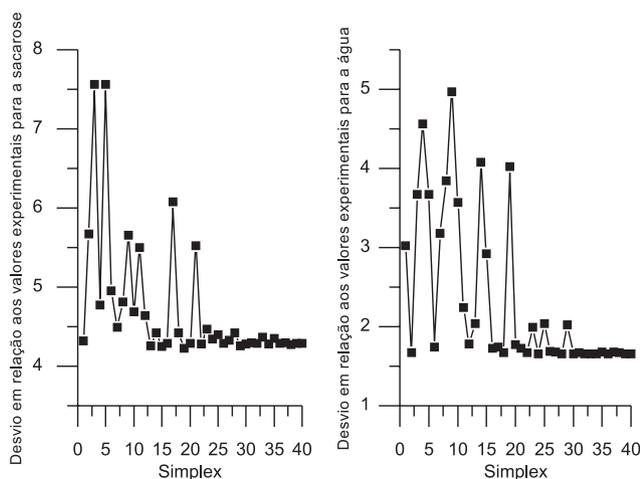
\*as características iniciais e finais da solução são as mesmas.

A malha tetraédrica utilizada na simulação foi gerada automaticamente, sendo composta por 7041 elementos. Com a malha fornecida pelo programa foi obtida a estimativa dos coeficientes de difusão e número de Biot através do método de otimização simplex.<sup>8</sup>

As concentrações de sacarose e água simuladas foram então comparadas aos resultados experimentais através do teste de avaliação estatística (Equação 5). Os desvios percentuais encontrados foram reavaliados pelo método de otimização, que forneceu novas combinações de valores com o objetivo de minimizar o desvio entre os valores estimados e os experimentais. O procedimento foi repetido até a estabilização dos valores calculados para os desvios, coeficientes de difusão e número de Biot.

A estabilização dos valores dos desvios em relação aos dados experimentais pode ser observada na Figura 2.

A Figura 2 mostra que os desvios foram estabilizados, após 26



**Figura 2.** Estabilização dos desvios durante a aplicação do método simplex

interações para a sacarose e 30 para a água. Os valores dos desvios obtidos, considerando-se as 46 h de desidratação, ficaram em 4,28% para a sacarose e 1,66% para a água.

A estimativa dos valores dos coeficientes de difusão, da relação entre os coeficientes de filme e de condutividade mássica bem como do número de Biot, em relação aos dados experimentais encontram-se na Tabela 2. A Figura 1S (material suplementar) mostra que a estabilização desses parâmetros só foi possível após, aproximadamente, 30 interações.

**Tabela 2.** Coeficientes de difusão ajustados para o processo de desidratação

	Sacarose	Água
Coefficientes principais (m <sup>2</sup> /s)	1,41898x10 <sup>-10</sup> (D <sub>11</sub> )	1,45718x10 <sup>-10</sup> (D <sub>22</sub> )
Coefficientes cruzados (m <sup>2</sup> /s)	2,34954x10 <sup>-11</sup> (D <sub>12</sub> )	2,74306x10 <sup>-11</sup> (D <sub>21</sub> )
$h_m/\lambda_m$ (m <sup>-1</sup> )		5496,91
Biot (adimensional)		45,07466*

\*Número de Biot estimado em relação ao eixo X

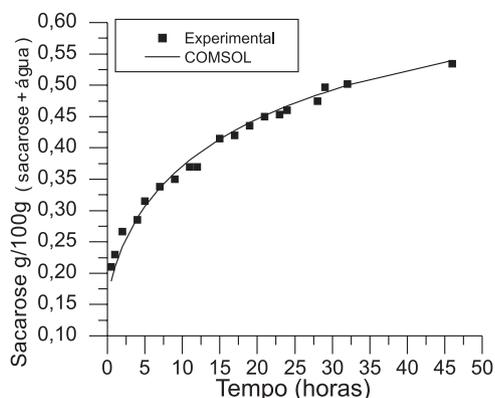
Os coeficientes cruzados apresentam uma ordem de grandeza inferior aos coeficientes principais indicando, como era esperado, que a difusão em relação ao próprio gradiente é mais importante do que a difusão devido à interação entre o soluto e o solvente.<sup>7,8,29</sup> Rastogi e Raghavarao<sup>30</sup> estudaram a difusão durante a desidratação osmótica de abacaxi e determinaram os coeficientes de difusão efetivos, aplicando a segunda lei de Fick com solução analítica. Os valores dos coeficientes de difusão efetivos foram similares aos apresentados na Tabela 2, porém, os autores citados não consideraram no processo os coeficientes cruzados.

A transferência de massa, durante a desidratação osmótica, ocorre através das membranas semipermeáveis presentes nos materiais biológicos e constitui a principal resistência no processo.<sup>30</sup> Porém, a simulação realizada, desconsiderando o número de Biot, isto é considerando a resistência externa desprezível, apresentou valores de desvios de 6,10 e 2,87% para a sacarose e água, respectivamente, que são superiores àqueles obtidos quando o número de Biot foi considerado. Isto indica que a resistência externa também deve ser considerada no fenômeno de transferência estudado.<sup>31</sup>

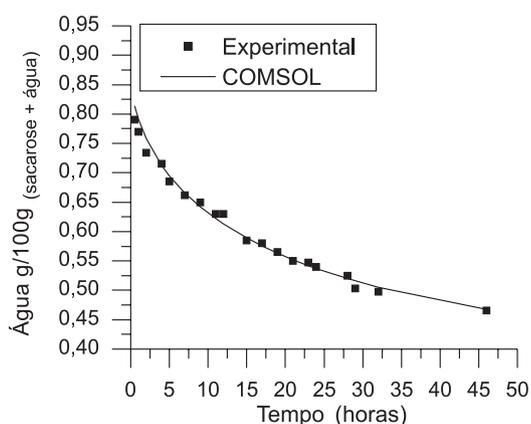
As Figuras 3 e 4 mostram o perfil de difusão, ao longo do tempo, da sacarose e da água, respectivamente, com os valores das concentrações obtidos experimentalmente e com os obtidos por meio da aplicação do programa COMSOL Multiphysics 3.2 utilizando os valores dos coeficientes de difusão, principais e cruzados, da relação  $h_m/\lambda_m$  e do número de Biot otimizados no processo de desidratação em estudo (Tabela 2).

A análise dos resultados obtidos (Figura 4) para a desidratação osmótica do abacaxi mostrou que a perda de água, ao final do experimento, foi de aproximadamente 42% e ocorreu mais intensamente nas 15 primeiras horas do processo de desidratação, momento em que já se havia eliminado 64% do conteúdo de água.

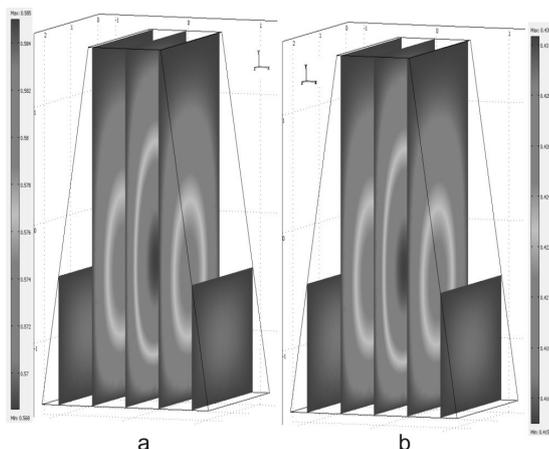
Com a aplicação do método de elementos finitos, foi possível simular, sobre todo o volume da amostra de abacaxi, a concentração média de sacarose e água durante o processo de desidratação. A Figura 5a mostra o perfil de distribuição da sacarose após 46 h de simulação do processo de desidratação, onde podemos observar um teor de 32% de sacarose no centro e 58,5% nas regiões de contorno. A Figura 5b mostra um teor de 41,5% de água nas extremidades e 67,1% no centro do pedaço de abacaxi, indicando que após 46 h de desidratação não temos, ainda equalização das concentrações.



**Figura 3.** Perfil de distribuição ao longo do tempo, da concentração de sacarose durante a desidratação osmótica de pedaços de abacaxi. Os pontos representam os dados experimentais e a linha a simulação



**Figura 4.** Perfil de distribuição, ao longo do tempo, da concentração de água durante a desidratação osmótica de pedaços de abacaxi. Os pontos representam os dados experimentais e a linha a simulação



**Figura 5.** Perfil de distribuição de sacarose (a) e perfil de distribuição de água (b) após 46 h de desidratação

Após 150 h, a simulação do processo de desidratação apresentou um teor de 56,8% de sacarose e 43,0% de água no centro da amostra e 58,5% de sacarose e 41,5% de água nas regiões de contorno. A simulação mostrou que após 150 h de desidratação osmótica a concentração prevista de sacarose, no centro da amostra, corresponde a aproximadamente 97% da concentração contida na solução, valor muito próximo ao da equalização (Figura 2S, Material Suplementar).

## CONCLUSÕES

Por meio do método dos elementos finitos foi possível simular a desidratação osmótica de abacaxi e os dados simulados para o processo de desidratação mostraram-se coerentes e convergentes com os resultados experimentais, validando a aplicação do MEF.

O MEF pode ser adaptado para o cálculo da concentração média do soluto e água no abacaxi, permitindo a estimativa da concentração de equilíbrio dos mesmos. Informação, esta, importante para a modulação do tempo de desidratação e possível melhoria na produtividade e maior controle da qualidade do processo, se o mesmo for utilizado em escala industrial.

## MATERIAL SUPLEMENTAR

A estabilização dos valores dos coeficientes de difusão, da relação entre os coeficientes de filme e o de condutividade de massa e do número de Biot, em relação aos dados experimentais, estão apresentados na Figura 1S.

O perfil de distribuição de sacarose e da água após 150 h de simulação da desidratação osmótica está apresentado na Figura 2S.

Esse material encontra-se disponibilizado em <http://quimicanova.s bq.org.br>, na forma de arquivo PDF, com acesso gratuito.

## AGRADECIMENTOS

À Fundação Araucária pelo suporte financeiro, à UEL e ao CNPq pela concessão de bolsas.

## REFERÊNCIAS

- Kaymak-Ertehin; Sulanoglu, M.; *J. Food Eng.* **2000**, *46*, 243.
- Lenart, A.; Flink, J. M.; *Int. J. Food Sci. Technol.* **1984**, *19*, 65.
- Ponting, J. D.; Watters, G. G.; Forrey, R. R.; Jackson, R.; Stanley, W. L.; *J. Food Technol.* **1966**, *20*, 1365.
- Islan, M. N.; Flink, J. N.; *J. Food Technol.* **1982**, *17*, 387.
- Rastogi, N. K.; Raghavarao, K. S. M. S.; *Lebensm.-Wiss. u.- Technol.* **1994**, *27*, 564.
- Ramallo, L. A.; Mascheroni, R. H.; *Braz. Arch. Biol. Technol.* **2005**, *48*, 761.
- Zorrilla, S. E.; Rubiolo, A. C.; *Chem. Eng. Sci.* **1994**, *49*, 2123.
- Bona, E.; Silva, R. S. S. F.; Borsato, D.; Silva, L. H. M.; Fidelis, D. A. S.; *J. Food Eng.* **2007**, *79*, 771.
- Djrlveh, G.; Gross, J-B.; Eman-Djomed, Z.; *Lebensm.-Wiss. u.- Technol.* **2001**, *34*, 319.
- Li, L.-Y.; *Comput. Materials Sci.* **2006**, *35*, 75.
- Mayor, R. L.; Moreira, R.; Chenlo, F.; Sereno, A. M.; *J. Food Eng.* **2006**, *74*, 253.
- Telis, V. R. N.; Murari, R. C. B. D. L.; Yamashita, F.; *J. Food Eng.* **2004**, *61*, 253.
- Ferrari, C. C.; Hubinger, M. D.; *Int. J. Food Sci. Technol.* **2008**, *43*, 2065.
- Wang, G. L.; Sun, D.; *Trends Food Sci. Technol.* **2003**, *14*, 408.
- Martins, R. C.; *J. Food Eng.* **2006**, *73*, 327.
- Puri, V. M.; Anantheswaran, R. C.; *J. Food Eng.* **1993**, *19*, 247.
- Lomauro, G. L.; Bakshi, A. S.; *J. Food Sci.* **1985**, *50*, 392.
- Khin, M. M.; Zhou, W.; Yeo, S. Y.; *J. Food Eng.* **2007**, *81*, 514.
- Derossi, A.; Pilli, T. de.; Severini, C.; McCarthy, M. J.; *J. Food Eng.* **2008**, *86*, 519.
- Richardson, G. H.; *Standard Methods for Examination of Dairy Products*, 5<sup>th</sup> ed., falta editora: Washington, 1985.
- AOAC - Association of Official Agricultural Chemists; *Official Methods of Analysis*, 14<sup>th</sup> ed., Washington, 1984.

22. Panades, G.; Castro, D.; Chiralt, A.; Fito, P.; Nunez, M.; Jimenez, R.; *J. Food Eng.* **2008**, *87*, 386 .
23. Onsager, L.; *Annals of the New York Academy of Science* **1945**, *46*, 241.
24. Luna, J. A.; Bressan, J. A.; *J. Food Sci.* **1986**, *51*, 829.
25. Bona, E.; Carneiro, R. L.; Borsato, D.; Silva, R. S. S. F.; Fidelis, D. A. S.; Silva, L. H. M.; *Braz. J. Chem. Eng.* **2007**, *24*, 337.
26. Walters, F. H.; Morgan, S. L.; Parker, L. R.; Deming, S. N.; *Sequential Simplex Optimization*. Karskrona, Sweden: Licensed electronic reprint by Multisimplex AB, 1999.
27. Derringer, G.; Suich, R.; *J. Qual. Technol.* **1980**, *12*, 214.
28. Bona, E.; Borsato, D.; Silva, R. S. S. F.; Herrera, R. P.; *Acta Scientiarum* **2000**, *22*, 1201.
29. Lombardi, A. M.; Zaritzky, N. E.; *J. Food Process Eng.* **1996**, *19*, 27.
30. Rastogi, N. K.; Raghavarao, K. S. M. S.; *Lebensm.-Wiss. u.- Technol.* **2004**, *37*, 43.
31. Schwartzberg, H. G.; Chao, R. Y.; *Food Technol.* **1982**, *36*, 73.

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO DA DESIDRATAÇÃO OSMÓTICA EM PEDAÇOS DE ABACAXI UTILIZANDO O MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS**

**Dionísio Borsato\*, Ivanira Moreira, Marcelo Medre Nóbrega e Mariete Barbosa Moreira**

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, CP 6001, 86051-990 Londrina - PR, Brasil

**Rui Sérgio dos Santos Ferreira da Silva**

Departamento de Ciência e Tecnologia de Alimentos, Universidade Estadual de Londrina, CP 6001, 86051-990 Londrina - PR, Brasil

**Evandro Bona**

Coordenação de Alimentos, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Campus Campo Mourão, CP 271, 87301-006 Campo Mourão - PR, Brasil

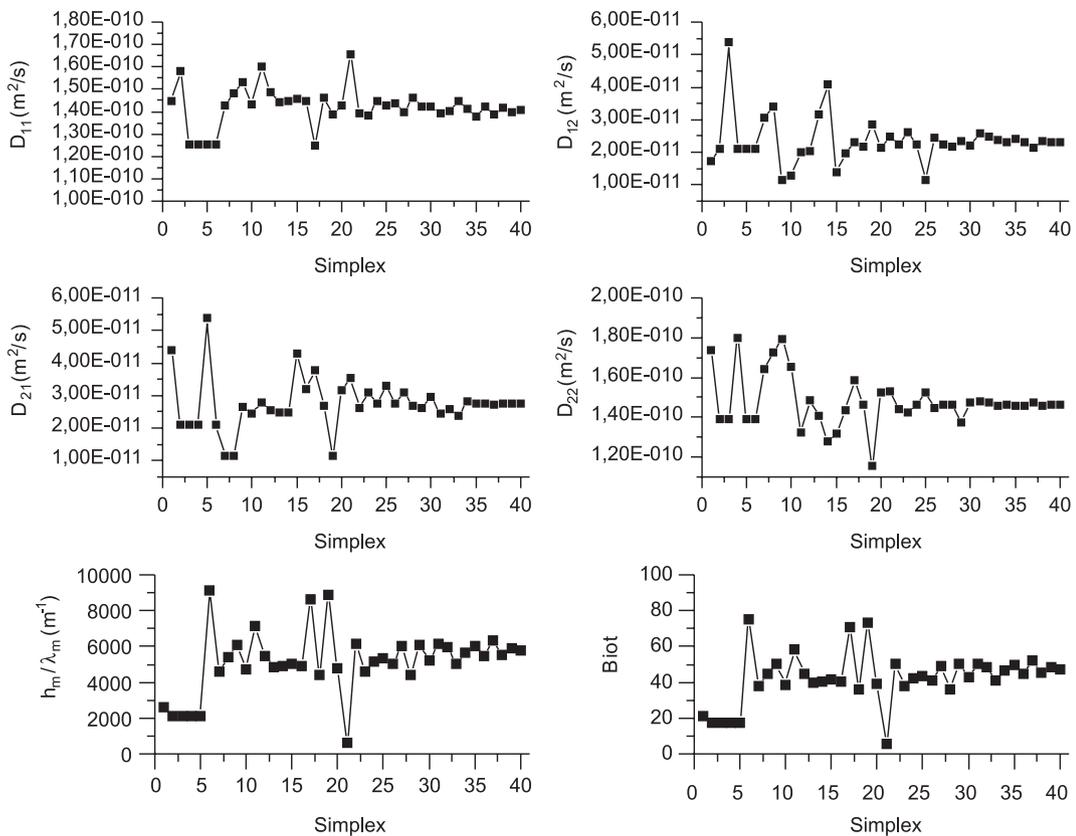
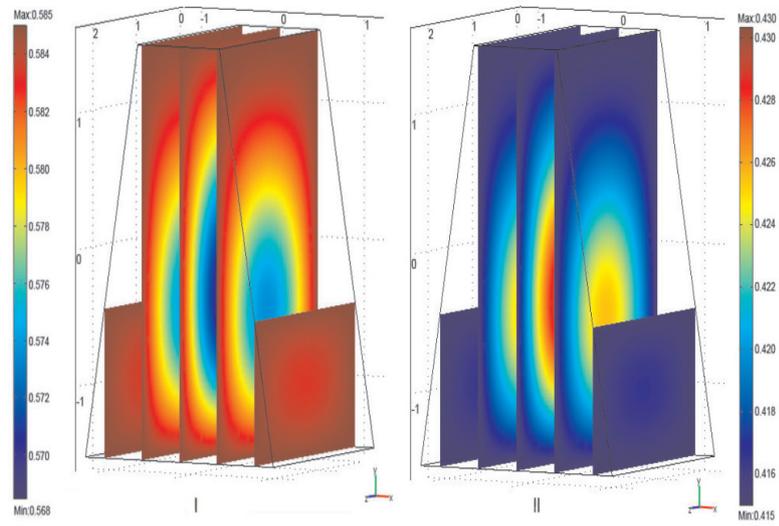


Figura 1S. Estabilização dos parâmetros estimados através do método simplex

\*e-mail: dborsato@uel.br



**Figura 2S.** Perfil de distribuição de sacarose (I) e da água (II) após 150 horas de simulação.