UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA DE ALIMENTOS
DEPARTAMENTO DE TECNOLOGIA DE ALIMENTOS

**Modelamento Matemático da Transferência de Calor Durante o
Tratamento Térmico de Alimentos Líquidos Embalados**

Pedro Esteves Duarte Augusto
Engenheiro de Alimentos

Prof. Dr. Marcelo Cristianini
Orientador

Dissertação apresentada à Faculdade
de Engenharia de Alimentos (FEA) da
Universidade Estadual de Campinas
(UNICAMP) para obtenção do título de
Mestre em Tecnologia de Alimentos

Campinas, S.P., 2009

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA FEA – UNICAMP

Au45m Augusto, Pedro Esteves Duarte
Modelamento matemático da transferência de calor durante o tratamento térmico de alimentos líquidos embalados / Pedro Esteves Duarte Augusto. -- Campinas, SP: [s.n.], 2009.

Orientador: Marcelo Cristianini
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia de Alimentos

1. Condições de contorno. 2. Convecção. 3. Fluidodinâmica computacional (CFD). 4. Pasteurização. 5. Processo térmico. I. Cristianini, Marcelo. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia de Alimentos. III. Título.

(cars/fea)

Titulo em inglês: Mathematical modelling of heat transfer in in-package liquid food thermal process

Palavras-chave em inglês (Keywords): Boundary conditions, Computational fluid dynamics (CFD), Pasteurization, Thermal treatment

Titulação: Mestre em Tecnologia de Alimentos

Banca examinadora: Marcelo Cristianini

Alfredo de Almeida Vitali

Homero Ferracini Gumerato

Data da defesa: 22/05/2009

Programa de Pós Graduação: Programa em Tecnologia de Alimentos

Banca Examinadora

Prof. Dr. Marcelo Cristianini
DTA / FEA / UNICAMP
(Orientador)

Prof. Dr. Alfredo de Almeida Vitali
GEPC / ITAL
(Membro Titular)

Dr. Homero Ferracini Gumerato
DTA / FEA / UNICAMP
(Membro Titular)

Prof. Dr. Kil Jin Park
FEAGRI / UNICAMP
(Membro Suplente)

Prof. Dr. Vivaldo Silveira Júnior
DEA / FEA / UNICAMP
(Membro Suplente)

*“Se vi mais longe,
foi porque estava sobre ombros de gigantes”*

Isaac Newton

Aos meus ALUNOS e aos meus PROFESSORES,
dedico.

Agradecimentos

A execução deste trabalho só foi possível devido ao trabalho e apoio, direto ou indireto, no passado ou presente, de diversas pessoas, a quem sou muito grato. Nominar essas pessoas é uma tarefa difícil, devido ao alto risco da omissão, mas aqui o faço, pelo menos em relação àquelas cujas contribuições diretas foram absolutamente essenciais. Dessa forma, agradeço:

Ao Prof. Dr. Marcelo Cristianini, pela orientação, apoio, companheirismo e liberdade na condução do trabalho.

Aos membros da banca, Prof. Dr. Alfredo de Almeida Vitali (GEPC/ITAL), Prof. Dr. Kil Jin Park (FEAGRI/UNICAMP), Dr. Homero Ferracini Gumerato (DTA/FEA/UNICAMP) e Prof. Dr. Vivaldo Silveira Júnior (DEA/FEA/UNICAMP), pelas valiosas sugestões e atenção.

À Profa. Dra. Pilar Rodriguez de Massaguer (DCA/FEA/UNICAMP, FAT), ao Prof. Dr. Flávio Luís Schmidt (DTA/FEA/UNICAMP) e ao Prof. Dr. Kamal Abdel Radi Ismail (FEM/UNICAMP), pela paciência e disposição em diversas etapas do trabalho.

Ao Prof. Dr. Mohammed Mehdi Farid (University of Auckland), Dr. Ashwini Kumar (ANSYS, Inc.), Prof. Dr. Arthur A. Teixeira (University of Florida), Prof. Dr. Ashim K. Datta (Cornell University), Prof. Dr. Xiao Dong Chen (University of Auckland; Monash University), pela (surpreendente!) paciência, disposição, conselhos e experiências que em muito auxiliaram nas simulações (e à “internet”, por possibilitar esses contatos!).

A Subcomissão de Pós Graduação do DTA, em especial à Profa. Dra. Mirna Lúcia Gigante, ao Prof. Dr. Arnaldo Yohiteru Kuaye e ao Prof. Dr. Pedro Eduardo de Felício, pela paciência e confiança.

À FAPESP, pelo financiamento do projeto “Modelamento Matemático da Transferência de Calor Durante o Tratamento Térmico de Alimentos Líquidos

Embalados” (processo 2007/04121-6) e pelo investimento em minha formação através das bolsas de Iniciação Científica “Variação na Taxa Respiratória e Produção de Etileno em Figos Devido à Vibração” (processo 2002/01422-1) e “Desidratação Osmótica e Secagem de Figos” (processo 2003/10638-0).

À CAPES, pelo auxílio financeiro complementar durante o programa de Mestrado.

À Fundação André Tosello de Pesquisa e Tecnologia (FAT), em especial à amiga Josi (Bac. Ciência dos Alimentos Maria Josiane Conti), pela doação da cepa de *L. plantarum* e auxílios com a cultura.

Aos funcionários da Equipe de Manutenção, do Centro de Informática (CIFEA) e da Biblioteca (BibFEA) da FEA, e das Vidrarias do IQ e IFGW, pelos (vários) auxílios prestados.

Aos funcionários e ex-funcionários do DTA/FEA, Enga. Mariana Loureiro Junquer, M.Sc. Ana Epien Koon, Téc. Adauto Venancio dos Santos, Profa. Dra. Judite Lapa Guimarães, Téc. José Roberto dos Santos, Téc. Ana Maria da Silva, Téc. Vanessa Ortiz de Camargo, pela disposição e auxílios diversos.

À Profa. Dra. Miriam Dupas Hubinger (DEA/FEA/UNICAMP) e à Enga. M.Sc. Louise Emy Kurozawa, pela disponibilidade e discussões em relação à medição de calor específico.

À Profa. Dra. Rosiane Lopes da Cunha (DEA/FEA/UNICAMP) e ao Eng. M.Sc. Luiz Henrique Fasolin, pelo grande auxílio com a caracterização reológica da CMC.

À Profa. M.Sc. Maria Helena Miguel (DEA/FEA/UNICAMP) e ao Téc. Márcio Geraldo Oliveira (DEA/FEA/UNICAMP), pela disponibilidade, discussões e medições das propriedades físicas da bentonita.

À Profa. Dra. Lireny Aparecida Guaraldo Gonçalves (DTA/FEA/UNICAMP) e ao Dr. Renato Grimaldi (DTA/FEA/UNICAMP), pela disponibilidade e empréstimo de equipamentos.

À Equipe de Suporte CFD/Ansys CFX da ESSS, em especial aos Engenheiros Bruno Alexandre Contessi, Raphael David Aquilino Bacchi, Nicolino Foschini Neto e Ricardo Barbosa Barros, pelos diversos auxílios e discussões.

Ao CETEA/ITAL, em especial à Téc. Paula Fernanda Janetti e à Pesquisadora M.Sc. Sandra Balan M. Jaime, pela consultoria com vidros e auxílios nos cortes das garrafas.

Aos meus orientadores nas Iniciações Científicas, Prof. Dr. Antônio Carlos de Oliveira Ferraz (FEAGRI/UNICAMP) e Prof. Dr. Nelson Horacio Pezoa García (DTA/FEA/UNICAMP) pelos ensinamentos e incentivos para a carreira científica.

Às minhas orientadoras no Programa de Apoio Didático (PAD/UNICAMP), Profa. Dra. Délia Rodriguez-Amaya (DCA/FEA/UNICAMP) e Profa. Dra. Mirna Lúcia Gigante (DTA/FEA/UNICAMP), pelas oportunidades oferecidas e pelo apoio e incentivos nos meus primeiros contatos com a docência.

À Profa. Dra. Marise Aparecida Rodrigues Pollonio (DTA/FEA/UNICAMP) por todo apoio e incentivo.

À amiga Cris (Enga. Cristiane de Sá Perenha), pelos diversos ensinamentos e ajuda com as amostras de CMC.

À Profa. Júnia Regazzini Verçosa, pela amizade, incentivo e apoio.

Aos amigos e colegas de laboratório, cuja experiência, paciência e empenho me ajudaram a vencer a inércia, Cláudia (Dra. Cláudia Regina Gonçalves Pinho), Mark (Dr. Mark Alexandrow Franchi) e Frampton (Eng. M.Sc. Frampton Franklin Santana).

Às minhas grandes amigas, parceiras de todas as horas (e em especial das piores e melhores!!!), cujo apoio (inclusive braçal!), incentivo e segurança me levaram a perseguir o objetivo final, All (Enga. M.Sc. Alline Artigiani Lima Tribst) e Pri (Enga. Priscila Hoffmann Carvalho).

Aos meus pais e à minha família, pelos ensinamentos, paciência, compreensão e, sobretudo, apoio.

Ao COTUCA, à FEA e à UNICAMP, e a seus professores e funcionários, pelo conhecimento sólido e base segura para minha formação acadêmica, profissional e pessoal.

Ao Departamento de Alimentos do COTUCA, em nome das Professoras Ana (Profa. M.Sc. Ana Lourdes Neves Gândara), Aninha (Profa. Ana Helena H. Tognon), Bete (Profa. Maria Elisabete. S. Tocchini), Jane (Profa. M.Sc. Jane Rizzo

Palermo) e Ivana (Profa. Dra. Ivana Maria Pereira Amstalden), cujos ensinamentos, apoio, incentivo e amizade, desde os tempos de aluno, foram e são essenciais para meu desenvolvimento profissional e pessoal. “*É de TA, é de TA...*”

Reitero minha gratidão ao COTUCA, instituição à qual devo GRANDE parte de tudo o que sou e tenho, e também a seus alunos, professores e funcionários. Ali vivi, e vivo, os melhores anos de minha vida. Foi o lugar onde aprendi a aprender e cultivei valores, como a amizade, o respeito e a tolerância, sempre incentivado para trilhar livremente caminhos que fossem os melhores não apenas para o meu próprio desenvolvimento, como também para o mundo em que vivo.

Agradeço de forma especial...

... Aos meus ALUNOS (até então TA03, TA04, TA05, TA06, TA07, TA08 e TA09), pela paciência, incentivo, curiosidade, interesse e amizade, que me ajudam na trajetória e me fazem querer chegar ainda mais longe;

... Aos meus PROFESSORES, cujos ensinamentos e confiança me ajudaram a trilhar o caminho até aqui (e além, por que não?);

... À Técnica em Alimentos TALITA FERRAMOLA PINHEIRO, pois a conclusão deste trabalho não seria possível sem a sua ajuda, profissionalismo e amizade;

... À minha querida esposa B (Enga. BEATRIZ MARIA CURTIO SOARES) cujo amor, paciência, compreensão e incentivo foram e são essenciais não só na realização deste trabalho, como também em toda minha jornada.

Pedro

Sumário

Banca Examinadora	iii
Agradecimentos	ix
Sumário	xiii
Resumo	xix
Palavras-chave:	xx
Abstract	xxi
Keywords:	xxii
Lista de Figuras	xxiii
Lista de Tabelas	xxvii
Abreviações e Símbolos	xxix
Capítulo 1: Introdução e Objetivos	1
1.1. Introdução	2
1.2. Objetivos	5
1.3. Referências	6
Capítulo 2: Revisão Bibliográfica	11
2.1. Tratamento Térmico de Alimentos	12
2.1.1. Inativação microbiana	13
2.2. Utilização de fluidodinâmica computacional (CFD) para simulação de tratamentos térmicos de alimentos	22
2.2.1. Fundamentos da fluidodinâmica computacional (CFD)	22
2.2.1.1. Equações Envolvidas	25

2.2.1.1.1. Conservação de Massa (Lei da Continuidade)	25
2.2.1.1.2. Conservação da Quantidade de Movimento (Segunda Lei de Newton do Movimento)	26
2.2.1.1.3. Conservação de Energia (Primeira Lei da Termodinâmica)....	26
2.2.1.1.4. Equação de Estado	27
2.2.1.1.5. Inativação Microbiana e Destruição de Nutrientes	28
2.2.1.2. Representação da Geometria Envolvida	29
2.2.1.3. Resolução Numérica	30
2.3. Utilização de CFD para simulação de tratamentos térmicos de alimentos líquidos	31
2.4. Aquecimento de Alimentos Líquidos.....	39
2.5. Alterações na geometria de embalagens: conseqüências no tratamento térmico	42
2.6. Determinação de parâmetros e condições de contorno em simulações por fluidodinâmica computacional (CFD)	44
2.7. Referências.....	49
Capítulo 3: Determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor (h) para o aquecimento e resfriamento de garrafas em imersão em água	59
Resumo	60
Palavras-chave:	60
Abstract.....	61
Keywords:	61
3.1. Introdução.....	62
3.2. Material e Métodos	64
3.2.1. Montagens experimentais	64

3.2.1.1. Termopares	64
3.2.1.2. Embalagens.....	64
3.2.1.3. Posicionamento dos termopares nas embalagens	65
3.2.1.4. Sistemas de aquecimento e resfriamento.....	66
3.2.2. Determinação dos coeficientes convectivos global (h_{global}) e local (h_{local}) de transferência de calor para as duas garrafas	67
3.2.2.1. Modelos matemáticos.....	69
3.2.2.2. Determinação do $h_{aquecimento}$	72
3.2.2.2.1. Método de determinação com produto condutivo	73
3.2.2.2.2. Método de determinação com produto convectivo.....	74
3.3. Resultados e Discussões.....	75
3.3.1. Método de determinação do $h_{aquecimento}$ com produto condutivo	75
3.3.2. Método de determinação do $h_{aquecimento}$ com produto convectivo	79
3.3.3. Determinação do $h_{resfriamento}$	82
3.4. Conclusões	85
3.5. Referências.....	86

Capítulo 4: Avaliação de condições de contorno para simulações matemáticas por fluidodinâmica computacional (CFD) do tratamento térmico de alimentos líquidos em garrafas	95
---	----

Resumo	96
Palavras-chave:	96
Abstract.....	97
Keywords:.....	97
4.1. Introdução.....	98
4.2. Material e Métodos	104

4.2.1. Montagens experimentais	104
4.2.1.1. Termopares	104
4.2.1.2. Embalagens.....	104
4.2.1.3. Posicionamento dos termopares nas embalagens	105
4.2.1.4. Sistema de aquecimento	107
4.2.2. Determinação do coeficientes convectivos de transferência de calor (h) para as duas garrafas	107
4.2.3. Determinação do perfil de temperatura na interface fluido-embalagem	108
4.2.4. Determinação do perfil de temperatura do meio de aquecimento	108
4.2.5. Avaliação e comparação das metodologias	108
4.2.5.1. Modelos matemáticos.....	110
4.3. Resultados e Discussões.....	114
4.3.1. Perfil térmico do meio de aquecimento e da interface fluido-embalagem	114
4.3.2. Comparação entre as quatro metodologias	115
4.4. Conclusões	122
4.5. Referências.....	123

Capítulo 5: Inativação térmica de *Lactobacillus plantarum* em alimento líquido

modelo*	131
Resumo	132
Palavras-chave:	132
Abstract.....	133
Keywords:	133
5.1. Introdução.....	134

5.2. Material e Métodos	139
5.2.1. Alimento modelo.....	139
5.2.2. Caracterização reológica do alimento modelo	139
5.2.3. Microrganismo modelo	140
5.2.4. Inativação térmica	140
5.3. Resultados e Discussões.....	143
5.3.1. Caracterização reológica do alimento modelo	143
5.3.2. Inativação térmica de <i>Lactobacillus plantarum</i>	147
5.4. Conclusões	151
5.5. Referências.....	152

Capítulo 6: Simulação numérica de tratamento térmico de alimentos líquidos
embalados através de fluidodinâmica computacional (CFD) 161

Resumo	162
Palavras-chave:	163
Abstract.....	164
Keywords:	164
6.1. Introdução	165
6.2. Material e Métodos	167
6.2.1. Montagens experimentais	167
6.2.1.1. Embalagens.....	167
6.2.1.2. Termopares	167
6.2.1.3. Posicionamento dos termopares nas embalagens	168
6.2.1.4. Sistemas de aquecimento e resfriamento.....	169
6.2.1.5. Sistema modelo	170

6.2.2. Determinação do coeficientes convectivos de transferência de calor (h) entre as garrafas e os sistemas de aquecimento e resfriamento	171
6.2.3. Validação do modelo através de comparação de histórias térmicas..	171
6.2.4. Validação microbiológica do modelo	172
6.2.5. Modelos matemáticos	173
6.2.5.1. Geometria	173
6.2.5.2. Formação da malha computacional	175
6.2.5.3. Composição do modelo e propriedades físicas	177
6.2.5.4. Condições iniciais e de contorno	179
6.2.5.5. Cálculo de inativação microbiana	180
6.3. Resultados e Discussões.....	183
6.3.1. Caracterização reológica do alimento modelo segundo modelo Newtoniano	183
6.3.2. Avaliação do ângulo de rotação da área obtida na elaboração do modelo	185
6.3.3. Avaliação do tratamento térmico de alimentos líquidos embalados ...	187
6.3.4. Comparação entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentalmente.....	195
6.3.4.1. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais	197
6.3.5. Validação microbiológica dos modelos obtidos	202
6.4. Conclusões	207
6.5. Referências.....	208
Conclusões Gerais	217
Sugestões para trabalhos futuros	220

Modelamento Matemático da Transferência de Calor Durante o Tratamento Térmico de Alimentos Líquidos Embalados

Resumo

A crescente busca por alimentos mais seguros e de melhor qualidade nutricional e sensorial cria a necessidade de melhor entendimento dos processos envolvidos na produção dos mesmos. O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados na conservação de alimentos, sendo o processamento dentro da embalagem um dos mais seguros. A utilização de modelamento matemático da transferência de calor na avaliação de tratamentos térmicos vem se mostrando uma poderosa ferramenta na garantia da segurança sem comprometimento da qualidade nutricional e sensorial dos alimentos. A fluidodinâmica computacional (CFD) vem sendo utilizada em diversos trabalhos para melhor entendimento de processos térmicos de alimentos líquidos. Entretanto, a falta de consistência e uniformidade nas modelagens, aliadas as raras avaliações experimentais das simulações, criam a necessidade de avaliações entre metodologias utilizadas e validações criteriosas. O presente trabalho estudou a transferência de calor durante tratamentos térmicos de alimentos líquidos embalados em garrafas comerciais através de modelagem matemática por CFD. Determinou-se o coeficiente convectivo de transferência de calor (h) para duas garrafas comerciais em um sistema de aquecimento e um de resfriamento em imersão em água. Observou-se que mesmo pequenas diferenças entre geometrias de embalagens resultaram em considerável diferença nos valores de h entre embalagens e sistemas, reforçando a necessidade de avaliação dessa propriedade para cada processo real estudado. Avaliou-se quatro metodologias utilizadas nos trabalhos de CFD para determinação das condições de contorno das simulações, observando-se que as que consideram perfis de temperatura superestimam o

fluxo de calor trocado com o produto, podendo comprometer a segurança e conservação do mesmo. A metodologia que considera o fluxo de calor decorrente das condições de contorno h e perfil térmico do meio de aquecimento apresentaram boa concordância com os perfis térmicos experimentais, mostrando-se adequados à modelagem de processos térmicos de alimentos. Caracterizou-se reologicamente um alimento líquido modelo, podendo ser utilizado para simulação de sucos de frutas, assim como a inativação térmica de um microrganismo modelo em processos de pasteurização (*Lactobacillus plantarum*). Analisou-se as características do tratamento térmico de alimentos líquidos em duas embalagens comerciais, através de perfis de temperatura, velocidade, característica da região de aquecimento mais lento (RAML) e inativação microbiana. Os perfis de temperatura e velocidade obtidos nas simulações de CFD do processo térmico do alimento modelo utilizado se mostraram semelhantes aos reportados na literatura, sendo descritas as características do processo. A análise dos perfis de temperatura obtidos experimentalmente e através do modelo indicaram boa correlação das simulações de CFD, sugerindo a possibilidade de utilização dessa ferramenta para avaliação de perfis térmicos em processos térmicos de alimentos embalados. Entretanto, a análise de validação microbiológica indicou grande desvio entre os valores experimentais e obtidos pelo modelo, atribuído a baixa resistência térmica do microrganismo alvo utilizado nas condições de processo. Nesse caso, mesmo pequenos desvios entre as temperaturas experimentais e obtidas por CFD podem resultar em grande desvio na inativação microbiana final, sugerindo que a utilização de CFD na avaliação de tratamentos térmicos deve ser vista com cautela. Os resultados obtidos comprovam a necessidade de validação dos modelos obtidos através de avaliação de perfil térmico e inativação microbiológica.

Palavras-chave:

Condições de contorno, convecção, fluidodinâmica computacional (CFD), pasteurização, processo térmico.

Mathematical Modelling of Heat Transfer in In-Package Liquid Food Thermal Process

Abstract

The growing demand for safer and high-quality food products creates the need for better knowledge of the processes involved in food production. Thermal process is one of the safest and most frequently used methods for food preservation, in special when performed in the package. The mathematical modelling of heat transfer is a useful tool for designing safety process while minimizing nutritional and sensory drops. The computational fluid dynamics (CFD) have been widely used for better understand of liquid food thermal process. However, no consistency in the mathematical models built is observed, and just a very few works compare the CFD data with experimental ones. There is a need for the evaluation of the use of CFD for thermal process design. The present work has evaluated the heat transfer in in-package liquid food during thermal process, using mathematical modelling by CFD. The convective heat transfer coefficient (h) among two commercial bottles and a heat and a cooling system were determinated. It was observed that even small differences among packages and heat transfer system result in distinct coefficient and that it must be measured for the exact heat transfer system. Four methodologies were evaluated for the boundary conditions definition of the CFD simulations, based on the previous CFD works. The models that considered the temperature profiles as boundary condition, showed faster heating. By over-estimating the product heating rate, those models are not appropriated for the mathematical modelling of heat process, as it compromises the safety and preservation of food products. The model that considered the measured value of h and temperature profile of the water bath as boundary condition showed good agreement with experimental values, being appropriated for thermal process modelling. The rheological characteristics of a model liquid food was determinated, and the thermal resistance of *Lactobacillus*

plantarum, a target microorganism in pasteurization processes, was evaluated in this model, which can be used as a fruit juice simulator. The thermal process of liquid foods was evaluated in two commercial bottles, using temperature, velocity, slowest heating zone (SHZ) and microbiological inactivation profiles. The temperature and velocity profiles were compatible with those described in CFD works. The thermal profile obtained by CFD shown good correlation with experimental values, suggesting that CFD can be used in thermal process temperature profiles evaluation. Although, the microbiological validation shown large deviation between the experimental values and obtained by the model, probably due the low thermal resistance of the studied microorganism. These results indicate that the CFD utilization in thermal process evaluation might be carefully seen, in especial when the microorganism thermal resistance is low in process conditions. In these situations, even small differences between CFD and experimental temperatures results in considerable microbial inactivation divergence. The results obtained in this work show the need for CFD models evaluation by thermal profile and microbiological inactivation.

Keywords:

Boundary conditions, computational fluid dynamics (CFD), convection, pasteurization, thermal treatment.

Lista de Figuras

Figura 2.1. Representação gráfica do conceito de DT através de curvas de inativação microbiana para uma determinada temperatura (T)	16
Figura 2.2. Curvas de inativação microbiana para três isotermas.....	16
Figura 2.3. Representação gráfica do conceito de z	17
Figura 3.1. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2)	65
Figura 3.2. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2), com os três termopares (TP, marcados por “+” e “•”) dispostos próximos ao eixo, utilizados na determinação do $h_{\text{aquecimento}}$	66
Figura 3.3. Representação esquemática do sistema montado para aquecimento das garrafas	67
Figura 3.4. Malhas dos modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas nas comparações entre metodologias; no detalhe pode-se observar o refino das extremidades do fluido	71
Figura 3.5. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por “+”) em G1. Média de cinco repetições.....	75
Figura 3.6. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por “+”) em G2. Média de cinco repetições.....	76
Figura 3.7. Curva de $T_{\text{experimental}}$ versus T_{modelo} obtida (TP03 para G1).....	76
Figura 3.8. Soma residual dos quadrados (SSR) para os três termopares (TP) na determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor em G1 e G2... ..	77
Figura 3.9. Comparação entre três valores de h para G1 (modelo x experimental) através da história térmica (esquerda) e valor de F (direita)	79
Figura 3.10. Comparação entre três valores de h para G2 (modelo x experimental) através da história térmica (esquerda) e valor de F (direita)	80
Figura 3.11. Comparação entre as razões dos valores de F obtidos por modelo e por experimentos para G1 e G2	81
Figura 3.12. Soma residual dos quadrados (SSR) e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ na determinação do h de resfriamento para G1	83
Figura 3.13. Soma residual dos quadrados (SSR) e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ na determinação do h de resfriamento para G2.....	83
Figura 4.1. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2)	105

Figura 4.2. Modelos das duas garrafas testadas (G1 e G2), com os três termopares (TP, marcados por “+” e “•”) dispostos na extremidade do produto..	106
Figura 4.3. Modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas nas comparações entre metodologias, contendo um termopar (TP, marcado por “+”)	106
Figura 4.4. Representação esquemática do sistema montado para aquecimento das garrafas	107
Figura 4.5. Malhas dos modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas nas comparações entre metodologias; no detalhe pode-se observar o refino das extremidades do fluido	112
Figura 4.6. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por “+”) encostados nas paredes internas de G1. Média de cinco repetições.....	114
Figura 4.7. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por “+”) encostados nas paredes internas de G2. Média de cinco repetições.....	115
Figura 4.8. Perfis térmicos (esquerda) e valor de F correspondente (direita) experimental (E) e dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno avaliadas (M1, M2, M3, M4) para G1 (a imagem no detalhe apresenta o ponto onde as leituras foram realizadas)	116
Figura 4.9. Perfis térmicos (esquerda) e valor de F correspondente (direita) experimental (E) e dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno avaliadas (M1, M2, M3, M4) para G2 (a imagem no detalhe apresenta o ponto onde as leituras foram realizadas)	117
Figura 4.10. Fluxo de calor (q'' , em W/m^2) dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno M1 (h , T^∞) e M4 (T_{int}) para G1 (a imagem no detalhe apresenta os pontos onde as leituras foram realizadas)	118
Figura 4.11. Fluxo de calor (q'' , em W/m^2) dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno M1 (h , T^∞) e M4 (T_{int}) para G2 (a imagem no detalhe apresenta os pontos onde as leituras foram realizadas)	119
Figura 5.1. Curvas de escoamento da suspensão de CMC 0,3% (m/m) analisada a 25°C, 40°C, 60°C e 80°C.....	143
Figura 4.2. Comportamento em relação a temperatura dos parâmetros de caracterização reológica k e n para a suspensão de CMC analisada	145
Figura 5.3. Curvas de inativação térmica de <i>L. plantarum</i> em CMC 0,3% à 52°C, 55°C, 58°C e 61°C (cada repetição é apresentada pelos marcadores e curvas de regressão linear)	147
Figura 5.4. Curva de inativação térmica de <i>L. plantarum</i> em CMC 0,3%; as barras verticais representam o desvio padrão em cada temperatura.....	150
Figura 6.1. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2)	167
Figura 6.2. Modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas na validação do modelo matemático, contendo um termopar (TP, marcado por “+”).....	169

Figura 6.3. Modelos da garrafa G2 utilizada. A imagem da esquerda apresenta a seção longitudinal obtida por avaliação em papel milimetrado, as do centro e da direita corpo obtido com ângulos de rotação de 11,25° e 360°, respectivamente	174
Figura 6.4. Vista superior dos modelos formados à partir da rotação de 11,25° e 360° da garrafa G2 utilizada.....	174
Figura 6.5. Malhas dos modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas na determinação do h do banho e avaliação da história térmica do aquecimento do alimento modelo; no detalhe pode-se observar o refino das extremidades do fluido; modelo com ângulo de rotação de 90°	176
Figura 6.6. Comparação entre os valores experimentais e obtidos através dos modelos Newtoniano e pseudoplástico (25°C)	184
Figura 6.7. Variação da viscosidade em relação a temperatura para a suspensão de CMC analisada segundo modelo Newtoniano.....	184
Figura 6.8. Numero de volumes finitos (NVF) e tempo de processo das simulações computacionais para os modelos obtidos à partir de ângulos de rotação de 360°, 90°, 45°, 22,5° e 11,25° (G2)	185
Figura 6.9. História térmica experimental e dos modelos obtidos à partir de ângulos de rotação (θ) de 360°, 90°, 45°, 22,5° e 11,25° (G2, CMC com modelo pseudoplástico)	186
Figura 6.10. Perfis térmicos do alimento modelo (suspensão 0,3% de CMC) submetido ao aquecimento a 60°C/7min seguido de resfriamento a 30°C/8min para as garrafas G1 (imagens da direita) e G2 (imagens da esquerda)	188
Figura 6.11. Linhas de corrente (<i>streamlines</i>) de velocidade do alimento modelo (suspensão 0,3% de CMC) submetido ao aquecimento a 60°C/7min seguido de resfriamento a 30°C/8min para as garrafas G1 (imagens da direita) e G2 (imagens da esquerda)	188
Figura 6.12. Linhas de corrente (<i>streamlines</i>) de velocidade para aquecimento de água em G1 (esquerda) e G2 (direita) à 60°C: imagens com 20s e 30s de aquecimento, mostrando as correntes de fluido com características aleatórias (adaptado de Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008)).....	189
Figura 6.13. Detalhe de G1 e vetores de velocidade do fluido momentos antes do início do resfriamento (420s) e após 30s (450s).	191
Figura 6.14. Detalhe de G2 e vetores de velocidade do fluido momentos antes do início do resfriamento (420s) e após 30s (450s).	191
Figura 6.15. Detalhe de G2 e vetores de velocidade do fluido momentos antes do início do resfriamento (420s) e após 30s (450s).	192
Figura 6.16. Perfis de inativação microbiana (γ) do processo para G1 (imagens da direita) e G2 (imagens da esquerda) no fim do aquecimento (420s) e do resfriamento (900s).	194
Figura 6.17. Perfis de inativação microbiana (γ) do processo para G1 no fim do processo (900s): detalhe das camadas de fluido próximas ao vidro	194

Figura 6.18. Perfis de inativação microbiana (γ) do processo para G2 no fim do processo (900s): detalhe das camadas de fluido próximas ao vidro	195
Figura 6.19. História térmica experimental e dos modelos de CFD Newtoniano e pseudoplástico para G1	196
Figura 6.20. História térmica experimental e dos modelos de CFD Newtoniano e pseudoplástico para G2	196
Figura 6.21. <i>Box Whisker Plot</i> para a redução decimal de <i>Lactobacillus plantarum</i> (γ) no alimento modelo para os dados experimentais (“E”) e obtidos através dos modelos (“M”) de CFD para G1 (G1E, G1M) e G2 (G2E, G2M).....	203

Lista de Tabelas

Tabela 2.1. Valores típicos de $D_{121^{\circ}\text{C}}$ e z para reações bioquímicas e físico-químicas em alimentos durante tratamento térmico (LUND, 1977).....	18
Tabela 3.1. Propriedades físicas da água utilizadas nos modelos.....	70
Tabela 3.2. Propriedades físicas do vidro e tampa metálica utilizadas nos modelos.....	70
Tabela 4.1. Metodologias testadas de condição de contorno para análises de CFD e respectivas condições de contorno.....	109
Tabela 4.2. Propriedades físicas do vidro e tampa metálica utilizadas nos modelos.....	111
Tabela 4.3. Propriedades físicas da água utilizadas nos modelos.....	111
Tabela 4.4. Avaliação das metodologias M1, M2, M3 e M4 como condição de contorno para modelos de CFD através dos valores de SSR, a_{em} ,..... R^2 , e $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ para G1.....	120
Tabela 4.5. Avaliação das metodologias M1, M2, M3 e M4 como condição de contorno para modelos de CFD através dos valores de SSR, a_{em} ,..... R^2 , e $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ para G2.....	120
Tabela 5.1. Dados reológicos de suspensões de CMC utilizadas em trabalhos de fluidodinâmica computacional (CFD).....	136
Tabela 5.2. Caracterização reológica de suspensão 1,0% (m/m) de CMC em diferentes trabalhos.....	138
Tabela 5.3. Caracterização reológica da suspensões de CMC 0,3% utilizada, segundo modelo pseudoplástico (Lei da Potência: $\tau = k\dot{\gamma}^n$).....	144
Tabela 5.4. Caracterização reológica da suspensões de CMC utilizada e possíveis alimentos para atuação como alimento modelo.....	145
Tabela 5.5. Energia de ativação do modelo de Arrhenius para a CMC testada e comparação com outros produtos.....	146
Tabela 5.6. Tempos de redução decimal (D_T) de <i>L. plantarum</i> em CMC 0,3% à 52°C, 55°C, 58°C e 61°C ($z = 8,9^{\circ}\text{C}$, $R^2 = 0,9996$).....	148
Tabela 5.7. Comparação entre tempos de redução decimal (D_T) de <i>L. plantarum</i> em diferentes trabalhos.....	149

Tabela 5.8. Comparação entre coeficientes térmicos (z) de <i>L. plantarum</i> em diferentes meios e trabalhos	150
Tabela 6.1. Número de volumes finitos das malhas obtidas para G2 à partir de ângulos de rotação de 360° , 90° , 45° , $22,5^\circ$ e $11,25^\circ$	175
Tabela 6.2. Propriedades físicas do vidro, tampa metálica e <i>headspace</i> utilizadas nos modelos	178
Tabela 6.3. Propriedades físicas da água utilizadas nos modelos	178
Tabela 6.4. Viscosidade e viscosidade aparente do alimento modelo (suspensão 0,3% de CMC) *	179
Tabela 6.5. Caracterização reológica da suspensões de CMC 0,3% utilizada, segundo modelo Newtoniano ($\tau = \mu\dot{\gamma}$)	183
Tabela 6.6. Diferença média de temperatura (<i>mean temperature difference</i> , MTD) e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ obtidas para G2 à partir de ângulos de rotação de 360° , 90° , 45° , $22,5^\circ$ e $11,25^\circ$ (processo de aquecimento e resfriamento, CMC com modelo pseudoplástico)	187
Tabela 6.7. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais através de parâmetro comparativo utilizado por Wang, Tang e Cavalieri (2001) (MTD) *	199
Tabela 6.8. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais através de parâmetro comparativo utilizado por Krishnamurthy et al. (2008) e Dilay et al. (2006) ($\Delta T_{\text{máx}}$ ($^\circ\text{C}$) e $\Delta T_{\text{relativo}}$ (%)) *	200
Tabela 6.9. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais através de parâmetro comparativo utilizado por Horn et al. (1997) (F_p) *	200
Tabela 6.10. Avaliação quantitativa da inativação de <i>Lactobacillus plantarum</i> no alimento modelo experimentalmente e através de CFD *	203

Abreviações e Símbolos

β = coeficiente de dilatação térmica
(Equação. 2.24) [K^{-1}]

γ = redução decimal microbiana
(Equação. 2.10) [adimensional]

$\dot{\gamma}$ = taxa de deformação [s^{-1}]

μ = viscosidade (Equação. 5.01)
[Pa.s]

μ_a = viscosidade aparente, utilizada
para fluidos não-Newtonianos ($= \tau / \dot{\gamma}$)
[Pa.s]

ρ = densidade [$kg.m^{-3}$]

τ = tensão de cisalhamento [Pa]

a = aceleração [$m.s^{-2}$]

a_{em} = inclinação da regressão linear
com intersecção na origem da curva
 $T_{experimental}$ *versus* T_{modelo}
[adimensional]

A_k = constante da Equação de
Arrhenius (Equação 5.03) para k
[Pa.sⁿ]

A_n = constante da Equação de
Arrhenius (Equação 5.04) para n
[adimensional]

Bi = número de Biot (Equação 3.03)
[adimensional]

c = concentração microbiana
[UFC.mL⁻¹ ou UFC.g⁻¹]

C_p = calor específico [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]

D = difusividade [$m^2.s^{-1}$]

D_T = tempo de redução decimal
(tempo necessário, a uma
determinada temperatura T , para
redução de um ciclo logarítmico na
concentração microbiana – c ;
Equação. 2.08) [s]

E_a = energia de ativação, constante
da Equação de Arrhenius (Equações
5.03 e 5.04) [$J.mol^{-1}.K^{-1}$]

F = valor de esterilização (Equação.
2.11) [s]

F_p = valor de esterilização do
processo, em um determinado ponto
(Equação. 2.14) [s]

F_m = valor de esterilização média da
massa (Equação. 2.12) [s]

g = aceleração gravitacional [$m.s^{-2}$]

Gr = Número de Grashof (Equação
6.05) [adimensional]

h = coeficiente convectivo de transferência de calor [$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$]

h_{global} = coeficiente convectivo de transferência de calor global entre a embalagem e o meio de transferência de calor [$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$]

h_{local} = coeficiente convectivo de transferência de calor global entre a embalagem e o meio de transferência de calor em uma posição específica [$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$]

k = condutividade térmica [$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

k = índice de consistência do fluido (Equação 5.02) [Pa.s^n]

k_T = constante da taxa de inativação microbiana (Equação. 2.01) [s^{-1}]

L = letalidade (Equação. 2.15) [adimensional]

L^* = comprimento característico [m]

$\dot{m}$ = vazão mássica [kg.s^{-1}]

n = índice de comportamento do fluido (Equação 5.02) [adimensional]

p = momento linear [kg.m.s^{-1}]

R = constante universal dos gases ideais [$\text{Pa.m}^3.\text{mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

q'' = fluxo de calor (transferência de energia térmica / (tempo * área)) [W.m^{-2}]

t = tempo [s]

T = temperatura [K]

T_{∞} = temperatura do meio de transferência de calor [K]

$T(x,y,z,t)$ = perfil de temperatura (histórica térmica) de um determinado ponto [K]

v = velocidade [m.s^{-1}]

V = volume [m^3]

z = coeficiente térmico (diferença de temperatura necessária para redução de um ciclo logarítmico do valor de D_T ; Equação. 2.09) [K]

Subscritos:

0 ou i = inicial

f = final

ref = referência

x, y, z = eixos perpendiculares do plano ortogonal

Abreviações:

CFD = fluidodinâmica computacional ou mecânica dos fluidos

computacional (de *computational fluid dynamics*)

CMC = carboxi-metil-celulose

FVA = análise de volumes finitos

G1 e G2 = identificação dos dois modelos de garrafas utilizadas

MTD = diferença média de temperatura (de *mean temperature difference*, Equação 6.04)

PF = ponto frio

RAML = região de aquecimento mais lento (ou SHZ, de *slowest heating zone*)

RMS = raiz quadrada média do erro (de *root mean square*)

RRML = região de resfriamento mais lento

SSR = soma residual dos quadrados (definida primeiramente na Equação 3.01)

TP = termopar

UFC = unidades formadoras de colônia

Capítulo 1: Introdução e Objetivos

1.1. Introdução

A crescente busca por alimentos mais seguros e de melhor qualidade nutricional e sensorial cria a necessidade de melhor entendimento dos processos envolvidos na produção dos mesmos.

O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados para a conservação de alimentos (GHANI et al., 2001a), sendo que a *appertização* ainda é o método de conservação mais efetivo, mesmo comparando-se com os recentes avanços de outras técnicas (FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 1999a).

Pouco se conhece sobre os perfis de temperatura e velocidade durante o tratamento térmico de alimentos líquidos em embalagens comerciais, muitas vezes resultando em processos super-dimensionados como garantia de segurança, comprometendo as características nutricionais e sensoriais do alimento e os custos energéticos. A otimização da transferência de calor durante o tratamento térmico de alimentos pode resultar em melhores características sensoriais e nutricionais e menores custos de processo (principalmente de energia), mantendo-se a mesma segurança de consumo. Tais características promovem a escolha do produto pelo consumidor.

Entretanto, a otimização do processo é dificultada por limitações experimentais, especialmente em alimentos líquidos. Diversos estudos apontam que, ao contrário de produtos condutivos, o aquecimento de fluidos não possui um ponto frio fixo, e sim uma região de aquecimento mais lento (RAML, ou SHZ de *slowest heating zone*) transiente. A medição experimental de temperaturas pode ser difícil em determinadas regiões da embalagem, como a RAML (GHANI, 2006), ou até mesmo errônea devido aos distúrbios no fluxo de líquido causados pela presença de termopares (GHANI, 2006; GHANI e FARID, 2006; VARMA e KANNAN, 2006; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI et al., 2001a; e KUMAR e BHATTACHARYA, 1991) ou sua condutividade térmica (DENYS; PIETERS; DEWETTINK, 2003). A medição experimental de inativação microbiana (GHANI, FARID, CHEN, 2002b) ou de nutrientes (GHANI, FARID, CHEN, 2002c) apresenta grande dificuldade, principalmente em pontos específicos da embalagem, com

conseqüente necessidade de determinação de concentrações médias no produto final.

A utilização de modelamento matemático da transferência de calor na avaliação de tratamentos térmicos vem se mostrando uma poderosa ferramenta na garantia da segurança sem comprometimento da qualidade nutricional e sensorial dos alimentos (MARTINS, 2006; PORNCHALOEMPONG et al., 2003; PINHO, CRISTIANINI, 2005). Permite a minimização dos experimentos de tentativa e erro, utilizados no desenvolvimento e testes de tecnologias na indústria, representando grandes custos e treinamento de pessoal (MARTINS, 2006). Entretanto, Kannan e Sandaka (2008) observam a necessidade de se conhecer melhor o fenômeno de transferência de calor associado aos tratamentos térmicos de alimentos líquidos para melhoria dos processos. Segundo Xia e Sun (2002), a utilização de modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD) na indústria de alimentos pode auxiliar esses desenvolvimentos.

A CFD é uma técnica numérica de resolução de equações que governam o escoamento de fluidos e transferência de calor em uma determinada geometria. Consiste na resolução numérica e simultânea das *Equações de Transporte de Navier-Stokes*, que descrevem a conservação de massa, momento e energia e de equações de estado (NORTON, SUN, 2006; SCOTT, RICHARDSON, 1997).

Diversos autores vem utilizando a CFD como ferramenta para avaliação de tratamentos térmicos de alimentos. A utilização da técnica permite o acompanhamento do tratamento térmico através de perfis de isoterms, de velocidade das correntes convectivas, localização do ponto frio ou RAML e transformações nos alimentos, como inativação e destruição de microrganismos, enzimas e nutrientes.

Entretanto, a falta de consistência e uniformidade nas modelagens, aliadas as raras avaliações experimentais das simulações, criam a necessidade de avaliações entre metodologias e validações criteriosas.

Segundo Scott e Richardson (1997), a definição das condições de contorno é essencial para a correta definição das condições de fluxo dentro do sistema. Kumar e Bhattacharya (1991) afirmam que o aquecimento convectivo de alimentos líquidos é um processo complexo, que requer condições de contorno tempo-dependentes, devido a resistência térmica ao fluxo de calor do material de

embalagem. No entanto, encontra-se na literatura diferentes formas de determinação de condições de contorno para simulações de tratamento térmico por CFD, não havendo comparação entre as eficiências de cada uma.

Além disso a utilização de modelos deve ser avaliada através da realização de experimentos de validação (KUMAR, DILBER, 2007; NORTON, SUN, 2006; CHEN, HUANG, GHANI, 2005), principalmente devido às aproximações e considerações realizadas na formulação do modelo (XIA, SUN, 2002). No entanto, poucos trabalhos na literatura realizam essa validação de forma apropriada.

Entretanto, muitos trabalhos de CFD não realizam nenhum tipo de validação com dados experimentais (GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; CHEN et al., 2005; VARMA, KANNAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999b; GHANI et al., 2001b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; BRANDON et al., 1984; ENGELMAN, SANI, 1983), enquanto outros só o fazem através da avaliação visual do perfil térmico de determinado ponto do alimento (KANNAN, SANDAKA, 2008; VARMA, KANNAN, 2006; DENYS, PIETERS, DEWETTINK, 2004; GHANI et al., 2001a; WANG, SAKAI, HANZAWA, 2000; GHANI et al., 1999a; DATTA, TEIXEIRA, 1987; BRANDON, PELTON, STAACK, 1982). A comparação quantitativa de perfis de temperatura obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD é realizada apenas nos trabalhos de Krishnamurthy et al. (2008), Dilay et al. (2006), Horn et al. (1997) e Brandon, Huling e Staack (1983). A comparação dos dados de inativação microbiana obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD é realizada apenas no trabalho de Ghani, Farid e Chen (2002b).

A falta de consistência, uniformidade e avaliações experimentais dos trabalhos de CFD colocam em dúvida a real validade da técnica para avaliação de tratamentos térmicos de alimentos, criando a necessidade de avaliações para melhor entendimento.

1.2. Objetivos

O presente trabalho teve como objetivo geral o estudo da transferência de calor durante tratamentos térmicos de alimentos líquidos embalados em garrafas comerciais através de modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD).

Os objetivos específicos foram:

- Determinar o coeficiente de convecção médio global (h) entre o fluido de aquecimento e de resfriamento e as paredes externas de duas garrafas comerciais (h_{global}), comparando-se metodologias que utilizam produto condutivo e convectivo para resolução do problema inverso de transferência de calor (*inverse heat transfer problem*);
- Avaliar quatro metodologias para estabelecimento das condições de contorno para simulação de tratamento térmico de alimentos embalados em garrafas por fluidodinâmica computacional (CFD), sendo elas: (M1) utilização de coeficiente de convecção global (h_{global}) entre o fluido de aquecimento e a parede externa da embalagem, e perfil de temperatura do meio de aquecimento (T_{∞}): h e T_{∞} ; (M2) consideração do perfil de temperatura da superfície externa da embalagem ($T_{\text{extremidade_embalagem}}$) igual a do meio de aquecimento (T_{∞}): $T_{\text{extremidade_embalagem}} = T_{\infty}$; (M3) consideração do perfil de temperatura da superfície externa do produto fluido ($T_{\text{extremidade_fluido}}$) igual a do meio de aquecimento (T_{∞}): $T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\infty}$; (M4) utilização de perfil de temperatura na fronteira entre o fluido e a parede interna da embalagem ($T=T(x,y,z,t)$): $T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\text{perfil_térmico}}$;
- Caracterizar reologicamente um alimento líquido modelo (suspensão 0,3% de CMC) e caracterizar no mesmo a inativação térmica de um microrganismo que possa ser considerado modelo em processos de pasteurização (*Lactobacillus plantarum*);
- Avaliar o tratamento térmico de alimentos líquidos em duas embalagens comerciais, através de perfis de temperatura, velocidade, característica da região de aquecimento mais lento (RAML) e inativação microbiana;

- Validar o modelo de CFD obtido através de avaliações de perfis de temperatura e inativação microbiana.

1.3. Referências

BRANDON, H.; PELTON, P.; STAACK, G. State-of-the-art methodology for evaluation of pasteurizer heating and cooling processes. **MBAA Technical Quaterly**, v.19, n.1, p.34-40, 1982.

BRANDON, H.; HULING, J.; STAACK, G. Computer simulation of pasteurizer performance. **MBAA Technical Quaterly**, v.20, n.1, p.39-46, 1983.

BRANDON, H.; GARDNER, R.; HULING, J.; STAACK, G. Time-dependent modeling of in-package pasteurization. **MBAA Technical Quaterly**, v.21, n.4, p.153-159, 1984.

CHEN, X. D.; HUANG, H. J.; GHANI, A. G. A. Thermal sterilization of liquid foods in a sealed container – developing simple correlations to account for natural convection. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n.1, article 5, 2005.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerical modeling of natural convection heating in canned liquid foods. **Transactions of the ASAE**, v. 30, n. 5, p. 1542-51, 1987.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerically predicted transient temperature and velocity profiles during natural convection heating of canned liquid foods. **Journal of Food Science**, v. 53, n. 1, p. 191-5, 1988.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Combined CFD and experimental approach for determination of the surface heat transfer coefficient during thermal processing of eggs. **Journal of Food Science**, v. 68, n. 3, p. 943-51, 2003.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis of combined conductive and convective heat transfer in model eggs. **Journal of Food Engineering**, v. 63, p. 281-90, 2004.

DILAY, E.; VARGAS, J. V. C.; AMICO, S. C.; ORDONEZ, J. C. Modeling, simulation and optimization of a beer pasteurization tunnel. **Journal of Food Engineering**, v.77, n.3, p.500-513, 2006.

ENGELMAN, M. S.; SANI, R. L.. Finite-element simulation of an in-package pasteurization process. **Numerical Heat Transfer**, v. 6, p. 41-54, 1983.

FARID, M.; GHANI, A. G. A. A new computational technique for the estimation of sterilization time in canned food. **Chemical Engineering and Processing**, v.43, n.4, p.523-531, 2004.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of natural convection heating of canned food by computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 41, p. 55-64, 1999a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. An investigation of deactivation of bacteria in a canned liquid food during sterilization using computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Food Engineering**, v. 42, p. 207-14, 1999b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Thermal sterilization of canned food in a 3-D pouch using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 48, p. 147-56, 2001a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of biochemical changes in a viscous liquid canned food during sterilization using computational fluid dynamics. **Food Australia**, v. 53, n. 1-2, p. 48-53, 2001b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Numerical simulation of transient temperature and velocity profiles in a horizontal can during sterilization using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 77-83, 2002a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal inactivation of *Bacillus stearothermophilus* in food pouches. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 221-8, 2002b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal destruction of vitamin C in food pouches. **Computers and Eletronicns in Agriculture**, v. 34, p. 129-43, 2002c.

GHANI, A. G. A.. A computer simulation of heating and cooling liquid food during sterilization process using computational fluid dynamics. **Association for Computing Machinery New Zealand Bulletin**, v. 2, n. 3. Disponível em <http://www.acm.org/chapters/acm_nz/bulletin/vol2/issue3/articles/v2i3id01.pdf>, acesso em 19/01/2007, 2006.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.. Using the computational fluid dynamics to analyze the thermal sterilization of solid-liquid food mixture in cans. **Innovative Food Science & Emerging Technologies**, v. 7, p. 55-61, 2006.

HORN, C. S.; FRANKE, M.; BLAKEMORE, B.; STANNEK, W. Modeling and simulation of pasteurization and staling effects during tunnel pasteurization of bottled beer. **Food and Bioproducts Processing**, v.75, n.1, p.23-33, 1997.

KANNAN, A.; SANDAKA P. C. G. Heat transfer analysis of canned food sterilization in a still retort. **Journal of Food Engineering**, v. 88, n.2, p.213-228; 2008.

KRISHNAMURTHY, K.; JUN, S.; IRUDAYARAJ, J.; DEMIRCI, A. Efficacy of infrared heat treatment for inactivation of *Staphylococcus aureus* in milk. **Journal of Food Process Engineering**, v.31, n.6, p.798-816, 2008.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.; BLAYLOCK, J.. Numerical simulation of natural convection heating of canned thick viscous liquid food products. **Journal of Food Science**, v. 55, n. 5, p. 1403-1411, 1420, 1990.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.. Transient temperature and velocity profiles in a canned non-Newtonian liquid food during sterilization in a still-cook retort. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 34, n. 4/5, p. 1083-96, 1991.

KUMAR, A.; DILBER, I. Fluid flow and its modeling using computational fluid dynamics. In... SABLANI, S. S.; DATTA, A. K.; SHAFIURRAHMAN, M. (Ed.) **Handbook of food bioprocess modeling techniques**. Boca Raton: CRC Press, 2007.

MARTINS, R. C. Simple finite volumes and finite elements procedures for food quality and safety simulations. **Journal of Food Engineering**, v.73, n.4, p.327-338, 2006.

NORTON, T.; SUN, D. W. Computational fluid dynamics (CFD) – an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: a review. **Trends in Food Science and Technology**, v. 17, p. 600-20, 2006.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M. Three-Dimensional Mathematical Modeling of Microbiological Destruction of *Bacillus stearothermophilus* in conductive baby food packed in glass container. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n. 2, p. 1-8, 2005.

PORNCHALOEMPONG, P.; BALABAN, M. O.; TEIXEIRA, A. A.; CHAU, K. V.. Numerical simulation of conduction heating in conically shaped bodies. **Journal of Food Process Engineering**, v. 25, p. 539-55, 2003.

SCOTT, G.; RICHARDSON, P.. The application of computational fluid dynamics in the food industry. **Trends in Food Science and Technology**, v. 8, n. April, p. 119-24, 1997.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. Enhanced food sterilization through inclination of the container walls and geometry modifications. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 3753-62, 2005.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. CFD studies on natural convective heating of canned food in conical and cylindrical containers. **Journal of Food Engineering**, v. 77, p. 1024-23, 2006.

WANG, Q. Z.; SAKAI, N.; HANZAWA, T.. Numerical analysis of heat transfer of canned liquid foods containing fibers or particles during sterilization. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 33, n.5, p. 703-8, 2000.

XIA, B.; SUN, D. W.. Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: a review. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 5-24, 2002.

Capítulo 2: Revisão Bibliográfica

2.1. Tratamento Térmico de Alimentos

O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados para a conservação de alimentos (GHANI et al., 2001a), sendo que a *appertização* ainda é o método de conservação mais efetivo, mesmo comparando-se com os recentes avanços de outras técnicas (FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 1999a). É uma operação unitária onde o alimento é aquecido até determinada temperatura e por determinado tempo para promover requerida inativação microbiana e/ou enzimática (FELLOWS, 2000), que poderiam resultar em deterioração do alimento durante a estocagem e/ou prejudicar a saúde e segurança do consumidor (LUND, 1977).

O tratamento térmico de alimentos pode ser realizado dentro ou fora da embalagem. Nos processos realizados dentro da embalagem, esta é processada simultaneamente com o alimento, que não sofre mais contato com o ambiente após processo (sistema hermético). Quando o alimento é processado em trocadores de calor, seu acondicionamento deve ser realizado em uma embalagem previamente tratada e em um ambiente apropriado. Desses, os processos realizados com o alimento já embalado são mais seguros por apresentarem menor probabilidade de contaminação, porém resultam em maior gradiente de reações (como inativação microbiana ou enzimática, perda de nutrientes e reações físico-químicas) e gasto energético.

O dimensionamento desse processo deve levar em consideração as características de transferência de calor do meio de aquecimento para o produto e através do produto. Deve considerar propriedades químicas, físicas e microbiológicas inerentes ao alimento, características de sua embalagem e do equipamento/meio de aquecimento e resfriamento, balanceado de modo a garantir a segurança no consumo com menores alterações sensoriais, nutricionais e menor custo (AUGUSTO, SANTANA, CRISTIANINI, 2008)

A utilização de modelamento matemático da transferência de calor na avaliação de tratamentos térmicos vem se mostrando uma poderosa ferramenta na garantia da segurança sem comprometimento da qualidade nutricional e

sensorial dos alimentos (PORNCHALOEMPONG, BALABAN, TEIXEIRA, 2003a; PINHO, CRISTIANINI, 2005).

Segundo Xia e Sun (2002) e Verboven et al. (1997), a demanda pelo consumidor de produtos seguros e de maior qualidade e conveniência vêm crescendo ao longo dos anos, estimulando o desenvolvimento de novos processos e tecnologias. Kannan e Sandaka (2008) observam a necessidade de se conhecer melhor o fenômeno de transferência de calor associado aos tratamentos térmicos de alimentos para melhoria dos processos. Segundo Xia e Sun (2002), a utilização de modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD) na indústria de alimentos pode auxiliar esses desenvolvimentos.

A otimização da transferência de calor durante o tratamento térmico de determinado alimento pode resultar em melhores características sensoriais e nutricionais e menores custos de processo (principalmente de energia), mantendo-se a mesma segurança de consumo e promovendo a escolha do produto pelo consumidor. As simulações por CFD constituem poderosa ferramenta para melhor entendimento, avaliação e otimização de processos, sendo utilizada por diversos autores no estudo de tratamentos térmicos de alimentos.

2.1.1. Inativação microbiana

As reações químicas e bioquímicas (como inativação microbiana) envolvidas no tratamento térmico de alimentos possuem relação exponencial com a temperatura. Assim, mesmo pequenas diferenças na temperatura do meio de troca térmica podem ser significativas ao longo do processo. Quando relacionadas à inativação microbiana, resultando em cargas finais diferentes, elas podem ser críticas ao se considerar a natureza exponencial do crescimento microbiano (AUGUSTO, SANTANA, CRISTIANINI, 2008).

Assim, o conhecimento das características de transferência de calor do alimento e do meio de troca térmica, e da cinética de inativação microbiana são essenciais para o dimensionamento de processo seguro e eficiente.

A cinética de inativação microbiana é bastante conhecida. Na maioria dos casos, em especial na inativação de bactérias, trata-se de uma cinética de primeira ordem (TEIXEIRA, 2006; STUMBO, 1973).

A análise a seguir correlaciona a inativação microbiana em tratamentos térmicos, introduzindo-se conceitos e definições posteriormente utilizadas no presente trabalho. Pode ser encontrada em diversas fontes, sugerindo-se aqui os trabalhos de Teixeira (2006), Ramaswamy e Marcotte (2006), Pflug (1988) e Stumbo (1973).

A cinética de primeira ordem expressa que a taxa de redução microbiana, a uma dada temperatura, é função da concentração naquele instante, isto é, em um mesmo intervalo de tempo, a redução relativa (em porcentagem, por exemplo) é sempre igual (Equação 2.01):

$$\frac{dc}{dt} = -k_T \cdot c \quad (\text{Equação. 2.01})$$

Para se obter uma expressão que correlaciona a inativação microbiana ao longo de um intervalo de tempo, a uma dada temperatura:

$$\frac{dc}{c} = -k_T \cdot dt \quad (\text{Equação. 2.02})$$

Integrando-se a Equação 2.02 ao longo do processo, tem-se:

$$\int_{c_0}^{c_f} \frac{dc}{c} = - \int_{t_0}^{t_f} k_T \cdot dt \quad (\text{Equação. 2.03})$$

$$\ln(c) \Big|_{c_0}^{c_f} = -k_T \Big|_{t_0}^{t_f} \quad (\text{Equação. 2.04})$$

Considerando $\Delta t = t_f - t_0 = t$,

$$\ln(c_f) - \ln(c_0) = -k_T \cdot (t_f - t_0) = -k_T \cdot t \quad (\text{Equação. 2.05})$$

$$\ln\left(\frac{C_0}{C_f}\right) = k_T \cdot t \quad (\text{Equação. 2.06})$$

Tradicionalmente, a inativação microbiana é expressa em função do *tempo de redução decimal* (D_T), que se relaciona com a *constante de taxa de inativação microbiana* (k_T) através da Equação 2.07, uma vez que o D_T é definido como “o tempo necessário, a uma determinada temperatura (T), para inativação de um ciclo logarítmico (90%) de uma população microbiana”:

$$k_T = \frac{2,303}{D_T} \quad (\text{Equação. 2.07})$$

E então, utilizando o logaritmo na base 10 ($\log_{10} = \log$):

$$\log\left(\frac{C_0}{C_f}\right) = \frac{t}{D_T} \quad (\text{Equação. 2.08})$$

O conceito de D_T pode ser melhor visualizado graficamente, através de uma curva de inativação microbiana (Figura 2.1), que relaciona a concentração microbiana em função do tempo de manutenção a uma temperatura específica (T). Traçando-se a curva com escala logarítmica no eixo da concentração microbiana, identifica-se claramente o valor de D_T como o tempo necessário para a redução de um ciclo logarítmico na concentração microbiana. Observa-se que esse valor corresponde ao inverso da inclinação da linearização da curva de inativação microbiana.

Figura 2.1. Representação gráfica do conceito de D_T através de curvas de inativação microbiana para uma determinada temperatura (T)

Os valores de D_T representam a taxa de inativação microbiana em uma dada temperatura, que é crescente com o aumento da mesma, também seguindo uma cinética de primeira ordem. Essa relação fica clara ao se observar uma curva de inativação microbiana para diferentes isotermas (Figura 2.2):

Figura 2.2. Curvas de inativação microbiana para três isotermas

A variação de D_T se relaciona com a temperatura através do *coeficiente térmico* (z), que de forma análoga ao desenvolvido nas Equações 2.01 a 2.08, representa “a diferença de temperatura necessária para a redução de um ciclo logarítmico (90%) no valor de D_T ”, sendo expresso pela Equação 2.09:

$$\log\left(\frac{D_{T_2}}{D_{T_1}}\right) = \frac{T_1 - T_2}{z} \quad (\text{Equação. 2.09})$$

De forma análoga à análise anterior, o conceito de z pode ser melhor visualizado graficamente, através de uma curva que correlaciona D_T em função da temperatura (T)(Figura 2.3).

Figura 2.3. Representação gráfica do conceito de z

Os conceitos de D_T e z não se relacionam exclusivamente à inativação microbiana, podendo ser utilizados na interpretação de qualquer reação bioquímica ou físico-química que siga uma cinética de primeira ordem durante tratamentos térmicos de alimentos, tais como inativação enzimática, destruição térmica de nutrientes, desnaturação de proteínas e alterações sensoriais (como cor ou textura). Lund (1977) apresenta valores típicos de $D_{121^\circ\text{C}}$ e z para essas reações (Tabela 2.1):

Tabela 2.1. Valores típicos de $D_{121^{\circ}\text{C}}$ e z para reações bioquímicas e físico-químicas em alimentos durante tratamento térmico (LUND, 1977)

Constituinte	z ($^{\circ}\text{C}$)	$D_{121^{\circ}\text{C}}$ (min)
Vitaminas	25 – 30	100 - 1000
Cor, textura e aroma	25 – 45	5 – 500
Enzimas	6 – 55	1 – 10
Células vegetativas	4 – 7	0,002 – 0,02
Esporos	6 – 12	0,1 – 5,0

O dimensionamento de um tratamento térmico é realizado para se atingir uma determinada redução decimal (γ , Equação 2.10) do alvo do processo (microrganismo ou enzima mais termorresistente), à partir do conhecimento da concentração inicial característica do alimento (C_0) e concentração final desejada ou necessária (C_f).

$$\gamma = \log\left(\frac{C_0}{C_f}\right) \quad (\text{Equação. 2.10})$$

À partir do γ requerido e dos resultados obtidos com testes de penetração de calor, define-se o binômio tempo x temperatura (txT) necessário para se atingir os objetivos do processo.

Como um processo não pode ser caracterizado pelo seu binômio txT, uma vez que um mesmo binômio resulta em diferentes reduções decimais em função das características do alimento (propriedades físicas, transferência de calor por condução ou convecção), meio de troca térmica (coeficiente convectivo de transferência de calor – h , área de contato) e características do alvo (D_T e z para o alimento em questão), a forma mais utilizada para caracterização desses processos é pelo *valor de esterilização* (F).

O valor de esterilização (F) representa o tempo equivalente, à temperatura de referência (T_{ref}), que o alimento é submetido durante o processo:

$$F = t_{T_{ref}} = \log\left(\frac{C_0}{C_f}\right) \cdot D_{T_{ref}} = \gamma \cdot D_{T_{ref}} \quad (\text{Equação. 2.11})$$

Observa-se que o tratamento térmico é um processo de transferência de calor transiente, onde a temperatura do alimento é função da posição no produto (x, y e z) e tempo (t). Dessa forma, a redução microbiana não é uniforme ao longo do produto. Quando calculado através da Equação 2.11 e 2.12, o F é denominado *esterilização média da massa* (Fm), pois representa a redução microbiana média ao longo do produto, ou seja, a média ponderada em função do volume (V) do produto, das reduções de cada volume infinitesimal:

$$Fm = \frac{1}{V} \int_{V_0}^{V_n} D_{T_{ref}} \cdot \gamma(V) dV \quad (\text{Equação. 2.12})$$

No caso de alimentos condutivos, onde não há mistura das porções de alimentos com maior e menor redução microbiana, o dimensionamento do processo à partir do valor de Fm não é um método seguro. Deve-se realizar tal dimensional para o caso mais drástico, isto é, para o ponto frio (PF). Nesse caso, o F é calculado à partir da história térmica desse ponto, e designado como Fp.

Cada intervalo de tempo que o ponto frio do produto permanece a uma dada temperatura resulta uma redução microbiana. Para avaliação do Fp, portanto, deve-se avaliar a redução microbiana em intervalos de tempo infinitesimais ao longo de todo o processo, ou seja:

$$Fp = \gamma \cdot D_{T_{ref}} = D_{T_{ref}} \cdot \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\sum_{t=t_0}^{t_f} \frac{\Delta t}{D_T(t)} \right) = D_{T_{ref}} \cdot \int_{t_0}^{t_f} \frac{dt}{D_T(t)} = \int_{t_0}^{t_f} \frac{D_{T_{ref}}}{D_T(t)} dt$$

$$(\text{Equação. 2.13})$$

Substituindo-se a Equação 2.09 na 2.12, tem-se:

$$Fp = \int_{t_0}^{t_f} 10^{\frac{T(t)-T_{ref}}{z}} dt \quad (\text{Equação. 2.14})$$

Define-se como *letalidade* (L) a relação:

$$L = 10^{\frac{T(t)-T_{ref}}{z}} = \frac{D_{T_{ref}}}{D_T(t)} \quad (\text{Equação. 2.15})$$

Podendo-se então reescrever Fp como:

$$Fp = \int_{t_0}^{t_f} L(t) dt \quad (\text{Equação. 2.16})$$

O Fm (Equação 2.12) pode então ser escrito como:

$$Fm = \frac{1}{V} \int_{V_0}^{V_n} D_{T_{ref}} \cdot \gamma(V) dV = \frac{1}{V} \int_{t_0}^{t_f} \int_{V_0}^{V_n} L(t, V) dV dt = \frac{1}{V} \int_{t_0}^{t_f} \int_{V_0}^{V_n} 10^{\frac{T(t, V)-T_{ref}}{z}} dV dt \quad (\text{Equação. 2.17})$$

O Fm pode ser obtido experimentalmente à partir dos valores de $D_{T_{ref}}$ e da redução microbiana, utilizando-se a Equação 2.11. O Fp pode ser obtido através do monitoramento da história térmica do ponto frio, previamente determinado, realizando-se a aquisição dos dados (T) a intervalos pequenos de tempo. Dessa

forma, através da regra dos trapézios para resolução da Equação 2.14, obtém-se F_p (Equação 2.18):

$$F_p = \int_{t_0}^{t_f} 10^{\frac{T(t)-T_{ref}}{z}} dt \cong \sum_{t_0}^{t_f} 10^{\frac{T_{PF}(t)-T_{ref}}{z}} \Delta t \quad (\text{Equação. 2.18})$$

O tratamento térmico de alimentos embalados resulta em superprocessamento de algumas regiões para garantia de segurança e conservação do ponto frio. No caso de alimentos condutivos, essa abordagem é necessária (dimensionamento para F_p), e resulta em gradiente de F no produto final. No caso de alimentos líquidos, onde há mistura de regiões do produto, a contagem microbiana final será a média das diversas porções, portanto relacionada com F_m . Nesse caso, o processo poderia ser dimensionado para o F_m , porém, por questões práticas (necessidade de medida de temperatura através de um termopar) é realizado para um F_p .

Diferentes processos e/ou embalagens podem resultar em maiores ou menores gradientes. A avaliação da homogeneidade desses processos é proposta por Augusto, Santana e Cristianini (2008) através da Relação dos Valores de Esterilização (RF), útil também para a comparação entre embalagens e processos. A RF é definida como a razão entre o valor de esterilização no ponto frio (F_p) e o médio da massa (F_m) (Equação 2.19), representando a distribuição dos valores de F no produto. Valores próximos de 1,0 indicam processo mais homogêneo, com menor gradiente de F no produto final, enquanto valores menores do que 1,0 indicam maiores gradientes de inativação microbiana, destruição de nutrientes e características sensoriais.

$$RF = \frac{F_p}{F_m} \quad (\text{Equação. 2.19})$$

2.2. Utilização de fluidodinâmica computacional (CFD) para simulação de tratamentos térmicos de alimentos

Inicialmente desenvolvida para as indústrias automotivas, aeroespaciais e nucleares, a fluidodinâmica computacional ou mecânica dos fluidos computacional (CFD, de *computational fluid dynamics*) é uma técnica versátil, que pode ser aplicada na resolução de diversos problemas em diferentes indústrias (SCOTT, RICHARDSON, 1997). Essa técnica é relativamente nova na indústria de alimentos, e vem sendo utilizada em diversas aplicações, tais como ventilação, secagem, refrigeração, misturas, esterilização (tratamento térmico), entre outros, permitindo maior segurança e qualidade tanto para a indústria como para o consumidor (GHANI, 2006; NORTON, SUN, 2006; XIA, SUN, 2002).

2.2.1. Fundamentos da fluidodinâmica computacional (CFD)

A CFD é uma técnica numérica de resolução de equações que governam o escoamento de fluidos em uma determinada geometria. Além do escoamento de fluidos, descreve a transferência de calor e massa envolvidas. Consiste em resolução numérica e simultânea das *Equações de Transporte de Navier-Stokes*, que descrevem a conservação de massa, momento e energia e de equações de estado (NORTON, SUN, 2006; SCOTT, RICHARDSON, 1997).

Segundo Norton e Sun (2006), a CFD vem sendo largamente utilizada na resolução de problemas envolvendo escoamento de fluidos, muitas vezes em conjunto ou em substituição a experimentos, tendo em vista a confiabilidade dos resultados obtidos e alto custo e demanda de tempo na realização de experimentos. Além disso, observam que as resoluções analíticas possuem limitações decorrentes de generalizações, aproximações e considerações utilizadas.

Ghani (2006) observa que a medição experimental de temperaturas pode ser difícil em determinadas regiões da embalagem, como a RAML (região de

aquecimento mais lento, ou *SHZ*, de *slowest heating zone*), região que se move ao longo do tratamento térmico. Kannan e Sandaka (2008), Ghani (2006), Ghani e Farid (2006), Varma e Kannan (2006), Farid e Ghani (2004), Ghani, Farid e Chen (2002a), Ghani et al. (2001a), Kumar e Bhattacharya (1991) e Brandon et al., (1984) observam que a inserção de termopares para medição de temperaturas ao longo do processo pode causar distúrbios no fluxo de líquido, podendo resultar em mudança na localização da RAML ou no valor de esterilização (F). Segundo Denys, Pieters e Dewettink (2003), tais erros também podem ocorrer devido à alta condutividade térmica dos termopares, que podem influenciar o fluxo de calor.

Segundo Ghani, Farid e Chen (2002b), um modelo teórico de inativação bacteriana devidamente validado é desejado para estudos de variações de processo, devido a dificuldade da medição experimental da redução microbiológica. Observam também que a determinação experimental da concentração microbiológica em pontos específicos da embalagem, como a RAML, é extremamente difícil, sendo necessária a determinação da concentração média da embalagem. Ghani, Farid, Chen (2002c), observam problema semelhante na determinação da concentração de ácido ascórbico (vitamina C) em pontos específicos.

Tais problemas podem ser contornados através do uso de simulações por CFD, permitindo inclusive a avaliação de novos sistemas anteriormente à decisão sobre a necessidade de testes de validação, como alterações geométricas de forma muito mais rápida e barata do que a realização de experimentos (XIA, SUN, 2002). De fato, diversos autores tem utilizado a CFD na avaliação de processos térmicos de alimentos.

Entretanto, a realização de experimentos para validação do modelo é necessária (KUMAR, DILBER, 2007; NORTON, SUN, 2006; CHEN, HUANG, GHANI, 2005), principalmente devido às aproximações e considerações realizadas (XIA, SUN, 2002). Muitos trabalhos de CFD não realizam nenhum tipo de validação com dados experimentais (GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; CHEN et al., 2005; VARMA, KANNAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999b; GHANI et al., 2001b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; BRANDON et al., 1984; ENGELMAN, SANI, 1983),

enquanto outros só o fazem através da avaliação visual do perfil térmico de determinado ponto do alimento (KANNAN, SANDAKA, 2008; VARMA, KANNAN, 2006; DENYS, PIETERS, DEWETTINK, 2004; GHANI et al., 2001a; WANG, SAKAI, HANZAWA, 2000; GHANI et al., 1999a; DATTA, TEIXEIRA, 1987; BRANDON, PELTON, STAACK, 1982). A comparação quantitativa de perfis de temperatura obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD é realizada apenas nos trabalhos de Krishnamurthy et al. (2008), Dilay et al. (2006), Horn et al. (1997) e Brandon, Huling e Staack (1983). A comparação dos dados de inativação microbiana obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD é realizada apenas no trabalho de Ghani, Farid e Chen (2002b).

Observa-se também que a exatidão dos resultados obtidos através de modelagens matemáticas, como a CFD, é função da exatidão dos dados utilizados, especialmente propriedades físicas dos materiais testados (SCOTT, RICHARDSON, 1997). Augusto, Santana e Cristianini (2008) demonstraram que alterações de 5% nos valores de condutividade térmica (k) e calor específico (C_p) podem resultar em alterações de cerca de 20% no valor de esterilização (F) de processos de *appertização*.

Segundo Verboven, Baerdemaeker e Nicolai (2004), algumas razões que tornam bastante exatas as simulações por CFD, e que, portanto, devem ser observadas são: eficiência na representação geométrica; as equações são resolvidas em uma pequena dimensão de discretização, minimizando-se erros; todos os parâmetros do modelo são propriedades termofísicas do fluido, cujos valores são conhecidos; as condições iniciais e de contorno são conhecidas em função do tempo e espaço.

Os freqüentes avanços na tecnologia computacional (aumento da velocidade de cálculo e capacidade de memória) resultam em maior rapidez e precisão das simulações realizadas, o que, em conjunto com a crescente disponibilidade de programas comerciais, tornam viável o uso da CFD na indústria de alimentos (GHANI et al., 2001a). De fato, segundo Norton e Sun (2006), a CFD vem sendo utilizada no desenvolvimento de equipamentos e elaboração de processos na indústria de alimentos.

Na definição do problema a ser resolvido por CFD, deve-se considerar três elementos de discretização: as equações de transporte que descrevem o escoamento de fluido, a representação geométrica do sistema a ser estudado e o procedimento numérico usado na resolução do problema (SCOTT, RICHARDSON, 1997).

2.2.1.1. Equações Envolvidas

A resolução de problemas de fluidodinâmica envolve a resolução simultânea das *Equações de Transporte de Navier-Stokes* (Conservação de Massa, ou Lei da Continuidade; Conservação de Momento, ou Segunda Lei de Newton do Movimento, e Conservação de Energia, ou Primeira Lei da Termodinâmica) e *Equações de Estado* (CHEN, 2006; NORTON, SUN, 2006; SCOTT, RICHARDSON, 1997).

2.2.1.1.1. Conservação de Massa (Lei da Continuidade)

A lei da conservação de massa, ou lei da continuidade, garante que a quantidade de massa que escoar para um determinado elemento de fluido seja exatamente a mesma que deixa esse elemento (NORTON e SUN, 2006). Segundo Chen (2006), a equação de conservação de massa (continuidade) em coordenadas cartesianas é dada pela Equação 2.19:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (\text{Equação. 2.19})$$

2.2.1.1.2. Conservação da Quantidade de Movimento (Segunda Lei de Newton do Movimento)

A lei da conservação da quantidade de movimento (ou momento), ou Segunda Lei de Newton do Movimento, descreve que a soma de forças externas agindo sobre um elemento de fluido é igual a taxa de variação de seu momento linear (NORTON e SUN, 2006). As equações de conservação de momento em coordenadas cartesianas para fluidos incompressíveis são dadas pelas Equações 2.20, 2.21 e 2.22 (CHEN, 2006):

$$\rho \cdot \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = \rho \cdot a_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \cdot \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right)$$

(Equação. 2.20)

$$\rho \cdot \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = \rho \cdot a_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \cdot \left(\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right)$$

(Equação. 2.21)

$$\rho \cdot \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = \rho \cdot a_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \cdot \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right)$$

(Equação. 2.22)

2.2.1.1.3. Conservação de Energia (Primeira Lei da Termodinâmica)

A lei da conservação de energia, ou Primeira Lei da Termodinâmica, descreve que a taxa de variação de energia em um elemento de fluido é igual a sua troca térmica (calor) mais o trabalho realizado sobre ou pelo elemento

(NORTON, SUN, 2006). A equação de conservação de energia em coordenadas cartesianas, desconsiderando-se os efeitos de dissipação viscosa, geração interna de energia (calor) e dissipação, é dada pela Equação 2.23 (CHEN, 2006):

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{\rho \cdot Cp} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right]$$

(Equação. 2.23)

2.2.1.1.4. Equação de Estado

A *Aproximação de Boussinesq*, que relaciona a densidade de um fluido com suas propriedades termodinâmicas, é bastante utilizada em problemas envolvendo força de empuxo, como na convecção livre. Considera que todas as propriedades do fluido são constantes, exceto a densidade que é função da temperatura (SCOTT, RICHARDSON, 1997), ocorrendo apenas nas equações de momento (NORTON, SUN, 2006). Tal aproximação vem sendo utilizada com êxito por diversos autores (KANNAN, SANDAKA, 2008; VARMA, KANNAN, 2006; GHANI, 2006; GHANI e FARID, 2006; DENYS, PIETERS, DEWETTINK, 2004; VARMA, KANNAN, 2005; DENYS, PIETERS, DEWETTINK, 2004; FARID, GHANI, 2004; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI, FARID, CHEN, 2002b; GHANI, FARID, CHEN, 2002c; WANG et al., 2000; GHANI et al., 2001a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987 e ENGELMAN, SANI, 1983).

Segundo Chen (2006), a equação de estado relacionando a *Aproximação de Boussinesq* é dada pela Equação 2.24:

$$\rho = \rho_{ref} [1 - \beta(T - T_{ref})] \quad (\text{Equação. 2.24})$$

2.2.1.1.5. Inativação Microbiana e Destruição de Nutrientes

Para a avaliação da inativação microbiana durante tratamento térmico, deve-se resolver a equação diferencial que governa a concentração microbiana simultaneamente às equações de continuidade (Equação 2.19), quantidade de movimento (Equações 2.20, 2.21 e 2.22) e energia (Equação 2.23) (GHANI et al., 1999b). Segundo Chen (2006), a inativação microbiana é calculada segundo a Equação 2.25:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_x \frac{\partial c}{\partial x} + v_y \frac{\partial c}{\partial y} + v_z \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \cdot \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \cdot \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \dot{m}$$

(Equação. 2.25)

Onde:

$$\dot{m} = -k_T \cdot c$$

(Equação. 2.26)

A correlação entre o tempo de redução decimal (D_T) e constante de taxa de inativação microbiana (k_T) é dada pela Equação 2.07, enquanto a correlação entre tempos de redução decimal (D_T) e temperatura é dada pela Equação 2.09.

A Equação 2.26 só pode ser utilizada para células microbianas devido ao seu pequeno diâmetro, assumindo-se que estas seguem as correntes de convecção naturais do fluido, isto é, possuem velocidade relativa nula. Caso fossem utilizadas partículas com diâmetro maior, seu movimento deveria ser traçado segundo o *Método de Lagrange* (CHEN, 2006).

Segundo Datta (1991), o *Método de Lagrange* avalia a variação de temperatura de uma porção do fluido através do tempo e espaço, exigindo grande esforço computacional. O *Método de Euler* avalia a distribuição espacial de temperatura no fluido ao longo do tempo, exigindo menor número de cálculos. Nesse trabalho, o autor comparou essas duas metodologias para modelagem do

tratamento térmico de alimentos líquidos, tendo em vista a característica de locomoção do fluido. Concluiu que o *Método de Euler* pode ser utilizado.

Ghani *et al.* (1999b) estudaram a inativação bacteriana em um alimento líquido autoclavado. Compararam metodologia em que a difusão das células bacterianas no fluido segue uma modificação da equação de difusão Browniana com a consideração de difusão desprezível. Não observaram diferenças entre as duas metodologias, concluindo que o efeito da difusão das células não possui efeito significativo na inativação microbiana.

2.2.1.2. Representação da Geometria Envolvida

As equações que descrevem o escoamento de fluido são resolvidas para a geometria envolvida, ou domínio do fluxo. O espaço físico descrito pela geometria é dividido em um grande número de pequenos volumes. Cada pequeno volume é conectado aos volumes vizinhos, formando a malha computacional, onde são obedecidas as conservações de massa, momento e energia (KUMAR, DILBER, 2007; SCOTT, RICHARDSON, 1997).

Na elaboração da malha computacional deve-se observar as dimensões dos volumes gerados. Em geral, quão menores forem as dimensões desses, mais acuradas serão as estimativas obtidas por CFD. Por outro lado, tal refino implica em maior demanda computacional e conseqüentemente maior tempo para resolução dos problemas (KUMAR, DILBER, 2007; SCOTT, RICHARDSON, 1997).

Em muitos casos, como na análise de convecção natural de alimentos líquidos embalados, torna-se necessária a construção de malha não uniforme, isto é, com refino em regiões de maiores gradientes (KUMAR, DILBER, 2007), como utilizado por diversos autores (AUGUSTO, PINHEIRO, CRISTIANINI, 2008; AUGUSTO, CRISTIANINI, 2008; KANNAN, SANDAKA, 2008; GHANI, FARID, 2006; VARMA, KANAN, 2006; VARMA, KANAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI *et al.*, 1999a; GHANI *et al.*, 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987).

Uma vez elaborada a malha computacional, deve-se definir as condições de contorno do problema, essenciais para a definição das condições de fluxo dentro do domínio, e as considerações adotadas (SCOTT, RICHARDSON, 1997).

2.2.1.3. Resolução Numérica

A análise numérica pode ser realizada através de várias formas de discretização do modelo em questão. As três formas mais importantes são as metodologias de diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos (NORTON, SUN, 2006; NICOLAÏ, VERBOVEN, SCHEERLINCK, 2001). O método de diferenças finitas possui limitações na maioria das aplicações devido as complexas geometrias envolvidas. Existem poucos programas comerciais baseados em elementos finitos, principalmente devido as dificuldades de programação e entendimento relacionados com a técnica. O método de volumes finitos possui entendimento e programação mais fáceis e maior versatilidade, sendo, portanto, mais utilizado nos programas comerciais de CFD (NORTON, SUN, 2006; MARTINS, 2006).

No método de elementos finitos (FEM, ou análise de elementos finitos – FEA) a solução das equações diferenciais são aproximadas para cada elemento por polinômios que relacionam os valores de determinada propriedade em seus nós (NICOLAÏ, VERBOVEN, SCHEERLINCK, 2001). No método de volumes finitos, as equações diferenciais são aproximadas através de balanços da propriedade envolvida (massa, quantidade de movimento, entalpia...) por integração sobre volumes elementares (volumes finitos) (NICOLAÏ, VERBOVEN, SCHEERLINCK, 2001; MALISKA, 1995). Dessa forma, a resolução das equações ocorre no nível de volumes elementares, próximo do infinitesimal desejado com a resolução numérica (MALISKA, 1995).

2.3. Utilização de CFD para simulação de tratamentos térmicos de alimentos líquidos

Segundo Datta e Teixeira (1988), ao contrário da condução, problemas de aquecimento por convecção natural não permitem soluções analíticas simples. A localização e magnitude transiente da região de aquecimento mais lento (RAML) não são óbvias e nem facilmente obtidas. Apenas uma resolução completa das equações diferenciais que governam tal fenômeno permitem correta avaliação, sendo este um problema complexo na área de CFD. Segundo Ghani et al. (1999a), a maioria dos trabalhos realizados de modelagem matemática se referem a aquecimento condutivo, devido a simplicidade das soluções envolvidas.

Diversos autores vem utilizando a CFD como ferramenta para avaliação de tratamentos térmicos de alimentos. A utilização da técnica permite o acompanhamento do tratamento térmico através de perfis de isothermas, de velocidade das correntes convectivas, localização do ponto frio ou região de aquecimento mais lento (RAML, ou SHZ de *slowest heating zone*) e transformações nos alimentos, como inativação e destruição de microrganismos, enzimas e nutrientes.

Engelman e Sani (1983), Brandon, Huling e Staack (1983) e Brandon et al. (1984) utilizaram técnicas de simulação por elementos finitos para resolução das equações envolvidas em CFD. Estudaram a distribuição de temperatura e velocidades das correntes de convecção durante tratamento térmico (pasteurização, com temperatura do meio de 60-65°C) de água em garrafas e latas. Pela primeira vez pôde-se observar os perfis de temperatura e velocidade durante o aquecimento de líquidos em embalagens fechadas, com seus complexos perfis. Compararam os modelos gerados com resultados obtidos experimentalmente por Brandon, Pelton e Staack (1982), comprovando a validade dos mesmos.

Datta e Teixeira (1988, 1987) realizaram simulações através da modelagem de tratamentos térmicos (esterilização, com temperatura do meio de 121°C) de alimentos líquidos enlatados (embalagem metálica). Empregaram como geometria

um cilindro metálico vertical, considerando aquecimento de todos os lados e enchimento total da lata (sem *headspace*). Água foi utilizada como modelo de fluido Newtoniano de baixa viscosidade, sendo observado o perfil transiente de temperatura e de velocidade durante o aquecimento convectivo de fluidos enlatados. Observou-se pela primeira vez a característica transiente da RAML (assim chamado por delimitar uma região, e não apenas um ponto como no caso de aquecimento condutivo) e a forma toroidal predominante do mesmo quando considerado aquecimento por todas as extremidades da lata. Não observaram tendência na localização da RAML em função do tempo de processo. O formato toroidal ocorre devido a formação de corrente secundária (*Convecção de Bernard* ou *Células de Bernard*) em decorrência do aquecimento através da base do cilindro, que compete com a corrente primária decorrente do aquecimento através das paredes do mesmo. Essas correntes apresentam características aleatórias, principalmente no início do processo, tornando os perfis de temperatura e velocidade não uniformes. Ao longo do processo, diversas *Células de Bernard* são formadas e desaparecem, também de forma aleatória. A RAML se situou a cerca de 15% da altura do cilindro.

Kumar, Bhattacharya e Blaylock (1990) avaliaram o aquecimento convectivo de um alimento líquido consistente em latas através de simulação numérica de um tratamento térmico (esterilização, com temperatura do meio de 121°C), comparando com um modelo apenas de condução. Embora inicialmente tenham adotado modelo de fluido Não-Newtoniano (pseudoplástico), consideraram que a taxa de deformação decorrente das correntes de convecção é baixa, eliminando esse termo de dependência no modelo (considerando assim fluido Newtoniano). A lata foi considerada um cilindro metálico vertical com tampa e base adiabáticas. Tais considerações forem realizadas, segundo os autores, devido à presença de *headspace* (topo) e devido ao ineficiente contato da base com o vapor em autoclaves comerciais. Observaram que, ao contrário de trabalhos anteriores (DATTA, TEIXEIRA, 1988 e DATTA, TEIXEIRA, 1987), o RAML é formado por uma pequena região (“ponto”) no centro da base do cilindro, sendo essa diferença explicada pelo isolamento da base e conseqüente não formação de correntes de convecção secundárias. Observam que caso sejam realizados tratamento

térmicos dimensionados para uma RAML com localização errônea, como a um terço da altura (usualmente considerado para alimentos convectivos) ou metade da mesma (no caso de alimentos condutivos), pode-se observar grandes diferenças entre a letalidade calculada e real, resultando em processo ineficiente. Observou-se que no começo do aquecimento a troca térmica no fluido ocorre por condução, até a existência de gradiente de temperatura que resulte em correntes convectivas.

Kumar e Bhattacharya (1991) estudaram o tratamento térmico (esterilização, com temperatura do meio de 121°C) de um fluido Não-Newtoniano (pseudoplástico) acondicionado em latas (cilindro metálico vertical) através de simulações por CFD. Ao contrário de trabalho anterior (KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990), considerou-se o efeito da taxa de deformação no modelo pseudoplástico e aquecimento em todos os lados (lateral, topo e base do cilindro). Observaram os perfis de temperatura e velocidade, a movimentação da RAML e de pontos simulando partículas dentro da lata. Ao contrário de trabalhos realizados com água (DATTA, TEIXEIRA, 1988 e 1987), não se observou a formação de correntes secundárias, e ao contrário do trabalho com topo e base adiabáticos (KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990), observou-se que a RAML não se assemelha a um ponto e sim a uma região na forma de um cilindro curto situada a cerca de 10-12% da altura da lata. Concluem que a consistência do fluido influencia a formação das correntes secundárias. Observações semelhantes foram posteriormente realizadas por Varma e Kannan (2006).

Ghani et al. (1999a) estudaram o aquecimento (tratamento térmico de esterilização; vapor a 121°C) de alimentos fluidos acondicionado em latas (cilindro metálico vertical) através de simulações por CFD. Utilizaram dois fluidos modelos, água e suspensão de carboxi-metil-celulose (CMC). Embora inicialmente tenham adotado modelo pseudoplástico para a solução de CMC, após calcularem as taxas de deformação envolvidas, consideraram o fluido independente destas, ou seja, com comportamento Newtoniano. Assim como observado por Datta e Teixeira (1987 e 1988), e ao contrário do observado por Kumar e Bhattacharya (1991), observou-se a formação de correntes secundárias para ambos os fluidos estudados, citando também a natureza aleatória das *Células de Bernard*. A RAML

apresentou forma toroidal para a solução de CMC e de cilindro curto para água. Em ambos os casos, a RAML após certo período, apresentou localização a cerca de 10-15% da altura. Concluem que as correntes secundárias são sempre esperadas em tratamentos onde o fundo da lata não esteja isolado termicamente, e que possuem grande importância no deslocamento da RAML do centro para as bordas da lata.

Ghani et al. (1999b) avaliaram a inativação microbiológica de latas com alimentos convectivos (suspensão de CMC) submetidas a esterilização (vapor a 121°C) através de CFD, em um complemento de estudo anterior (GHANI et al., 1999a). A influência da difusão das células bacterianas através do líquido segundo a teoria do *Movimento Browniano* foi avaliada. Os autores utilizaram o modelo de *Arrhenius* para descrever a inativação bacteriana e concluíram que a influência da movimentação bacteriana por difusão em sua inativação é desprezível, e que sua inativação é função não somente do perfil de temperatura, mas também do perfil de velocidade do fluido.

Ghani, Farid e Chen (2002a) realizaram trabalho semelhante a anterior (GHANI et al., 1999a), porém considerando a lata em posição horizontal. Ao contrário da transferência de calor em cilindros verticais, os cilindros horizontais não possuem simetria axial, impossibilitando a simplificação para duas dimensões (2D) de modo que esse problema deve ser resolvido para três dimensões (3D). As velocidades verticais do fluido (sopa de laranja e cenoura com viscosidade dependente da temperatura e comportamento Newtoniano) são menores do que no cilindro vertical, embora o comportamento geral seja semelhante. Conseqüentemente, a transferência de calor é menos influenciada pela convecção. A RAML se aproxima de um elipsóide, com volume de cerca de 17% do total (após 3.000s), valor superior aos 10% calculado para o cilindro vertical. Concluem que o aquecimento é mais rápido no cilindro vertical (2D). Tal resultado foi posteriormente questionado por Varma e Kannan (2005), e foi concluído apenas com base na história térmica da RAML.

Ghani et al. (2001b) continuaram o trabalho de Ghani et al. (1999b), realizando simulações por CFD da esterilização de líquido viscoso (suco de cereja concentrado a 74° Brix, adotando-se modelo Newtoniano) e seus efeitos nas

concentrações de bactérias (esporos de *Clostridium botulinum*) e vitaminas (tiamina, riboflavina e ácido ascórbico). Assim como esperado, observaram que a inativação microbiana foi superior a de vitaminas, devido ao alto valor do tempo de redução decimal (D_T) das vitaminas quando comparadas aos dos esporos bacterianos.

Ghani et al. (2001a) estudaram a esterilização (temperatura do meio de 121°C) de alimentos líquidos embalados em bolsas autoclaváveis (*retortable pouches*) através de modelagem por CFD. Utilizaram sopa de laranja e cenoura e aproximação de fluido Newtoniano devido às pequenas taxas de deformações envolvidas. Observaram que a RAML também apresenta comportamento transiente para esse tipo de embalagem. Essa região é forçada para a base da bolsa, se estabelecendo em cerca de 30-40% de sua altura.

Ghani, Farid e Chen (2002b, 2002c) continuaram trabalho anterior com esterilização (vapor a 121°C) em bolsas autoclaváveis (GHANI et al., 2001a), avaliando inativação microbiana e destruição de nutrientes. Ghani, Farid e Chen (2002b) estudaram a inativação de *Bacillus stearothermophilus* em esterilização de sopa de carne e vegetais através de CFD, sendo realizados experimentos microbiológicos para validação do modelo gerado. Consideraram a difusão bacteriana desprezível, utilizando os resultados de Ghani et al. (1999b), e modelo Newtoniano. Segundo os autores, os valores calculados de inativação microbiana (γ) foram próximos dos experimentais, embora as diferenças observadas estejam entre 18 e 39%.

Ghani, Farid e Chen (2002c) estudaram a destruição de ácido ascórbico (vitamina C) durante esterilização de sopa de laranja e cenoura (considerados fluidos Newtonianos) através de CFD. Compararam os valores calculados com obtidos experimentalmente. Concluíram que o perfil de concentração de ácido ascórbico é função não somente do perfil de temperatura do fluido, mas também do de velocidade dentro da embalagem. Observaram que as regiões com maior concentração dessa vitamina são aquelas onde as velocidades do líquido são menores. Os resultados de destruição de ácido ascórbico obtidos experimentalmente e através de simulação por CFD apresentaram desvio médio menor que 5%.

Ghani (2006) estudou as etapas de aquecimento e resfriamento na esterilização de alimentos líquidos embalados em bolsas autoclaváveis através de CFD. Observaram o perfil de movimentação da RAML e RRML (região de resfriamento mais lento, após período de aquecimento), sendo o aquecimento realizado com vapor (temperatura do meio de 121°C) e o resfriamento com água a 20°C (modelos). Utilizaram sopa de laranja e cenoura, considerada fluido Newtoniano com viscosidade dependente da temperatura. Observaram que durante o resfriamento das embalagens, a aproximação constantemente utilizada de que o interior da embalagem possui a mesma temperatura do meio externo (utilizada para latas ou bolsas autoclaváveis aquecidas por vapor condensando) não pode ser utilizada. Nesse caso utilizaram um coeficiente convectivo de transferência de calor (h_{externo}), obtido através de dados da literatura e cálculos com o *Número de Nusselt*. Concluíram que o comportamento do resfriamento é diferente do aquecimento, embora ambos sejam influenciados pelas correntes de convecção geradas, e que a RRML se desenvolve primeiramente no centro da embalagem, se movimentando até cerca de 60-70% da altura da mesma (espessura, tendo em vista que a embalagem é processada na horizontal) e fundo da mesma (região mais espessa).

Varma e Kannan (2006) estudaram o tratamento térmico (esterilização com vapor a 121°C) de simulante de alimento líquido consistente (solução de CMC, considerando modelo pseudoplástico com viscosidade aparente função de temperatura) em três diferentes embalagens. Avaliaram um cilindro, um cone e um cone invertido, todos considerados metálicos, com mesma altura e volume e aquecidos por todos os lados. Os resultados obtidos para o cilindro foram comparados com os de Kumar e Bhattacharya (1991), apresentando grande semelhança. Inicialmente a RAML para o cilindro e cone se localizava no centro da geometria, migrando radialmente para as bordas e axialmente para baixo até adquirir a forma de um cilindro curto a cerca de 10% da altura. No cone invertido, entretanto, não se observou movimentação radial. Para as três geometrias, não se observou correntes de convecção secundárias. Para o fluido testado, o cone apresentou melhor desempenho, seguido do cilindro e cone invertido, comparando-se o tempo de aquecimento da RAML. O tempo necessário para a

RAML chegar a 120°C foi 15% e 23% menor para o cone do que para o cilindro e cone invertido, respectivamente. Indicam que o cone invertido não é uma configuração recomendada para tratamentos térmicos. Concluem que não só a geometria, mas também a orientação da embalagem influencia o tratamento térmico de alimentos líquidos embalados. Entretanto, realizaram comparações apenas pela observação da história térmica do produto. Observa-se também que o trabalho considera cones e cilindros de mesmo volume e altura, o que resulta em relação área/volume diferentes.

Varma e Kannan (2005) estudaram o efeito de alterações em embalagens metálicas na esterilização de simulante de alimento líquido consistente (solução de CMC, considerando modelo pseudoplástico com viscosidade aparente função de temperatura) através de CFD. Foram avaliadas latas com formato de cilindro a cone (isto é, também cones truncados com inclinações intermediárias de paredes), com mesma altura e volume, em diferentes ângulos de orientação (0-180°), comparando-as através de seu tempo de esterilização, definido como o tempo necessário para que a RAML chegue a 100°C. Entre todas as geometrias e orientações, o cone vertical se mostrou o mais eficiente, isto é, com menor tempo de esterilização. O tempo de esterilização para o cone foi 17% menor do que para o cilindro. O cilindro horizontal apresentou tempo de esterilização cerca de 10% menor do que o vertical, divergindo do trabalho de Ghani et al. (2002a). Observa-se que o tempo de esterilização foi obtido apenas considerando-se o tempo necessário para que um ponto do produto atingisse determinada temperatura, não se avaliando o valor de F_m , responsável pela determinação do final do processo. Os autores explicam que tal diferença deve-se ao fato do modelo reológico utilizado nos dois trabalhos. Embora ambos os fluidos (sopa de laranja e cenoura e solução de CMC) possuam propriedades termofísicas semelhantes, Ghani, Farid e Chen (2002a) utilizaram modelo Newtoniano com viscosidade dependente da temperatura através de um polinômio de segunda ordem, enquanto Varma e Kannan (2005) utilizaram modelo pseudoplástico com viscosidade dependente da temperatura através de um modelo de *Arrhenius*. Observaram que para todas as geometrias, a RAML inicialmente se encontra no centro geométrico e se move ao longo do tratamento térmico. A RAML se movimenta radialmente e então axialmente para baixo, até cerca de 10% da altura, onde se mantém por longo

período. Movimenta-se então em direção a sua posição inicial. O tempo de esterilização se mostrou função de duas grandezas delimitadas pela RAML, sendo proporcional ao volume de fluido sobre a região e inversamente proporcional a área da superfície sobre a mesma. Concluem que mesmo uma pequena inclinação na orientação da embalagem pode aumentar significativamente o seu tempo de esterilização.

Ghani e Farid (2006) utilizaram a CFD para simulação do aquecimento de rodelas de abacaxi em calda (suco de abacaxi e açúcar) *appertizadas* (temperatura do meio de 121°C). Consideraram dois modelos para as rodelas de abacaxi e duas configurações para seu posicionamento na lata. Consideraram modelo de sólidos não porosos, isto é, aquecidos apenas por condução, e de sólidos porosos, isto é, aquecidos por condução e convecção. Testaram uma configuração com as rodelas flutuando na calda (deixando, portanto, um espaço entre as mesmas e o fundo da lata) e outra com o contato entre rodelas e fundo da lata. Observaram que, devido a convecção natural da calda, a RAML se move pelo interior das rodelas ao longo do tempo. Observaram também que a configuração com espaço entre as rodelas e o fundo da lata resulta em aquecimento mais rápido, com sua RAML chegando a 105°C após 2.000s, em comparação aos 93°C da configuração onde as rodelas encostam no fundo da lata. Concluem que os resultados obtidos com os dois modelos (poroso e não poroso) são muito próximos.

Farid e Ghani (2004), Chen, Huang e Ghani (2005) e Kannan e Sandaka (2008) estudaram formas de correlacionar medidas de temperatura dentro de latas (especialmente a RAML) durante o processo de esterilização por equações empíricas, através de diferentes metodologias, e utilizando dados obtidos por CFD. Embora algumas correlações tenham sido obtidas com sucesso, segundo Chen, Huang e Ghani (2005) a utilização dessas metodologias ainda não é totalmente segura, necessitando de maiores testes e avaliações.

2.4. Aquecimento de Alimentos Líquidos

Embora sofram um aquecimento condutivo nos instantes iniciais, a convecção é a forma de troca térmica predominante em alimentos líquidos (GHANI, 2006; VARMA, KANNAN, 2006; GHANI, FARID, CHEN, 2002b; GHANI, FARID, CHEN, 2002c; GHANI et al., 2001a; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCKI, 1990; ZECHMAN, PFLUG, 1989; BRANDON, PELTON e STAACK, 1982).

Durante o aquecimento de alimentos líquidos embalados, as porções próximas da região aquecida (fronteira do sistema) recebem calor da mesma e se aquecem, dilatando-se e conseqüentemente reduzindo sua densidade. A diferença de densidade entre porções do fluido resulta em forças de empuxo, e fluxo das porções menos densas, formando uma região ascendente no contorno da fronteira do sistema. O fluxo de líquido quente é então redirecionado pela parede superior (topo, limite da geometria) que passa a fluir radialmente em direção ao centro (no caso de um cilindro, como uma lata). Na região central o líquido com menor temperatura e maior densidade flui no sentido da aceleração gravitacional, formando assim correntes de recirculação devido a convecção natural (CHEN, HUANG, GHANI, 2005; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; ZECHMAN, PFLUG, 1989; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1988).

Datta e Teixeira (1987) observam que o fluxo devido a diferença de densidade cria atrito viscoso com camadas adjacentes, que seguem o mesmo, gerando assim camadas ascendentes e descendentes, com gradiente de velocidade. Segundo Kumar, Bhattacharya e Blaylockl (1990) e Datta e Teixeira (1988 e 1987), para que a continuidade seja atendida as velocidades do fluxo ascendente devem ser maiores, visto que este é confinado a uma pequena região em comparação com o descendente. Essa região corresponde a cerca de 5-10% do raio de um cilindro para esterilização (DATTA e TEIXEIRA, 1988; DATTA e TEIXEIRA, 1987) ou pasteurização em garrafas (PELTON e STAACK, 1982) de água, cerca de 30-40% para fluidos consistentes (VARMA, KANNAN, 2006; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCKL, 1990), em processos de esterilização.

Durante o aquecimento, a força de empuxo é contraposta por forças viscosas. A velocidade das correntes convectivas é função tanto da força de empuxo como da magnitude da resistência ao escoamento dado pela viscosidade do líquido, de forma que a viscosidade afeta significativamente a magnitude do vetor velocidade. A viscosidade, e conseqüentemente as forças viscosas, são inversamente proporcionais a temperatura. Como a temperatura varia com o tempo de processo, a viscosidade do fluido diminui durante o tratamento térmico, e o movimento do líquido continua enquanto a força de empuxo conseguir se sobrepor às viscosas (KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCKL, 1990; ZECHMAN, PFLUG, 1989).

Ghani et al. (2001a) ressaltam que a variação da viscosidade em relação a temperatura é muito grande quando comparada com as outras propriedades físicas utilizadas, como densidade, calor específico, condutividade térmica e coeficiente volumétrico de expansão, geralmente considerados constantes. Ghani et al. (1999a) observam que o aquecimento convectivo de fluidos é muito mais rápido quando se considera a viscosidade como função da temperatura, consideração nem sempre utilizada em trabalhos anteriores, como os de Datta e Teixeira (1988) e Datta e Teixeira (1987).

Por essa razão, é de extrema importância a correta consideração do modelo reológico do fluido nas simulações de CFD. Varma e Kannan (2005) e Ghani et al. (2002a) chegaram a resultados opostos na comparação da eficiência do aquecimento de latas com diferentes orientações (vertical ou horizontal), segundo Varma e Kannan (2005) a diferença de modelo reológico assumido: Varma e Kannan (2005) adotaram modelo pseudoplástico para o fluido estudado, enquanto Ghani et al. (2002a) adotaram Newtoniano.

Ao contrário do aquecimento condutivo, a localização da RAML durante o tratamento térmico é transiente (AUGUSTO, PINHEIRO, CRISTIANINI, 2008; AUGUSTO, CRISTIANINI, 2008; KANNAN, SANDAKA, 2008; CHEN, 2006; GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; VARMA, KANNAN, 2006; VARMA, KANNAN, 2005; CHEN, HUANG, GANI, 2005; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI, FARID, CHEN, 2002b; GHANI, FARID, CHEN, 2002c; GHANI et al., 2001a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR,

BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCKL, 1990; ZECHMAN, PFLUG, 1989; DATTA, TEIXEIRA, 1988 e DATTA, TEIXEIRA, 1987).

Ao se considerar que o aquecimento é realizado apenas na área lateral da embalagem, isto é, possuindo base e topo adiabáticos, a RAML se aproxima de um ponto no centro da base, se diferenciando do fenômeno de condução, que se situa na metade da altura da embalagem (KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCKL, 1990; ENGELMAN, SANI, 1983).

Quando o aquecimento também é realizado pelo fundo da embalagem, ou pelo fundo e topo, observa-se instabilidade decorrente do contato do líquido frio com o fundo aquecido por condução. Essa instabilidade resulta na formação de células convectivas ou correntes secundárias de recirculação, denominadas *Convecção de Bernard* (DATTA, TEIXEIRA, 1988). Tal fenômeno é difícil de ser observado experimentalmente, ficando claro apenas após análise numérica (DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987). Observa-se que esse fenômeno resulta em fluxo de fluido e de *Células de Bernard* com características aleatórias, principalmente no início do processo (GHANI et al., 1999a; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987; BRANDON, et al., 1984; BRANDON, PELTON, STAACK, 1982).

Esse fenômeno resulta no deslocamento da RAML do centro para as bordas da embalagem, em uma forma toroidal ou de cilindro curto, situada a cerca de 10-15% da altura da lata, como observado por Ghani et al., 2001b; Ghani et al. (1999a); Ghani et al. (1999b), Zechman e Pflug, 1989, Datta e Teixeira (1988), Datta e Teixeira (1987) para cilindros verticais. Em cilindros horizontais, Ghani, Farid e Chen (2002a) observaram que a presença de correntes secundárias resultou na formação da RAML como um elipsóide próximo ao centro da lata, a cerca de 20-25% da altura da geometria (diâmetro do cilindro). Segundo Ghani et al. (1999a), esse comportamento é esperado em aquecimentos onde o fundo da embalagem não é adiabático, independentemente da consistência do fluido (observaram para água e suspensão de CMC com alta consistência - considerada fluido Newtoniano). Ghani e Farid (2006) observaram tal comportamento na simulação do aquecimento de rodelas de abacaxi em calda (suco de abacaxi e açúcar) em latas. No entanto, alguns autores não observam a formação de

Convecção de Bernard (VARMA, KANNAN, 2006; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991).

Observa-se, portanto, que RAML durante tratamento térmico de alimentos líquidos embalados, ao contrário da localização tradicionalmente considerada à um terço da altura da embalagem (33%) (BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990), na verdade se encontra entre 5 e 25% da altura da embalagem (diversos resultados obtidos através de análises por CFD, como acima apresentados e explicados por Chen, Huang e Ghani (2005); ou experimentais, como em Zechman e Pflug (1989) e Brandon, Pelton e Staack (1982)). Dessa forma, a localização da RAML em alimentos convectivos deve ser determinada para cada caso (TEIXEIRA, 2006) (alimento, embalagem, processo). Tais determinações podem ser realizadas através de CFD.

Conforme o aquecimento é realizado, o gradiente de temperatura é reduzido, diminuindo as forças de empuxo responsáveis pela movimentação do líquido e a magnitude da velocidade (VARMA, KANNAN, 2006; GHANI, FARID, CHEN, 2002c; GHANI et al., 2001a). Conseqüentemente, a troca térmica por condução ganha importância no fim do aquecimento (VARMA, KANNAN, 2006), podendo, inclusive, deslocar a RAML novamente para próximo do centro geométrico do produto (CHEN, HUANG, GHANI, 2005; ZECHMAN, PFLUG, 1989).

2.5. Alterações na geometria de embalagens: conseqüências no tratamento térmico

Segundo Brandon et al. (1984), as características do fluxo de líquido dentro da embalagem durante aquecimento são função da geometria da embalagem, onde mesmo pequenas alterações podem resultar em diferenças no processo. Segundo Varma e Kannan (2006 e 2005) pouca atenção tem sido depositada sobre modificações no tratamento térmico de alimentos líquidos através de alterações na geometria de suas embalagens. Entretanto, Brody (2002) apresenta grande variedade de tamanho e formas de latas disponíveis no mercado

atualmente. Maior variação pode ser prevista para outros tipos de embalagens não metálicas, como garrafas e recipientes em geral de vidro ou plásticos.

Varma e Kannan (2005) observam que a utilização de dados provenientes de latas cilíndricas para dimensionamento de tratamentos térmicos em embalagens que tenham alterações com objetivos estéticos podem não ser adequadas, mesmo se o volume das embalagens for o mesmo. Segundo Ghani *et al.* (2001a), os resultados obtidos para latas não podem ser extrapolados para *pouches*, visto a complexidade da diferença de geometria, indicando a necessidade de avaliação de cada geometria.

Estudos de alterações na geometria de embalagens para tratamento térmico de alimentos condutivos apontam que tal processo é mais simples, e, portanto, mais previsível. Pornchaloempong, Balaban e Teixeira (2003a e 2003b) estudaram o tratamento térmico de alimentos condutivos embalados com geometrias cônicas através de simulação matemática. Akterian e Fikiin (1994) realizaram simulações numéricas de esterilização de quatro embalagens comerciais (latas e vidros) com alimentos condutivos (solução modelo de bentonita). Teixeira, Zinsmeister e Zahradnik (1975) avaliaram latas cilíndricas com diversas proporções entre diâmetro e altura através de simulação computacional, concluindo que variações na geometria da embalagem são efetivas para retenção de tiamina no tratamento térmico. Observaram que as geometrias de cilindro curto e longo apresentaram maior retenção dessa vitamina. Augusto, Santana e Cristianini (2008) observaram diferenças de até 10% nos valores de esterilização (F) de latas comerciais de diferentes geometrias em processo de esterilização.

No caso de alimentos condutivos, alterações na geometria da embalagem podem resultar em melhora na troca térmica devido a dois fatores: redução do comprimento característico, isto é, distância da superfície ao ponto frio; e aumento da proporção área/volume. No caso de alimentos líquidos, no entanto, a complexidade das correntes convectivas não permitem apenas a análise desses fatores.

Nos trabalhos de Varma e Kannan (2006 e 2005), confirma-se o fato de que simples modificações geométricas nas embalagens podem tornar o tratamento

térmico de alimentos líquidos embalados mais eficientes sem agitação ou rotação, que requerem maior gasto energético.

Sabendo que a alteração do desenho (geometria) de uma embalagem pode resultar em diversas mudanças no tratamento térmico de um alimento nela contida, observa-se a grande importância do estudo dessas conseqüências para a segurança e qualidade do produto final. Observa-se também que a realização de alterações com objetivos estéticos em embalagens utilizadas em tratamentos térmicos de alimentos deveriam ter suas conseqüências previamente determinadas, e que através de alterações específicas pode-se melhorar tal processo. Tais avaliações são muito difíceis de serem realizadas experimentalmente. Entretanto, podem ser realizadas através de modelagem matemática utilizando-se CFD.

2.6. Determinação de parâmetros e condições de contorno em simulações por fluidodinâmica computacional (CFD)

A resolução das equações diferenciais que descrevem a CFD requer condições iniciais e de contorno apropriadas para o domínio específico, o que torna a solução única (KUMAR, DILMER, 2007). A exatidão dos resultados obtidos através de modelagens matemáticas, como a CFD, é função dos dados utilizados, especialmente propriedades físicas dos materiais testados (SCOTT, RICHARDSON, 1997).

Durante o tratamento térmico de alimentos embalados, a dilatação térmica do produto pode resultar em estufamento da embalagem. A presença de um *headspace*, isto é, espaço de “vácuo” na parte superior da embalagem evita tal estufamento. No processamento, o enchimento é realizado deixando-se um espaço vazio na embalagem (tradicionalmente cerca de 10% da altura de uma lata cilíndrica ou pelo menos 6mm). Realiza-se então exaustão desse espaço, seguindo-se com o fechamento da embalagem. A presença de ar (oxigênio) possibilitaria o desenvolvimento de microrganismos aeróbios e oxidação do alimentos.

Grande parte dos trabalhos envolvendo modelagem de transferência de calor em alimentos embalados não considera a presença do *headspace* (KANNAN, SANDAKA, 2008; GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; PLAZL, LAKNER, KOLOINI, 2006; VARMA, KANNAN, 2006; VARMA, KANNAN, 2005; FARID, Ghani, 2004; PORNCHALOEMPONG, BALABAN, TEIXEIRA, 2003a; PORNCHALOEMPONG, BALABAN, TEIXEIRA, 2003b; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI, FARID, CHEN, 2002b; GHANI, FARID, CHEN, 2002c; GHANI et al., 2001a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999b; HANZANA et al., 1998; DATTA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987), o que segundo Mohamed (2007) pode resultar em sub ou sobre processamento, ambos indesejáveis ao consumidor.

A presença do *headspace* pode ser considerada de duas formas, no modelamento matemático do processo. Alguns autores consideram essa região da embalagem adiabática (PLAZL, LAKNER, KOLOINI 2006; WANG, SAKAI, HANZAWA, 2000; GHANI et al., 1999a; AKTERIAN, FIKII, 1994; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; ENGELMAN, SANI, 1983), enquanto outros utilizam estimativas de coeficiente convectivo de transferência de calor dessa região (MOHAMED, 2007; PINHO, CRISTIANINI, 2006; PINHO, CRISTIANINI, 2005; PINHO, 2003; VARGA, OLIVEIRA, OLIVEIRA, 2000). A escolha de uma consideração deve ser feita observando-se o sistema de aquecimento (fluido de aquecimento, contato com a embalagem) e contribuição dessa região para a taxa de aquecimento do produto.

Segundo Plazl, Lakner e Koloini (2006), a troca térmica por convecção devido ao ar residual do *headspace* é desprezível em relação a troca térmica por condução na pasteurização de derivados de tomate em vidros. Segundo Hanzana et al. (1998), a resistência térmica do *headspace* na esterilização de atum em óleo em latas é desprezível em relação a camada superior de óleo, para geometrias onde a razão da altura sobre a largura seja maior que 0,16.

Mohamed (2007) determinou o coeficiente convectivo de transferência de calor de três níveis de *headspace* (10%, 14% e 20%, v/v) em latas durante aquecimento em imersão em água a 80°C. Os valores medidos para o coeficiente convectivo de transferência de calor foram: 54,2W/m²°C (10%), 53,2W/m²°C (14%) e 50,8W/m²°C (20%). Observou que o aumento do *headspace* resultou em

pequena redução do coeficiente convectivo de transferência de calor, mas que tal variabilidade é pequena o suficiente para permitir a consideração do valor médio de $52,73 \pm 1,75 \text{ W/m}^2\text{°C}$. Concluiu que os valores obtidos são próximos dos esperados para a presença de vapor de água puro. Pinho e Cristianini (2005) e Pinho (2003) utilizaram tal consideração na modelagem de esterilização de alimento infantil em embalagens de vidro.

Segundo Scott e Richardson (1997), a definição das condições de contorno é essencial para a correta definição das condições de fluxo dentro do sistema.

São encontradas na literatura três metodologias de se definir tais condições de contorno para o aquecimento de alimentos embalados:

- consideração de temperatura da superfície externa do alimento ($T_{\text{extremidade_fluido}}$; interna à embalagem) igual a do meio de aquecimento (T_{∞}); considera-se assim desprezível a resistência térmica da parede da embalagem e h infinito (determinada no presente trabalho como M3);
- utilização de fluxo de calor obtido através da temperatura do meio (T_{∞}) e determinação de coeficiente convectivo médio de transferência de calor (h) entre o meio de aquecimento e a embalagem (determinada no presente trabalho como M1); e
- consideração temperatura na superfície externa do alimento ($T_{\text{extremidade_fluido}}$; interna à embalagem) igual ao perfil térmico previamente determinado no interior da embalagem ($T_{\text{perfil_térmico}}$; $T=T(x,y,z,t)$) (determinada no presente trabalho como M4).

Segundo Varga e Oliveira (2000), a maioria dos modelos de aquecimento de alimentos embalados negligencia tanto a resistência térmica das paredes da embalagem como o coeficiente de troca térmica entre o meio de aquecimento e a parede externa da embalagem.

Segundo Kumar e Bhattacharya (1991), o aquecimento convectivo de alimentos líquidos é um processo complexo que requer condições de contorno tempo-dependentes, devido a resistência térmica ao fluxo de calor do material de embalagem. Entretanto, assim como Ghani et al. (1999a), observam que no caso

de esterilização com vapor em condensação de alimentos enlatados, pode-se considerar que as condições de contorno se aplicam ao interior da embalagem. Tal consideração é constantemente utilizada, como nos trabalhos de Kannan e Sandaka (2008), Ghani (2006), Ghani e Farid (2006), Varma e Kannan (2006), Varma e Kannan (2005), Farid e Ghani (2004), Ghani, Farid e Chen, (2002a), Ghani, Farid e Chen, (2002b), Ghani, Farid e Chen, (2002c), Ghani et al. (2001a), Ghani et al. (2001b), Ghani et al. (1999a), Ghani et al. (1999b), Hanzana et al. (1998), Datta (1991); Kumar e Bhattacharya (1991), Kumar, Battacharya e Blaylock (1990), Datta e Teixeira (1988), Datta e Teixeira (1987), para latas e bolsas autoclaváveis.

No caso de tratamento térmico com meio de aquecimento diferente de vapor em condensação e/ou embalagens não metálicas, tal consideração não pode ser aplicada (PORNCHALOEMPONG, BALABAN, TEIXEIRA, 2003b), especialmente em alimentos convectivos (KANNAN e SANDAKA, 2008). Tal fato fica evidenciado nos trabalhos de Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008), Brandon et al. (1984) e Engelman e Sani (1983), com água aquecida e garrafas de vidro (pasteurização), Pinho e Cristianini (2006), Pinho e Cristianini (2005) e Pinho (2003), com água sob pressão e recipientes de vidro (esterilização de alimento condutivo), Santana (2007), Cristianini e Massaguer (2002) e Cristianini (1998), com água sob pressão (esterilização) e bolsas autoclaváveis e Ghani (2006) simulando o resfriamento com água de bolsas autoclaváveis recém esterilizadas. Akterian e Fikiin (1994) observaram erros consideráveis na simulação de esterilização (vapor em condensação) de alimentos condutivos em embalagens de vidro ao se ignorar a resistência térmica do material de embalagem. Entretanto, Plazl, Lakner e Koloini (2006) utilizam essa aproximação para simulação de pasteurização (água a 90°C) de derivado de tomate em vidros através de túnel com aspersores e Wang, Sakai e Hanzawa (2000) para tratamento térmico de mistura de alimento líquido com fibras (água e pequenos pedaços de cenoura) em latas submetido a imersão em água a 95°C.

Embora encontra-se na literatura diferentes formas de determinação de condições de contorno para simulações de tratamento térmico por CFD, não existem trabalhos realizando comparações entre as eficiências de cada uma. Por

essa razão, determinou-se no presente trabalho a metodologia mais indicada para simulação do tratamento térmico de alimentos embalados.

2.7. Referências

AKTERIAN, S. G.; FIKIIN, K.. Numerical simulation of unsteady heat conduction in arbitrary shaped canned foods during sterilization processes. **Journal of Food Engineering**, v. 21, p. 343-54, 1994.

AUGUSTO, P. E. D.; CRISTIANINI, M. Avaliação de erros na determinação de histórias térmicas de produtos processados termicamente com registradores internos de temperatura. In...VII Brazilian Meeting on Chemistry of Food and Beverages (BMCFB). **Anais...**, 2008 (aceito para publicação na edição especial 2009 do **Brazilian Journal of Food Technology**).

AUGUSTO, P. E. D.; PINHEIRO, T. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de fluidodinâmica computacional (CFD) na avaliação do efeito da geometria e orientação de garrafas no tratamento térmico de bebidas. In...VII Brazilian Meeting on Chemistry of Food and Beverages (BMCFB). **Anais...**, 2008.

AUGUSTO, P. E. D.; SANTANA, F. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de modelagem matemática para avaliação dos efeitos da temperatura de processo e das propriedades térmicas na esterilização de alimentos. **Brazilian Journal of Food Technology**, v.11, n.2, p.159-168, 2008.

BRANDON, H.; PELTON, P.; STAACK, G. State-of-the-art methodology for evaluation of pasteurizer heating and cooling processes. **MBAA Technical Quaterly**, v.19, n.1, p.34-40, 1982.

BRANDON, H.; HULING, J.; STAACK, G. Computer simulation of pasteurizer performance. **MBAA Technical Quaterly**, v.20, n.1, p.39-46, 1983.

BRANDON, H.; GARDNER, R.; HULING, J.; STAACK, G. Time-dependent modeling of in-package pasteurization. **MBAA Technical Quaterly**, v.21, n.4, p.153-159, 1984.

BRODY, A.. Food canning in the 21st century. **Food Technology**, v. 56, n. 3, p. 75-8 , 2002.

CHEN, X. D.; HUANG, H. J.; GHANI, A. G. A. Thermal sterilization of liquid foods in a sealed container – developing simple correlations to account for natural convection. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n.1,article 5, 2005.

CHEN, X. D. Modeling thermal processing using computational fluid dynamics (CFD). *In...* SUN, D. W.. **Thermal food processing: new technologies and quality issues**. Boca Raton: CRC Press, 2006.

CRISTIANINI, M. **Estudo da distribuição de temperaturas durante o processo de esterilização de atum (*Katsuwonus pelamis*) em bolsa flexível**. Tese (Doutorado em Ciência de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 1998.

CRISTIANINI, M.; MASSAGUER, P. R. Thermal process evaluation of retortable pouches filled with conduction heated food. **Journal of Food Process Engineering**, v.25, p.395-405, 2002.

DATTA, A. K.. Mathematical modeling of biochemical changes during processing of liquid foods and solutions. **Biotechnology Progress**, v. 7, p. 397-402, 1991.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerical modeling of natural convection heating in canned liquid foods. **Transactions of the ASAE**, v. 30, n. 5, p. 1542-51, 1987.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerically predicted transient temperature and velocity profiles during natural convection heating of canned liquid foods. **Journal of Food Science**, v. 53, n. 1, p. 191-5, 1988.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Combined CFD and experimental approach for determination of the surface heat transfer coefficient during thermal processing of eggs. **Journal of Food Science**, v. 68, n. 3, p. 943-51, 2003.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis of combined conductive and convective heat transfer in model eggs. **Journal of Food Engineering**, v. 63, p. 281-90, 2004.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis for process impact assessment during thermal pasteurization of intact eggs. **Journal of Food Protection**, v. 68, n.2, p. 366-374, 2005.

ENGELMAN, M. S.; SANI, R. L.. Finite-element simulation of an in-package pasteurization process. **Numerical Heat Transfer**, v. 6, p. 41-54, 1983.

FARID, M.; GHANI, A. G. A. A new computational technique for the estimation of sterilization time in canned food. **Chemical Engineering and Processing**, v.43, n.4, p.523-531, 2004.

FRANCHI, M. A.. **Avaliação da utilização de bioprotetores para o controle de contaminações microbiológicas do processo sucro-alcooleiro**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 2002.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of natural convection heating of canned food by computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 41, p. 55-64, 1999a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. An investigation of deactivation of bacteria in a canned liquid food during sterilization using computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Food Engineering**, v. 42, p. 207-14, 1999b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Thermal sterilization of canned food in a 3-D pouch using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 48, p. 147-56, 2001a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of biochemical changes in a viscous liquid canned food during sterilization using computational fluid dynamics. **Food Australia**, v. 53, n. 1-2, p. 48-53, 2001b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Numerical simulation of transient temperature and velocity profiles in a horizontal can during sterilization using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 77-83, 2002a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal inactivation of *Bacillus stearothermophilus* in food pouches. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 221-8, 2002b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal destruction of vitamin C in food pouches. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 129-43, 2002c.

GHANI, A. G. A.. A computer simulation of heating and cooling liquid food during sterilization process using computational fluid dynamics. **Association for Computing Machinery New Zealand Bulletin**, v. 2, n. 3. Disponível em <http://www.acm.org/chapters/acm_nz/bulletin/vol2/issue3/articles/v2i3id01.pdf>, acesso em 19/01/2007, 2006.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.. Using the computational fluid dynamics to analyze the thermal sterilization of solid-liquid food mixture in cans. **Innovative Food Science & Emerging Technologies**, v. 7, p. 55-61, 2006.

HANZANA, T.; WANG, Q. H.; SUZUKI, M.; SAKAI, N.. Numerical analysis of slowest heating or cooling point in a canned food in oil. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 31, n. 3, p. 451-5, 1998.

HORN, C. S.; FRANKE, M.; BLAKEMORE, B.; STANNEK, W. Modeling and simulation of pasteurization and staling effects during tunnel pasteurization of bottled beer. **Food and Bioproducts Processing**, v.75, n.1, p.23-33, 1997.

JACZYNSKI, J.; PARK, J. W.. Temperature prediction during thermal processing of surimi seafood. **Journal of Food Science**, v. 67, n. 8, p. 3053-7, 2002.

KANNAN, A.; SANDAKA P. C. G. Heat transfer analysis of canned food sterilization in a still retort. **Journal of Food Engineering**, v. 88, n.2, p.213-228; 2008.

KRISHNAMURTHY, K.; JUN, S.; IRUDAYARAJ, J.; DEMIRCI, A. Efficacy of infrared heat treatment for inactivation of *Staphylococcus aureus* in milk. **Journal of Food Process Engineering**, v.31, n.6, p.798-816, 2008.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.; BLAYLOCK, J.. Numerical simulation of natural convection heating of canned thick viscous liquid food products. **Journal of Food Science**, v. 55, n. 5, p. 1403-1411, 1420, 1990.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.. Transient temperature and velocity profiles in a canned non-Newtonian liquid food during sterilization in a still-cook retort. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 34, n. 4/5, p. 1083-96, 1991.

KUMAR, A.; DILBER, I. Fluid flow and its modeling using computational fluid dynamics. In... SABLANI, S. S.; DATTA, A. K.; SHAFIURRAHMAN, M. (Ed.) **Handbook of food bioprocess modeling techniques**. Boca Raton: CRC Press, 2007.

LUND, D. B. Design of thermal processes for maximizing nutrient retention. **Food Technology**, v.31, n.2, p.71-78, 1977.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: LTC, 1995.

MARTINS, R. C. Simple finite volumes and finite elements procedures for food quality and safety simulations. **Journal of Food Engineering**, v.73, n.4, p.327-338, 2006.

MOHAMED, I. O.. Determination of an effective heat transfer coefficients for can headspace during thermal sterilization process. **Journal of Food Engineering**, v. 79, p. 1166-71, 2007.

NICOLAÏ, B. M.; VERBOVEN, P.; SCHEERLINCK, N. Modelling and simulation of thermal processes. *In...* RICHARDSON, P. **Thermal technologies in food processing**. Boca Raton: CRC Press, 2001.

NORTON, T.; SUN, D. W.. Computational fluid dynamics (CFD) – an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: a review. **Trends in Food Science and Technology**, v. 17, p. 600-20, 2006.

PFLUG, I. J. **Selected papers on the microbiology and engineering of sterilization processes**. Minneapolis: Environmental Sterilization Laboratory, 5th ed., 1988.

PINHO, C.. **Modelamento matemático do processo de esterilização de alimentos condutivos em embalagens de vidro**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Disponível em <<http://libdigi.unicamp.br/document/?code=vtls000317685>>, acesso em 29/01/2007, 2003.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M.. Three-Dimensional Mathematical Modeling of Microbiological Destruction of *Bacillus stearothermophilus* in conductive baby food packed in glass container. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n. 2, p. 1-8, 2005.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M.. Método de otimização para determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor em alimentos esterilizados em embalagem de vidro. **Brazilian Journal of Food Technology**, v. 9, n. 3, p. 157-63, 2006.

PLAZL, I.; LAKNER, M.; KOLOINI, T.. Modeling of temperature distributions in canned tomato based dip during industrial pasteurization. **Journal of Food Engineering**, v. 75, p. 400-6, 2006.

PORNCHALOEMPONG, P.; BALABAN, M. O.; TEIXEIRA, A. A.; CHAU, K. V.. Numerical simulation of conduction heating in conically shaped bodies. **Journal of Food Process Engineering**, v. 25, p. 539-55, 2003a.

PORNCHALOEMPONG, P.; BALABAN, M. O.; TEIXEIRA, A. A.; CHAU, K. V.. Optimization of quality retention in conduction-heating foods of conical shape. **Journal of Food Process Engineering**, v. 25, p. 557-70, 2003b.

RAMASWAMY, H.; MARCOTTE, M. Thermal processing. *In...* RAMASWAMY, H.; MARCOTTE, M. **Food processing: principles and applications**. Boca Raton: CRC Press, 2006.

SANTANA, F. F. **Modelamento Matemático de Alimentos com Particulados pelo Método dos Elementos Finitos**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 2007.

SCOTT, G.; RICHARDSON, P.. The application of computational fluid dynamics in the food industry. **Trends in Food Science and Technology**, v. 8, n. April, p. 119-24, 1997.

STUMBO, C. R.. **Thermobacteriology in food processing**. San Diego: Academic Press, 2nd ed., 1973.

TEIXEIRA, A. A. Simulating thermal food processes using deterministic models. *In...* SUN, D. W.. **Thermal food processing: new technologies and quality issues**. Boca Raton: CRC Press, 2006.

TEIXEIRA, A. A.; ZINSMEISTER, G. E.; ZAHRADNIK, J. W. Computer simulation of variable retort control and container geometry as a possible means of improving thiamine retention in thermally processed foods. **Journal of Food Science**, v.40, p. 656-659, 1975.

VARGA, S.; OLIVEIRA, J. C.. Determination of the heat transfer coefficient between bulk medium and packed containers in a batch retort. **Journal of Food Engineering**, v. 44, p. 191-8, 2000.

VARGA, S.; OLIVEIRA, J. C.; OLIVEIRA, F. A. R. Influence of the variability of processing factors on the F-value distribution in batch retorts. **Journal of Food Engineering**, v.44, n.3, p.155-161, 2000.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. Enhanced food sterilization through inclination of the container walls and geometry modifications. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 3753-62, 2005.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. CFD studies on natural convective heating of canned food in conical and cylindrical containers. **Journal of Food Engineering**, v. 77, p. 1024-23, 2006.

VERBOVEN, P.; BAERDEMAEKER, J. D.; NICOLAÏ, B. M.. Using computational fluid dynamics to optimize thermal processes. *In...* RICHARDSON, P.. **Improving the thermal processing of foods**. Boca Raton: CRC Press, 2004.

VERBOVEN, P.; NICOLAÏ, B. M.; SCHEERLINCK, N.; BAERDEMAEKER, J. D.. The local surface heat transfer coefficient in thermal food process calculations: a CFD approach. **Journal of Food Engineering**, v. 33, n. 1, p. 15-35, 1997.

WANG, Q. Z.; SAKAI, N.; HANZAWA, T.. Numerical analysis of heat transfer of canned liquid foods containing fibers or particles during sterilization. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 33, n.5, p. 703-8, 2000.

XIA, B.; SUN, D. W.. Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: a review. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 5-24, 2002.

ZECHMAN, L. G.; PFLUG, I. J. Location of the slowest heating zone for natural-convection-heating fluids in metal containers. **Journal of Food Science**, v.54, n.1, p.205-209, 226, 1989.

Capítulo 3: Determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor (h) para o aquecimento e resfriamento de garrafas em imersão em água

Resumo

O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados na conservação de alimentos, sendo o processamento dentro da embalagem um dos mais seguros. A utilização de modelamento matemático da transferência de calor na avaliação de tratamentos térmicos vem se mostrando uma poderosa ferramenta na garantia da segurança sem comprometimento da qualidade nutricional e sensorial dos alimentos. A determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor (h) para o sistema estudado é essencial para definição das condições de contorno das simulações e, conseqüentemente, do fluxo de calor para o produto. O presente trabalho determinou-se os valores de h para um sistema de aquecimento e um de resfriamento em imersão em água de duas garrafas comerciais (G1 e G2), através de um problema inverso de transferência de calor (*inverse heat transfer problem*), utilizando-se modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD). Embora com capacidades iguais, as diferenças nas geometrias das garrafas resultaram em valores distintos de h_{global} , de $2.150 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, para o aquecimento de G1, e $1.450 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G2, e $1.125 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, para o resfriamento de G1, e $675 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G2. Os resultados reforçam a necessidade de avaliação dessa propriedade para o exato processo estudado, assim como da influência da geometria de embalagens no processo térmicos de alimentos.

Palavras-chave:

Convecção, coeficiente convectivo de transferência de calor (h), *inverse heat transfer problem*, pasteurização, tratamento térmico

Abstract

Thermal process, in special in-package process, is one of the safest and most frequently used methods for food preservation. The use of mathematical models of the heat transfer have been widely used as a powerful tool in safety and high-quality food process design. The convective heat transfer coefficient (h) is essential for the heat flux calculation in model's boundary conditions, and its determination must be done by the actual heat transfer system. The present work has determined the h values for two commercial bottles (G1 e G2) in two water immersion systems, one for heating and one for cooling. It was calculated by an inverse heat transfer problem, using computational fluid dynamics (CFD). The h heating values were $2150 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ for G1 and $1450 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ for G2, and the h cooling values were $1125 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ for G1 and $675 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ for G2. The results show that even small differences between packages can result in distinct coefficient and that it must be measured for the exact heat transfer system.

Keywords:

Convection, convection heat transfer coefficient (h), inverse heat transfer problem, pasteurization, thermal process.

3.1. Introdução

O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados para a conservação de alimentos (GHANI et al., 2001a), sendo que a *appertização* ainda é o método de conservação mais efetivo, mesmo comparando-se com os recentes avanços de outras técnicas (FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 1999a).

O dimensionamento do tratamento térmico deve levar em consideração as características de transferência de calor do meio de aquecimento para o produto e através do produto. Deve considerar propriedades químicas, físicas e microbiológicas inerentes ao alimento, características de sua embalagem e do equipamento/meio de aquecimento e resfriamento, balanceado de modo a garantir a segurança no consumo com menores alterações sensoriais, nutricionais e menor custo (AUGUSTO, SANTANA, CRISTIANINI, 2008). A otimização da transferência de calor durante o tratamento térmico de determinado alimento pode resultar em melhores características sensoriais e nutricionais e menores custos de processo (principalmente de energia) mantendo-se a mesma segurança de consumo. Tais características promovem a escolha do produto pelo consumidor.

Entretanto, a otimização do processo é dificultada por limitações experimentais. A utilização de modelamento matemático da transferência de calor na avaliação desses processos vem se mostrando uma poderosa ferramenta na garantia da segurança sem comprometimento da qualidade nutricional e sensorial dos alimentos (MARTINS, 2006; PORNCHALOEMPONG et al., 2003; PINHO, CRISTIANINI, 2005). Permite a minimização dos experimentos de tentativa e erro, utilizados no desenvolvimento e testes de tecnologias na indústria, representando grandes custos e treinamento de pessoal (MARTINS, 2006).

A definição das condições de contorno em modelagens matemáticas é essencial para a correta definição das condições de fluxo dentro do sistema (SCOTT, RICHARDSON, 1997). Para a correta determinação de perfis de temperatura durante simulação de tratamentos térmicos, o coeficiente convectivo de transferência de calor (h) entre o fluido de aquecimento e a embalagem deve ser determinado para o exato sistema estudado (JACZYNSKI, PARK, 2002).

A utilização de coeficientes convectivos médios de transferência de calor (h_{global}) como condição de contorno para a simulação de tratamentos térmicos, isto é, únicos para a embalagem, foi utilizada por Augusto et al. (2009), Augusto e Cristianini (2009), Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008), Augusto, Santana e Cristianini (2008), Santana (2007), Ghani (2006; apenas na etapa de resfriamento com água), Pinho e Cristianini (2006), Pinho e Cristianini (2005), Pinho (2003), Pornchaloempong et al. (2003), Cristianini e Massaguer (2002), Varga e Oliveira (2000), Cristianini (1998) e Akterian e Fikiin (1994).

Entretanto, trabalhos envolvendo transferência de calor com ar como meio de troca térmica, como no forneamento de embalagens retangulares (VERBOVEN et al., 1997), aquecimento de produto cilíndrico (OLSSON et al., 2008) ou resfriamento de carcaças bovinas (WILLIX, HARRIS, CARSON, 2006) ou de cordeiros (HARRIS et al., 2004), observa-se a existência de variações no h ao longo dos produtos, ou seja, a existência de coeficientes convectivos locais de transferência de calor (h_{local}). Embora essa condição de contorno não seja utilizada em trabalhos de tratamentos térmicos de alimentos embalados, sua avaliação é proposta no presente trabalho. Uma vez que esse coeficiente é função não só das características do fluido, mas também da superfície do corpo em contato com esse (rugosidade, forma), é de se esperar que as garrafas possuam valores diferentes de h ao longo de seu comprimento, devido a irregularidade de seu formato e perfil das correntes do fluido de aquecimento.

O presente trabalho teve por objetivo determinar o coeficiente convectivo de transferência de calor (h_{global}) para o aquecimento e resfriamento de duas garrafas comerciais em um sistema de imersão em água, comparando-se duas metodologias.

3.2. Material e Métodos

3.2.1. Montagens experimentais

3.2.1.1. Termopares

A medição de temperaturas no interior das garrafas deve ser realizada com a menor interferência possível. Para tal, utilizou-se termopares tipo-T flexíveis AWG 30 (Omega Engineering, EUA), soldados, montados e calibrados no laboratório. Os termopares foram calibrados na faixa de 25°C a 95°C, utilizada no presente trabalho. Para a calibração, foi utilizado um banho-maria agitado (Polystat – Cole Parmer, EUA) com água cuja temperatura foi monitorada por um PT100 (RTD - Detector de temperatura por resistência) com curva de calibração conhecida (Ahlborn, Alemanha). Os termopares e o PT100 foram posicionados no banho apontados para um mesmo ponto, e conectados a um aquisitor de dados (ALMEMO 2890-9, Ahlborn, Alemanha), obtendo-se assim a curva de calibração de cada termopar (R^2 superior a 0,9999).

3.2.1.2. Embalagens

Utilizou-se duas garrafas comerciais de cerveja modelo *long neck*, denominadas G1 e G2 (Figura 3.1), com paredes de 2 mm de espessura. G1 possui 375 mL de volume, 219 mm de altura e corpo com 60 mm de diâmetro externo; G2 possui 370 mL, 225 mm de altura e corpo com 60 mm de diâmetro externo).

Figura 3.1. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2)

3.2.1.3. Posicionamento dos termopares nas embalagens

Para cada uma das garrafas, três termopares foram introduzidos por um pequeno orifício na tampa. Pelo mesmo furo foi introduzido um tubo oco de polietileno de baixa densidade (PEBD) reto e rígido, com 3 mm de diâmetro externo, utilizado como guia para sustentação dos termopares, sendo fixado no centro da base das garrafas através de um pequeno suporte colado ao vidro. Os fios foram passados internamente ao tubo-guia, até altura correspondente a que se desejava posicionar a junta de medição, mantidas próximas ao eixo (Figura 3.2). As juntas dos termopares tiveram suas posições determinadas (x, y e z), para posterior comparação dos dados experimentais e obtidos pelo modelo. Após preenchimento das garrafas com o produto a ser aquecido, estas foram recravadas e vedadas com silicone.

Figura 3.2. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2), com os três termopares (TP, marcados por “+” e “•”) dispostos próximos ao eixo, utilizados na determinação do $h_{\text{aquecimento}}$

3.2.1.4. Sistemas de aquecimento e resfriamento

O aquecimento das garrafas foi realizado em banho-maria agitado microprocessado (sistema PID, banho-maria ultratermostático 116/3, Fanem, Brasil) com volume nominal de 60 L, contendo três outras garrafas atuando como carga do equipamento. As garrafas foram posicionadas segundo a Figura 3.3, sobre um suporte formado por uma grade metálica, utilizada com objetivo de permitir a circulação de água por baixo das garrafas. As garrafas foram mantidas em banho-maria a 25°C até equilíbrio térmico, determinado quando a diferença de temperatura entre os quatro termopares era menor do que 0,3°C, e então introduzidas no banho-maria de processo a 90°C pelo período desejado. Tomou-se cuidado para que o posicionamento das garrafas dentro do banho-maria fosse sempre o mesmo para todas as cinco repetições.

Figura 3.3. Representação esquemática do sistema montado para aquecimento das garrafas

O resfriamento foi realizado de forma semelhante, em equipamento similar (banho-maria Unitemp, Fanem, Brasil), porém com volume nominal de 36L. As garrafas foram mantidas em banho-maria a 90°C até equilíbrio térmico, e então introduzidas no banho-maria de processo a 30°C pelo período desejado. Tomou-se cuidado para que o posicionamento das garrafas dentro do banho-maria fosse sempre o mesmo para as quatro repetições.

3.2.2. Determinação dos coeficientes convectivos global (h_{global}) e local (h_{local}) de transferência de calor para as duas garrafas

A determinação dos valores de h foi realizada por meio de um problema inverso de transferência de calor (*inverse heat transfer problem*), isto é, através da medição da história térmica interna de um determinado corpo e resolução das equações de transferência de calor (OLSSON et al., 2008; BECK, BLACKWELL, HAJI-SHEIKH, 1996). Utilizou-se metodologia semelhante a utilizada por Pinho e Cristianini (2006) e Denys, Pieters e Dewettinck (2003), através de um processo de otimização por modelagem matemática. O método consiste em estimar-se inicialmente um valor inicial para o h , utilizado então na simulação do aquecimento de um material com propriedades térmicas conhecidas. O perfil térmico de um ponto conhecido no interior do produto é obtido experimentalmente e na

simulação, sendo comparados. Após um acréscimo no valor de h, obtém-se novamente o perfil térmico e compara-se com os resultados experimentais. O processo é repetido até se obter desvio desejável entre os valores experimentais e do modelo.

Nessa metodologia, deve-se utilizar material com propriedades térmicas conhecidas para otimização do modelo. Da mesma forma que Denys, Pieters e Dewettinck (2003), utilizou-se água como material de propriedades conhecidas, devido a padronização, disponibilidade e pouca variabilidade nas propriedades térmicas. A determinação do h foi realizada através de duas metodologias.

Na primeira metodologia, utilizou-se agar 2% (m/m) para se evitar a formação de correntes de convecção (KUROZAWA et al., 2008; DENYS, PIETERS, DEWETTINCK, 2003), obtendo-se assim um produto condutivo. Como o valor do h entre um objeto e um fluido independe das propriedades físicas e forma de aquecimento do interior do objeto (DENYS, PIETERS, DEWETTINCK, 2003), a utilização de produto condutivo propicia modelamento matemático mais simples e rápido. Na segunda metodologia, realizou-se a determinação através da utilização de água pura, como produto convectivo.

Com objetivo de se certificar que a o gel de agar utilizado não apresentava formação de correntes de convecção devido a fusão durante o aquecimento, inseriu-se pequenas partículas sólidas no gel para melhor visualização. A observação dessas partículas permitiu a avaliação da não formação de correntes de convecção durante o processo. Além disso, a observação dos perfis térmicos nos testes de penetração de calor aponta característica de aquecimento uniforme e condutiva (Figuras 3.5 e 3.6) descartando a presença de correntes de convecção natural.

Utilizou-se as duas metodologias para cálculo do $h_{\text{aquecimento}}$, para as duas garrafas. Àquela mais apropriada foi utilizada na determinação do $h_{\text{resfriamento}}$.

3.2.2.1. Modelos matemáticos

As simulações foram realizadas através de análise de fluidodinâmica computacional (CFD), utilizando-se o programa Ansys CFX 11.0 (Ansys Inc., EUA), baseado na análise de volumes finitos (FVA) e resolução das *Equações de Transporte de Navier-Stokes*, que descrevem a conservação de massa, momento e energia e de equações de estado. Quando utilizado produto condutivo, resolveu-se apenas a *Equação de Fourier* (NICOLAI et al., 1998).

Os modelos tridimensionais foram obtidos a partir da geometria real das embalagens, obtidas por avaliação em papel milimetrado de suas seções longitudinais, como utilizado por Augusto et al. (2009), Augusto e Cristianini (2009), Augusto, Santana e Cristianini (2008), Santana (2007), Pinho e Cristianini (2005), e Cristianini e Massaguer (2002). Devido à simetria axial das embalagens, considerou-se apenas um quarto das mesmas na elaboração dos modelos, gerados à partir de revolução das áreas obtidas anteriormente.

Os modelos foram formados por três partes: produto (gel de agar ou água pura), embalagem (paredes de vidro) e tampa metálica. Utilizou-se as propriedades físicas da água descritas por Denys, Pieters e Dewettinck (2003) (k e C_p função da temperatura, ρ médio), Lide e Frederikse (1996) e Sengers e Watson (1986) (μ função da temperatura) e Chen, Huang e Ghani (2005) (β função da temperatura) (Tabela 3.1). Considerou-se as propriedades físicas do vidro (INCROPERA, DEWITT, 2003) e da tampa metálica (PINHO, CRISTIANINI, 2006 e 2005) médias na faixa de temperatura utilizada, como apresentado na Tabela 3.2.

Tabela 3.1. Propriedades físicas da água utilizadas nos modelos

Propriedade	Valor	Fonte
Densidade (ρ) ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	998,2	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Condutividade térmica (k) ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) *	$-0,7316528 + 0,007321898\cdot T - 9,492\cdot 10^{-6}\cdot T^2$	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Calor específico (Cp)($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) *	$3,991225\cdot 10^4 - 423,1844\cdot T + 1,879953\cdot T^2 - 0,00371639\cdot T^3 + 2,761713\cdot 10^{-6}\cdot T^4$	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Viscosidade (μ)($\text{Pa}\cdot\text{s}^{-1}$) *	$1,68\cdot 10^{-6}\cdot e^{15634,477/(R\cdot T)}$	Lide e Frederikse (1996) e Sengers e Watson (1986)
Coeficiente de dilatação térmica (β)(K^{-1}) **	$-4,16\cdot 10^{-8}\cdot T^2 + 1,129\cdot 10^{-5}\cdot T - 8,148\cdot 10^{-6}$	Chen, Huang e Ghani (2005)

* T em K; ** T em °C; R = constante universal dos gases ideais

Tabela 3.2. Propriedades físicas do vidro e tampa metálica utilizadas nos modelos

Material	Densidade (ρ) ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	Condutividade térmica (k) ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)	Calor específico (Cp)($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)	Fonte
Vidro	2.449	1,4	750	Incropera e DeWitt (2003)
Tampa metálica	2.702	237	903	Pinho e Cristianini (2006 e 2005)

A malha foi gerada com dimensão máxima dos elementos gerados de 2mm (VARMA, KANNAN, 2006). Nas simulações de produto convectivo, adotou-se refino nas bordas do fluido, região com maior gradiente de temperatura e

velocidade (KUMAR, DILBER, 2007), como utilizado por diversos autores (KANNAN, SANDAKA, 2008; GHANI, FARID, 2006; VARMA, KANAN, 2006; VARMA, KANAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 2002a; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR et al., 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987)(Figura 3.4). O refino seguiu expansão geométrica de fator 1,3 (VARMA, KANNAN, 2006; VARMA, KANNAN, 2005) e dimensão máxima de 1 mm. As malhas das garrafas G1 e G2 foram formadas por cerca de $1,5 \cdot 10^5$ elementos. A minimização do valor do raiz quadrada média do erro (*root mean square* – RMS) foi adotada como critério de convergência para as simulações, com valor máximo de 10^{-4} (VARMA, KANNAN, 2006).

Figura 3.4. Malhas dos modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas nas comparações entre metodologias; no detalhe pode-se observar o refino das extremidades do fluido

Como condição de contorno, considerou-se o fluxo de calor uniforme ao longo do perímetro das garrafas, com temperatura do meio de aquecimento obtida experimentalmente e diferentes valores de h, modificados até convergência dos dados experimentais e obtidos pelo modelo. As seguintes considerações e condições iniciais, freqüentemente utilizadas na literatura (KANNAN, SANDAKA, 2008; VARMA, KANNAN; 2006, GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; CHEN et al., 2005; VARMA, KANNAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; DENYS et al., 2004; GHANI et al., 2002a; GHANI et al., 2002b; GHANI et al., 2002c; GHANI et al., 2001a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR et al., 1990) foram utilizadas na simulação do produto convectivo:

- Temperatura inicial uniforme (25°C ou 90°C);
- Velocidades das correntes de convecção do fluido nos eixos x, y e z nulas em t=0;
- Velocidades das correntes de convecção do fluido nulas nas paredes da embalagem (*no slip condition*);
- Dissipação viscosa e geração interna de energia são desprezíveis;
- A *Aproximação de Boussinesq* (relação entre a densidade do fluido e sua temperatura, Equação 2.24) é válida

Utilizou-se intervalo de tempo (*timestep*) de 10,0s para o aquecimento de produto condutivo, e 1,0s para o convectivo.

3.2.2.2. Determinação do $h_{\text{aquecimento}}$

Os testes de penetração de calor foram realizados utilizando-se gel de agar 2% (m/m, Merck, Alemanha, em água destilada e deionizada - Milli-Q[®]) (metodologia utilizando produto condutivo) ou água (metodologia utilizando produto convectivo), para G1 e G2, em cinco repetições. O agar foi pesado e lentamente dissolvido em água a 60°C, evitando-se incorporação de ar e autoclavado a 121°C / 20 min. As garrafas foram então completamente preenchidas com o agar ou água, recravadas e vedadas com silicone. As garrafas

foram mantidas em banho-maria a 25°C até equilíbrio térmico, sendo então colocadas no banho-maria a 90°C durante 2.000s (agar) ou 250s (água).

3.2.2.2.1. Método de determinação com produto condutivo

Utilizou-se metodologia de avaliação empregada em trabalhos de determinação de h utilizando produtos condutivos (PINHO, CRISTIANINI, 2006; DENYS, PIETERS, DEWETTINCK, 2003; XIE, SHEARD, 1996; LEBOWITZ, BHOWMIK, 1989).

Os perfis térmicos dos pontos correspondentes aos termopares foram obtidos no modelo e experimentalmente, sendo calculada a soma residual dos quadrados (SSR, Equação 3.01) entre os mesmos, como utilizado por Pinho e Cristianini (2006) e Denys, Pieters e Dewettinck (2003). Após um acréscimo no valor de h , obtém-se novamente o perfil térmico e a SSR. Esse processo é repetido até a obtenção da mínima SSR.

$$SSR = \sum (T_{\text{experimental}}^{x,y,z,t} - T_{\text{modelo}}^{x,y,z,t})^2 \quad \text{Equação 3.01}$$

Para cada valor de h testado, obteve-se um gráfico de $T_{\text{experimental}}$ *versus* T_{modelo} , obtendo-se uma regressão linear com intersecção na origem, como utilizado por Pinho e Cristianini (2006), Pinho e Cristianini (2005), Cristianini e Massaguer (2002), Xie e Sheard (1996) e Lebowitz e Bhowmik (1989). Comparou-se então os valores da inclinação da linearização (a_{em}), obtendo-se assim mais um parâmetro na determinação do valor de h . Caso os valores encontrados para cada um dos termopares apresentassem diferença, considerar-se-ia um h_{local} para cada região próxima do termopar.

3.2.2.2.2. Método de determinação com produto convectivo

No caso dos processos com água, o perfil térmico do ponto correspondente ao termopar foi obtido no modelo e experimentalmente, sendo calculado o valor de esterilização (F, Equação 3.02) correspondente, utilizando-se os valores de coeficiente térmico (z) e temperatura de referência (T_{ref}) de 6,94°C e 60°C, respectivamente, comuns para o processamento de cervejas (HORN et al., 1997), processo com características semelhantes ao aqui simulado. Essa abordagem permite a obtenção de valor de h que melhor descreve o processo na faixa de temperatura de maior interesse para o processo, isto é, de maior letalidade.

$$F = \int_{t_0}^{t_f} 10^{\frac{T(t)-T_{ref}}{z}} dt \quad (\text{Equação. 3.02})$$

3.3. Resultados e Discussões

3.3.1. Método de determinação do $h_{\text{aquecimento}}$ com produto condutivo

As Figuras 3.5 e 3.6 apresentam os perfis térmicos obtidos para os três termopares situados próximos ao eixo das duas garrafas testadas, preenchidas com agar 2% (m/m) e aquecidas em banho-maria a 90°C por 2.000 s. Observa-se a existência de perfil de aquecimento uniforme e condutivo. A Figura 3.7 apresenta um exemplo de curva de $T_{\text{experimental}}$ *versus* T_{modelo} obtida.

Figura 3.5. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por "+") em G1.
Média de cinco repetições

Figura 3.6. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por “+”) em G2.
Média de cinco repetições

Figura 3.7. Curva de $T_{\text{experimental}}$ versus T_{modelo} obtida (TP03 para G1)

A Figura 3.8 apresenta a soma residual dos quadrados (SSR) para os três termopares (TP) na determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor (h) em G1 e G2. Ao contrário do inicialmente esperado, a curva de SSR não apresentou um ponto de mínimo no processo de determinação do h , mesmo para altos valores desse coeficiente ($5.000 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, Figura 3.10.), apresentando comportamento tendendo a uma assíntota horizontal. Comportamento semelhante é apresentado pela curva obtida para os valores de inclinação das curvas $T_{\text{experimental}} \times T_{\text{modelo}} (a_{em})$.

Figura 3.8. Soma residual dos quadrados (SSR) para os três termopares (TP) na determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor em G1 e G2

Tal comportamento pode ser observado em aquecimento de produtos onde o efeito da resistência térmica interna é proporcionalmente maior do que a resistência térmica da interface fluido-sólido. Nesse caso, a taxa de aquecimento interna é crescente até determinado valor de h , à partir do qual se observa pouca alteração na taxa de aquecimento interna com o aumento desse coeficiente. Esse comportamento pode ser esperado, portanto, para aquecimentos com relativo alto

valor de h, como o apresentado no aquecimento das garrafas testadas em banho-maria agitado.

O comportamento citado é apresentado por Fasina e Fleming (2001) para o aquecimento de pepinos em banho-maria. Ao realizar simulações desse processo, os autores observaram que a variação do h entre 500 e 6.000 W.m⁻².K⁻¹ não resultou em alterações na curva de aquecimento de pepinos de diversos tamanhos.

A importância relativa do coeficiente convectivo de transferência de calor (h) pode ser medida através do *Número de Biot* (Bi, Equação 3.03)(SINGH, HELDMAN, 2009):

$$Bi = \frac{h \cdot L^*}{k} \quad (\text{Equação. 3.03})$$

Onde o L* representa o comprimento característico. Segundo Singh e Heldman (2009), valores de Bi acima de 40 indicam que a resistência térmica da superfície (interface fluido-sólido) é desprezível. Wang, Tang e Cavalieri (2001) citam o valor limite como 10. O valor de Bi para as garrafas testadas, considerando-se como comprimento característico o raio médio das mesmas é de cerca de 50 a 75 para os valores de h determinados no presente trabalho (descritos a seguir), confirmando a análise anterior descrita.

Dessa forma, para os valores de h aqui determinados, o método que utilizada agar como produto condutivo e minimização de SSR como critério de determinação não se mostrou adequado. Denys, Pieters e Dewettinck (2003) utilizaram essa metodologia com gel de agar, porém com valor de h de 490 W.m⁻².K⁻¹.

Para a determinação do h_{global}, utilizou-se a comparação dos dados experimentais e obtidos através do modelo para o aquecimento de água, focando-se na faixa compreendida entre 1.000 e 3.000 W.m⁻².K⁻¹ (inclinação a_{em} > 0,97).

Como não se observou diferentes comportamentos para os três termopares de cada uma das garrafas (Figura 3.8), considerou-se que a metodologia inicialmente proposta, que considera h_{locais}, não possui relevância, continuando-se assim com a determinação apenas do h_{global}.

3.3.2. Método de determinação do $h_{\text{aquecimento}}$ com produto convectivo

As Figuras 3.9 e 3.10. apresentam a comparação, para três valores de h_{global} , entre as histórias térmicas e valores de F para G1 e G2, respectivamente.

Através dos perfis térmicos obtidos, observa-se a pequena variação entre as curvas com diferentes valores de h . No entanto, pequena diferença de temperatura entre os modelos e o valor experimental é apresentada no início do aquecimento. Essa diferença pode ser atribuída às características aleatórias dos fluxos de fluido no início do aquecimento, como descrito por Ghani et al. (1999a), Datta e Teixeira (1988), Datta e Teixeira (1987), Brandon et al. (1984) e Brandon et al., (1982), assim como pela formação de *Células de Bernard*. O desvio entre os valores também pode ser causado devido a presença do termopar durante os experimentos, resultando em desvios nas correntes do fluido (GHANI, 2006; GHANI e FARID, 2006; VARMA e KANNAN, 2006; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI et al., 2001a; e KUMAR e BHATTACHARYA, 1991).

Figura 3.9. Comparação entre três valores de h para G1 (modelo x experimental) através da história térmica (esquerda) e valor de F (direita)

Figura 3.10. Comparação entre três valores de h para G2 (modelo x experimental) através da história térmica (esquerda) e valor de F (direita)

Observa-se, entretanto, que os desvios obtidos se relacionam a uma faixa de temperatura cuja letalidade é desprezível. Ao se comparar os modelos através das curvas de F , observa-se a grande correlação entre os valores obtidos pelos modelos e experimentais. A Figura 3.11 apresenta a comparação entre as razões dos valores de F obtidos por modelo, com quatro valores de h_{global} , e por experimentos ($F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$) para as duas garrafas. Valores próximos da unidade indicam modelos que descrevem de forma bastante satisfatória o aquecimento do produto na faixa de temperatura de maior representatividade para o tratamento térmico, isto é, de maior letalidade.

Figura 3.11. Comparação entre as razões dos valores de F obtidos por modelo e por experimentos para G1 e G2

Dessa forma, o valor de h para o aquecimento de cada uma das garrafas foi determinado como aquele que resulta em perfil térmico e de F mais próximos dos experimentais. Essa análise resultou em valor de h de $2.150 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, para o aquecimento de G1, e $1.450 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ para G2, com $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ de, respectivamente, 1,00 e 0,96. Adotou-se tal razão próxima da unidade ou com valor um pouco abaixo da mesma por representar um modelo conservador, acrescentando uma margem de segurança ao mesmo, evitando subprocessamento de processos baseados nos modelos em questão. Observa-se que mesmo pequenas diferenças na geometria das garrafas resulta em valor de h consideravelmente diferentes para as garrafas, reforçando a necessidade de avaliação dessa propriedade para cada processo real estudado.

Embora aparentemente alto, os valores encontrados são decorrentes da grande agitação do banho-maria utilizado. Singh e Heldman (2009) citam valores de h entre 50 e $10.000 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ na convecção forçada com água. Leung et al. (2007) determinaram valores de h em câmara para descongelamento de alimentos por circulação de água, citando valor de cerca de $1.600 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ para velocidades de circulação de 1,1 a 1,2mm/s. Valores de $1.000 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, $1.550 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ e de 1.500 a $2.500 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ são apresentados para o aquecimento em banho-maria de

cubos batata (PALAZOGLU, 2006), de carne (BURFOOT, SELF, 1988) e pepinos (FASINA, FLEMING, 2001), respectivamente enquanto valores de 1.700 a 2.000 $\text{W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$ são apresentados por Simpson et al. (2008), Garrote et al. (2006) e Garrote, Silva e Bertone (2003) para o h entre salmoura e ervilhas autoclavadas. Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008), em estudo preliminar, determinaram o valor de h para G1 no mesmo banho-maria, porém contendo apenas uma garrafa, chegando ao valor de 1.550 $\text{W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$.

3.3.3. Determinação do $h_{\text{resfriamento}}$

Devido aos resultados obtidos com as metodologias que utilizam produto condutivo ou convectivo para a determinação do h do sistema de aquecimento, utilizou-se a metodologia com produto convectivo (água) na determinação do h do sistema de resfriamento.

As Figuras 3.12 e 3.13 apresentam a minimização dos valores de SSR utilizados no processo iterativo de determinação do $h_{\text{resfriamento}}$ do sistema de resfriamento para as garrafas G1 e G2, respectivamente. São apresentados também a razão entre os valores de esterilização (F_p) obtidos pelos modelos e experimentais ($F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$), também utilizados na determinação do $h_{\text{resfriamento}}$. Valores de h com razão próxima da unidade representam modelos que descrevem satisfatoriamente o processo para a faixa de temperatura de maior interesse, isto é, de maior letalidade.

Dessa forma, o valor de h para o resfriamento de cada uma das garrafas foi determinado como aquele que resulta em perfil térmico e de F_p mais próximos dos experimentais, isto é, menor SSR e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ mais próximos da unidade. Essa análise resultou em valor de h de 1.125 $\text{W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$, para o resfriamento de G1, e 675 $\text{W.m}^{-2}\text{K}^{-1}$ para G2, com $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ de, respectivamente, 1,07 e 1,05. Ao contrário do aquecimento, valores de $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ um pouco acima da unidade representam modelo de resfriamento conservador.

Figura 3.12. Soma residual dos quadrados (SSR) e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ na determinação do h de resfriamento para G1

Figura 3.13. Soma residual dos quadrados (SSR) e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ na determinação do h de resfriamento para G2

Observa-se que os valores obtidos para o sistema de resfriamento são consideravelmente inferiores aos determinados para o sistema de aquecimento ($2.150 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ para G1 e $1.450 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ para G2), comprovando a necessidade da determinação do h para o exato sistema estudado. Observa-se

Determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor (h) para o aquecimento e resfriamento de garrafas em imersão em água

também que o valor obtido para G1 novamente se mostrou consideravelmente superior ao obtido para G2, demonstrando a importância da determinação do h para cada embalagem estudada. Mesmo pequenas alterações na geometria das garrafas aqui avaliadas resultam em modificações no padrão de escoamento externo de fluido (água de aquecimento ou resfriamento nos banhos-maria), resultando em valores distintos de h .

3.4. Conclusões

Avaliou-se os valores do coeficiente convectivo de transferência de calor (h) para o aquecimento e o resfriamento em imersão em água de duas garrafas comerciais, observando-se que esse coeficiente pode ser bastante diferente mesmo entre garrafas com geometrias semelhantes. A avaliação da metodologia que considera h_{locais} ao longo da altura das garrafas não se mostrou relevante. As diferenças nas geometrias das garrafas resultaram em valores de h_{global} , de $2.150 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, para o aquecimento de G1, e $1.450 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G2, e $1.125 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, para o resfriamento de G1, e $675 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G2, reforçando a necessidade de avaliação dessa propriedade para cada processo real estudado.

3.5. Referências

AKTERIAN, S. G.; FIKIIN, K.. Numerical simulation of unsteady heat conduction in arbitrary shaped canned foods during sterilization processes. **Journal of Food Engineering**, v. 21, p. 343-54, 1994.

AUGUSTO, P. E. D.; CRISTIANINI, M. Avaliação de erros na determinação de histórias térmicas de produtos processados termicamente com registradores internos de temperatura. **Brazilian Journal of Food Technology**, (aceito para publicação), 2009

AUGUSTO, P. E. D.; PINHEIRO, T. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de fluidodinâmica computacional (CFD) na avaliação do efeito da geometria e orientação de garrafas no tratamento térmico de bebidas. In...VII Brazilian Meeting on Chemistry of Food and Beverages (BMCFB). **Anais...**, 2008.

AUGUSTO, P. E. D.; PINHEIRO, T. F.; TRIBST, A. A. L.; CRISTIANINI, M. Evaluation of methodologies for mathematical modeling of packaged conductive foods heat process. **International Journal of Food Engineering**, (aceito para publicação), 2009

AUGUSTO, P. E. D.; SANTANA, F. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de modelagem matemática para avaliação dos efeitos da temperatura de processo e das propriedades térmicas na esterilização de alimentos. **Brazilian Journal of Food Technology**, v.11, n.2, p.159-168, 2008.

BECK, J. V.; BLACKWELL, B.; HAJI-SHEIKH, A. Comparison of some inverse heat conduction methods using experimental data. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.39, n.17, p.3649-3657, 1996.

BRANDON, H.; PELTON, P.; STAACK, G. State-of-the-art methodology for evaluation of pasteurizer heating and cooling processes. **MBAA Technical Quaterly**, v.19, n.1, p.34-40, 1982.

BRANDON, H.; GARDNER, R.; HULING, J.; STAACK, G. Time-dependent modeling of in-package pasteurization. **MBAA Technical Quaterly**, v.21, n.4, p.153-159, 1984.

BURFOOT, D.; SELF, K. P. Prediction of heating times for cubes of beef during water cooking. **International Journal of Food Science and Technology**, v.23, n.3, p.247-257, 1988.

CHEN, X. D.; HUANG, H. J.; GHANI, A. G. A. Thermal sterilization of liquid foods in a sealed container – developing simple correlations to account for natural convection. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n.1, article 5, 2005.

CRISTIANINI, M. **Estudo da distribuição de temperaturas durante o processo de esterilização de atum (*Katsuwonus pelamis*) em bolsa flexível**. Tese (Doutorado em Ciência de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 1998.

CRISTIANINI, M.; MASSAGUER, P. R. Thermal process evaluation of retortable pouches filled with conduction heated food. **Journal of Food Process Engineering**, v.25, p.395-405, 2002.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerical modeling of natural convection heating in canned liquid foods. **Transactions of the ASAE**, v. 30, n. 5, p. 1542-51, 1987.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerically predicted transient temperature and velocity profiles during natural convection heating of canned liquid foods. **Journal of Food Science**, v. 53, n. 1, p. 191-5, 1988.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Combined CFD and experimental approach for determination of the surface heat transfer coefficient during thermal processing of eggs. **Journal of Food Science**, v. 68, n. 3, p. 943-51, 2003.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis of combined conductive and convective heat transfer in model eggs. **Journal of Food Engineering**, v. 63, p. 281-90, 2004.

FARID, M.; GHANI, A. G. A. A new computational technique for the estimation of sterilization time in canned food. **Chemical Engineering and Processing**, v.43, n.4, p.523-531, 2004.

FASINA, O. O.; FLEMING, H. P. Heat transfer characteristics of cucumbers during blanching. **Journal of Food Engineering**, v.47, n.3, p.203-210, 2001.

GARROTE, R. L.; SILVA, E. R.; BERTONE, R. A. Kinetic parameters for thermal inactivation of cut green beans lipoxygenase using unsteady-state methods. **Latin American Applied Research**, v.33, n.2, p.87-90, 2003.

GARROTE, R. L.; SILVA, E. R.; ROA, R. D.; BERTONE, R. A. Heat transfer coefficients to canned green peas during end-over-end sterilization. **International Journal of Food Science and Technology**, v.41, n.9, p.1016-1022, 2006.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of natural convection heating of canned food by computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 41, p. 55-64, 1999a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. An investigation of deactivation of bacteria in a canned liquid food during sterilization using computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Food Engineering**, v. 42, p. 207-14, 1999b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Thermal sterilization of canned food in a 3-D pouch using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 48, p. 147-56, 2001a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of biochemical changes in a viscous liquid canned food during sterilization using computational fluid dynamics. **Food Australia**, v. 53, n. 1-2, p. 48-53, 2001b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Numerical simulation of transient temperature and velocity profiles in a horizontal can during sterilization using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 77-83, 2002a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal inactivation of *Bacillus stearothermophilus* in food pouches. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 221-8, 2002b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal destruction of vitamin C in food pouches. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 129-43, 2002c.

GHANI, A. G. A.. A computer simulation of heating and cooling liquid food during sterilization process using computational fluid dynamics. **Association for Computing Machinery New Zealand Bulletin**, v. 2, n. 3. Disponível em <http://www.acm.org/chapters/acm_nz/bulletin/vol2/issue3/articles/v2i3id01.pdf>, acesso em 19/01/2007, 2006.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.. Using the computational fluid dynamics to analyze the thermal sterilization of solid-liquid food mixture in cans. **Innovative Food Science & Emerging Technologies**, v. 7, p. 55-61, 2006.

HARRIS, M. B.; CARSON, J. K.; WILLIX, J.; LOVATT, S. J. Local surface heat transfer coefficients on a model lamb carcass. **Journal of Food Engineering**, v.61, n.3, p.421-429, 2004.

HORN, C. S.; FRANKE, M.; BLAKEMORE, B.; STANNEK, W. Modeling and simulation of pasteurization and staling effects during tunnel pasteurization of bottled beer. **Food and Bioproducts Processing**, v.75, n.1, p.23-33, 1997.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. Rio de Janeiro: LTC, 2003.

JACZYNSKI, J.; PARK, J. W.. Temperature prediction during thermal processing of surimi seafood. **Journal of Food Science**, v. 67, n. 8, p. 3053-7, 2002.

KANNAN, A.; SANDAKA P. C. G. Heat transfer analysis of canned food sterilization in a still retort. **Journal of Food Engineering**, v. 88, n.2, p.213-228; 2008.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.; BLAYLOCK, J.. Numerical simulation of natural convection heating of canned thick viscous liquid food products. **Journal of Food Science**, v. 55, n. 5, p. 1403-1411, 1420, 1990.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.. Transient temperature and velocity profiles in a canned non-Newtonian liquid food during sterilization in a still-cook retort. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 34, n. 4/5, p. 1083-96, 1991.

KUMAR, A.; DILBER, I. Fluid flow and its modeling using computational fluid dynamics. In... SABLANI, S. S.; DATTA, A. K.; SHAFIURRAHMAN, M. (Ed.) **Handbook of food bioprocess modeling techniques**. Boca Raton: CRC Press, 2007.

KUROZAWA, L. E., PARK, K. J.; HUBINGER, M. D.; MURR, F.E. X., AZOUBEL, P. M. Thermal conductivity and thermal diffusivity of papaya (*Carica papaya* L.) and cashew apple (*Anacardium occidentale* L.). **Brazilian Journal of Food Technology**, v. 11, n. 1, p. 78-85, 2008.

LEBOWITZ, S. F.; BHOWMIK, S. R. Determination of retortable pouch heat transfer coefficients by optimization method. **Journal of Food Science**, v.54, n.6, p.1407-1412, 1989.

LEUNG, M.; CHING, W. H.; LEUNG, D. Y. C.; LAM, G. C. K. Fluid dynamics and heat transfer in cold water thawing. **Journal of Food Engineering**, v.78, n.4, p.1221-1227, 2007.

LIDE, D. R.; FREDERIKSE, H. P. R. **CRC handbook of chemistry and physics**. Boca Raton: CRC Press, 76th ed., 1996.

MARTINS, R. C. Simple finite volumes and finite elements procedures for food quality and safety simulations. **Journal of Food Engineering**, v.73, n.4, p.327-338, 2006.

NICOLĂI, B. M.; VERBOVEN, P.; SCHEERLINCK, N.; BAERDEEMAERKER, J. De. Numerical analysis of the propagation of random parameter fluctuations in time and space during thermal food processes. **Journal of Food Engineering**, v.38, n.3, p.259-278, 1998.

OLSSON, E. E. M.; JANESTAD, H.; AHRNÉ, L. M.; TRÄGÅRDH, A. C.; SINGH, R. P. Determination of Local Heat-Transfer Coefficients Around a Circular Cylinder Under an Impinging Air Jet, **International Journal of Food Properties**, v.11, n.3, p.600-612, 2008.

PALAZOGLU, K. Influence of convective heat transfer coefficient on the heating rate of materials with different thermal diffusivities. **Journal of Food Engineering**, v.73, n.3, p.290-296, 2006.

PINHO, C.. **Modelamento matemático do processo de esterilização de alimentos condutivos em embalagens de vidro**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Disponível em <<http://libdigi.unicamp.br/document/?code=vtls000317685>>, acesso em 29/01/2007, 2003.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M.. Three-Dimensional Mathematical Modeling of Microbiological Destruction of *Bacillus stearothermophilus* in conductive baby food packed in glass container. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n. 2, p. 1-8, 2005.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M.. Método de otimização para determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor em alimentos esterilizados em embalagem de vidro. **Brazilian Journal of Food Technology**, v. 9, n. 3, p. 157-63, 2006.

PORNCHALOEMPONG, P.; BALABAN, M. O.; TEIXEIRA, A. A.; CHAU, K. V.. Numerical simulation of conduction heating in conically shaped bodies. **Journal of Food Process Engineering**, v. 25, p. 539-55, 2003.

SANTANA, F. F. **Modelamento Matemático de Alimentos com Particulados pelo Método dos Elementos Finitos**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 2007.

SCOTT, G.; RICHARDSON, P.. The application of computational fluid dynamics in the food industry. **Trends in Food Science and Technology**, v. 8, n. April, p. 119-24, 1997.

SENGERS, J. V.; WATSON, J. T. R. Improved international formulations for the viscosity and thermal conductivity of water substance. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, v.15, n.4, p.1291-1314, 1986.

SIMPSON, R.; ABAKAROV, A.; ALMONACID, S.; TEIXEIRA, A. Impact of overall and particle surface heat transfer coefficients on thermal process optimization in rotary retorts. **Journal of Food Science**, v.73, n.8, p.E383-E388, 2008.

SINGH, R. P.; HELDMAN, D. R. **Introduction to food engineering**. San Diego: Academic Press, 4thed., 2009.

VARGA, S.; OLIVEIRA, J. C.. Determination of the heat transfer coefficient between bulk medium and packed containers in a batch retort. **Journal of Food Engineering**, v. 44, p. 191-8, 2000.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. Enhanced food sterilization through inclination of the container walls and geometry modifications. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 3753-62, 2005.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. CFD studies on natural convective heating of canned food in conical and cylindrical containers. **Journal of Food Engineering**, v. 77, p. 1024-23, 2006.

VERBOVEN, P.; NICOLAÏ, B. M.; SCHEERLINCK, N.; BAERDEMAEKER, J. D.. The local surface heat transfer coefficient in thermal food process calculations: a CFD approach. **Journal of Food Engineering**, v. 33, n. 1, p. 15-35, 1997.

WANG, S.; TANG, J.; CAVALIERI, R. P. Modeling fruit internal heating rates for hot air and hot water treatments. **Postharvest Biology and Technology**, v. 22, n.3, p.257-270, 2001.

WILLIX, J.; HARRIS, M. B.; CARSON, J. K. Local surface heat transfer coefficients on a model beef side. **Journal of Food Engineering**, v.74, n.4, p.561-567, 2006.

XIE, G.; SHEARD, A. M. Comparison of two methods used to determine apparent heat transfer coefficient for pouches pasteurized in a combination oven. **LWT – Food Science and Technology**, v.29, n.1-2, p.100-105, 1996.

Capítulo 4: Avaliação de condições de contorno para simulações matemáticas por fluidodinâmica computacional (CFD) do tratamento térmico de alimentos líquidos em garrafas

Resumo

A crescente busca por alimentos mais seguros e de melhor qualidade nutricional e sensorial cria a necessidade de melhor entendimento dos processos envolvidos na produção dos mesmos. A fluidodinâmica computacional (CFD) vem sendo utilizada em diversos trabalhos para melhor entendimento de processos térmicos de alimentos líquidos, um dos métodos mais seguros e utilizados para a conservação de alimentos. No entanto, pouca homogeneidade é observada nas metodologias utilizadas para modelamento matemático desses processos, em especial na definição das condições de contorno. O presente trabalho avaliou quatro metodologias constantemente utilizadas em trabalhos de CFD, considerando-se o aquecimento de água em garrafas de vidro: (M1) consideração do perfil térmico da água de aquecimento (T_{∞}) e h medido, (M2) T_{∞} como condição de contorno do exterior da embalagem, (M3) T_{∞} como condição de contorno da extremidade do produto líquido aquecido, e (M4) perfil interno de temperatura ($T=T(x,y,z,t)$), medido na extremidade interna da embalagem, como condição de contorno da extremidade do produto. Os modelos que consideram valor medido de h e T_{∞} apresentaram boa concordância com os valores experimentais, comparados através de história térmica e perfil do valor de esterilização (F), mostrando-se apropriados como condição de contorno. Os demais modelos, baseados na história térmica da água de aquecimento ou do interior da embalagem, resultaram em aquecimento mais rápido do produto, não se mostrando apropriados por superestimarem o aquecimento do produto, comprometendo sua segurança e conservação.

Palavras-chave:

Coeficiente convectivo de transferência de calor (h), Condições de contorno, fluidodinâmica computacional (CFD), modelamento matemático, tratamento térmico

Abstract

The growing demand for safer and high-quality food products creates the need for better knowledge of the processes involved in food production. The computational fluid dynamics (CFD) have been widely used for better understand of food thermal process, one of the safest and most frequently used methods for food preservation. However, no consistency in the mathematical models built has been observed, specially on the boundary conditions definition. The present work has evaluated four methodologies for the boundary conditions definition of the heating of water in two commercial bottles, based on the previous CFD works: (M1) temperature profile of heating water (T_{∞}) and h , (M2) T_{∞} as boundary condition for the outside package wall, (M3) T_{∞} as boundary condition for the outside heated liquid edge, and (M4) internal temperature profile ($T=T(x,y,z,t)$), previously measured on the internal package wall, as boundary condition for the outside heated liquid edge. The models that considered the measured value of h e T_{∞} as boundary condition showed good agreement with experimental values, compared by thermal history and sterilization value (F). The models that considered the temperature profile of the heating water or of the internal package wall as boundary conditions, showed faster heating. By over-estimating the product heating rate, those models are not appropriated for the mathematical modelling of heat process, as it compromises the safety and preservation of food products.

Keywords:

Boundary conditions, computational fluid dynamics (CFD), convection heat transfer coefficient (h), mathematical modelling, thermal process.

4.1. Introdução

O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados para a conservação de alimentos (GHANI et al., 2001a), sendo que a *appertização* ainda é o método de conservação mais efetivo, mesmo comparando-se com os recentes avanços de outras técnicas (FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 1999a).

O dimensionamento do tratamento térmico deve levar em consideração as características de transferência de calor do meio de aquecimento para o produto e através do produto. Deve considerar propriedades químicas, físicas e microbiológicas inerentes ao alimento, características de sua embalagem e do equipamento/meio de aquecimento e resfriamento, balanceado de modo a garantir a segurança no consumo com menores alterações sensoriais, nutricionais e menor custo (AUGUSTO, SANTANA, CRISTIANINI, 2008). A otimização da transferência de calor durante o tratamento térmico de determinado alimento pode resultar em melhores características sensoriais e nutricionais e menores custos de processo (principalmente de energia) mantendo-se a mesma segurança de consumo. Tais características promovem a escolha do produto pelo consumidor.

Entretanto, a otimização do processo é dificultada por limitações experimentais. Diversos estudos apontam que, ao contrário de produtos condutivos, o aquecimento de fluidos não possui um ponto frio fixo, e sim uma região de aquecimento mais lento (RAML, ou SHZ de *slowest heating zone*) transiente. A medição experimental de temperaturas pode ser difícil em determinadas regiões da embalagem, como a RAML (GHANI, 2006), ou até mesmo errônea devido aos distúrbios no fluxo de líquido causados pela presença de termopares (GHANI, 2006; GHANI e FARID, 2006; VARMA e KANNAN, 2006; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI et al., 2001a; e KUMAR e BHATTACHARYA, 1991) ou sua condutividade térmica (DENYS; PIETERS; DEWETTINK, 2003). A medição experimental de inativação microbiana (GHANI, FARID, CHEN, 2002b) ou de nutrientes (GHANI, FARID, CHEN, 2002c) apresenta grande dificuldade, principalmente em pontos específicos da embalagem, com

conseqüente necessidade de determinação de concentrações médias da embalagem.

A utilização de modelamento matemático da transferência de calor na avaliação de tratamentos térmicos vem se mostrando uma poderosa ferramenta na garantia da segurança sem comprometimento da qualidade nutricional e sensorial dos alimentos (MARTINS, 2006; PORNCHALOEMPONG et al., 2003a; PINHO, CRISTIANINI, 2005). Permite a minimização dos experimentos de tentativa e erro, utilizados no desenvolvimento e testes de tecnologias na indústria, representando grandes custos e treinamento de pessoal (MARTINS, 2006). Entretanto, Kannan e Sandaka (2008) observam a necessidade de se conhecer melhor o fenômeno de transferência de calor associado aos tratamentos térmicos de alimentos líquidos para melhoria dos processos. Segundo Xia e Sun (2002), a utilização de modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD) na indústria de alimentos pode auxiliar esses desenvolvimentos.

A CFD é uma técnica numérica de resolução de equações que governam o escoamento de fluidos e transferência de calor em uma determinada geometria. Consiste na resolução numérica e simultânea das *Equações de Transporte de Navier-Stokes*, que descrevem a conservação de massa, quantidade de movimento e energia e de equações de estado (NORTON, SUN, 2006; SCOTT, RICHARDSON, 1997).

Diversos autores vem utilizando a CFD como ferramenta para avaliação de tratamentos térmicos de alimentos. A utilização da técnica permite o acompanhamento do tratamento térmico através de perfis de isothermas, de velocidade das correntes convectivas, localização do ponto frio ou RAML e transformações nos alimentos, como inativação e destruição de microrganismos, enzimas e nutrientes.

No entanto, encontra-se na literatura diferentes formas de determinação de condições de contorno para simulações de tratamento térmico por CFD, não havendo comparação entre as eficiências de cada uma. Segundo Jaczynski e Park (2002), para correta determinação de perfis de temperatura durante simulação de tratamentos térmicos, o coeficiente convectivo de transferência de calor entre o fluido de aquecimento e a embalagem deve ser determinado para o

exato sistema estudado. Segundo Scott e Richardson (1997), a definição das condições de contorno é essencial para a correta definição das condições de fluxo dentro do sistema. Kumar e Bhattacharya (1991) afirmam que o aquecimento convectivo de alimentos líquidos é um processo complexo, que requer condições de contorno tempo-dependentes, devido a resistência térmica ao fluxo de calor do material de embalagem.

São encontradas na literatura três metodologias de se definir tais condições de contorno para o aquecimento de alimentos embalados:

- consideração de temperatura da superfície externa do alimento ($T_{\text{extremidade_fluido}}$; interna à embalagem) igual a do meio de aquecimento (T_{∞}); considera-se assim desprezível a resistência térmica da parede da embalagem e o coeficiente convectivo médio de transferência de calor entre o meio de aquecimento e a embalagem (h_{externo}) infinito (M3);
- utilização de fluxo de calor obtido através da temperatura do meio (T_{∞}) e determinação de coeficiente convectivo médio de transferência de calor (h) entre o meio de aquecimento e a embalagem (M1);
- consideração temperatura na superfície externa do alimento ($T_{\text{extremidade_fluido}}$; interna à embalagem) igual ao perfil térmico previamente determinado no interior da embalagem ($T_{\text{perfil_térmico}}$; $T=T(x,y,z,t)$) (M4).

Além dessas, uma quarta metodologia, embora ainda não utilizado em trabalhos da literatura, pode ser obtido da derivação da M3. Nesse caso, considera-se a temperatura da superfície externa da embalagem ($T_{\text{extremidade_embalagem}}$; isto é, região da embalagem em contato com o meio de aquecimento) igual a do meio de aquecimento (T_{∞}) (M2).

Condição de contorno: $T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\infty}$ (Metodologia M3)

A metodologia que considera a temperatura do meio de aquecimento (ou resfriamento) como condição de contorno para a simulação de tratamentos térmicos é a mais utilizada na literatura. Nesse caso, considera-se que a

resistência térmica da embalagem e da interface fluido-embalagem são desprezíveis, ou seja, que a temperatura do meio de aquecimento, como condição de contorno, se aplica ao interior da embalagem.

Nicolai e Baerdemaeker (1996) observam que em processos onde o coeficiente convectivo de transferência de calor (h) é alto, como nos processos de esterilização com água ou vapor, a temperatura da superfície do produto é muito próxima da temperatura do meio. Devido a esse fato, Erdoğdu (2008) observa a consideração por muitos autores de h infinito, isto é, consideração do perfil de temperatura do meio de aquecimento. Segundo Ghani et al. (1999a) e Kumar e Bhattacharya (1991), esta consideração pode ser utilizada no caso de esterilização com vapor em condensação de alimentos enlatados, como nos trabalhos de Kannan e Sandaka (2008), Ghani (2006), Ghani e Farid (2006), Varma e Kannan (2006), Varma e Kannan (2005), Farid e Ghani (2004), Ghani, Farid e Chen, (2002a), Ghani, Farid e Chen, (2002b), Ghani, Farid e Chen, (2002c), Ghani et al. (2001a), Ghani et al. (2001b), Ghani et al. (1999a), Ghani et al. (1999b), Hanzana et al. (1998), Datta (1991); Kumar e Bhattacharya (1991), Kumar, Bhattacharya e Blaylock (1990), Datta e Teixeira (1988), Datta e Teixeira (1987).

No caso de tratamento térmico com meio de aquecimento diferente de vapor em condensação e/ou embalagens não metálicas, tal consideração não pode ser aplicada (PORNCHALOEMPONG, BALABAN, TEIXEIRA, 2003b), especialmente em alimentos convectivos (KANNAN e SANDAKA, 2008). Entretanto, Plazl, Lakner e Koloini (2006) utilizam essa aproximação para simulação de pasteurização (água a 90°C) de derivado de tomate em vidros através de túnel com aspersores, Wang, Sakai e Hanzawa (2000) para tratamento térmico de mistura de alimento líquido com fibras (água e pequenos pedaços de cenoura) em latas submetido a imersão em água a 95°C e Hanzawa et al. (1998) para imersão em banho de óleo de latas de atum com óleo.

Tais autores concluem que os modelos obtidos descrevem os valores experimentais, porém apenas através de avaliação de perfis térmicos. Entretanto, devido a relação exponencial da inativação microbiana com a temperatura, uma análise baseada apenas na história térmica do produto pode ser ineficiente, uma

vez que mesmo pequenos desvios ao longo do processo podem ser críticos para o valor de esterilização (F , Equação 4.01). No presente trabalho, reforça-se essa questão, analisando-se os modelos através não só de sua história térmica, mas também dos valores de esterilização.

$$F = \int_{t_0}^{t_f} 10^{\frac{T(t)-T_{ref}}{z}} dt \quad (\text{Equação. 4.01})$$

Condição de contorno: $T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\text{perfil_térmico}}$ (Metodologia M4)

A metodologia que considera o perfil de temperatura na interface fluido-embalagem, isto é, fronteira entre o produto líquido e a parede interna da embalagem, como condição de contorno para a simulação de tratamentos térmicos foi utilizada por Brandon et al. (1984) e Engelman e Sani (1983).

Condição de contorno: h e T_{∞} (Metodologia M1)

A metodologia que considera coeficientes convectivos médios de transferência de calor (h) como condição de contorno para a simulação de tratamentos térmicos foi utilizada por Augusto e Cristianini (2009), Augusto et al. (2009), Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008), Augusto, Santana e Cristianini (2008), Santana (2007), Ghani (2006; apenas na etapa de resfriamento com água), Denys, Pieters e Dewettinck (2005) (para ovos), Pinho e Cristianini (2005), Denys, Pieters e Dewettinck (2004) (para ovos), Pinho (2003), Pornchaloempong et al. (2003a), Cristianini e Massaguer (2002), Varga e Oliveira (2000), Cristianini (1998) e Akterian e Fikiin (1994). Nessa metodologia, o fluxo de calor trocado com o produto é calculado em cada instante do processo, à partir dos valores de h (em geral médios do processo) e perfil de temperatura do meio de troca térmica (T_{∞}).

O presente trabalho teve por objetivo avaliar quatro metodologias para estabelecimento das condições de contorno para simulação de tratamento térmico de alimentos embalados em garrafas por CFD, sendo elas:

- (1) utilização de coeficiente de convecção global (h_{global}) entre o fluido de aquecimento e a parede externa da embalagem, e perfil de temperatura do meio de aquecimento (T_{∞}): h e T_{∞} , metodologia M1;
- (2) consideração do perfil de temperatura da superfície externa da embalagem ($T_{\text{extremidade_embalagem}}$) igual a do meio de aquecimento (T_{∞}):
 $T_{\text{extremidade_embalagem}} = T_{\infty}$, metodologia M2;
- (3) consideração do perfil de temperatura da superfície externa do produto fluido ($T_{\text{extremidade_fluido}}$) igual a do meio de aquecimento (T_{∞}):
 $T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\infty}$, metodologia M3;
- (4) utilização de perfil de temperatura na fronteira entre o fluido e a parede interna da embalagem ($T=T(x,y,z,t)$): $T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\text{perfil_térmico}}$, metodologia M4.

4.2. Material e Métodos

4.2.1. Montagens experimentais

4.2.1.1. Termopares

A medição de temperaturas no interior das garrafas deve ser realizada com a menor interferência possível. Para tal, utilizou-se termopares tipo-T flexíveis AWG 30 (Omega Engineering, EUA), soldados, montados e calibrados no laboratório. Os termopares foram calibrados na faixa de 25°C a 95°C, utilizada no presente trabalho. Para a calibração, foi utilizado um banho-maria agitado (Polystat – Cole Parmer, EUA) com água cuja temperatura foi monitorada por um PT100 (RTD - Detector de temperatura por resistência) com curva de calibração conhecida (Ahlborn, Alemanha). Os termopares e o PT100 foram posicionados no banho apontados para um mesmo ponto, e conectados a um aquisitor de dados (ALMEMO 2890-9, Ahlborn, Alemanha), obtendo-se assim a curva de calibração de cada termopar (R^2 superior a 0,9999).

4.2.1.2. Embalagens

Utilizou-se duas garrafas comerciais de cerveja modelo *long neck*, denominadas G1 e G2 (Figura 4.1), com paredes de 2 mm de espessura. G1 possui 375 mL de volume, 219 mm de altura e corpo com 60 mm de diâmetro externo; G2 possui 370 mL, 225 mm de altura e corpo com 60 mm de diâmetro externo).

Figura 4.1. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2)

4.2.1.3. Posicionamento dos termopares nas embalagens

Para cada uma das garrafas, os termopares foram introduzidos por um pequeno orifício na tampa. Pelo mesmo furo foi introduzido um tubo oco de polietileno de baixa densidade (PEBD) reto e rígido, com 3 mm de diâmetro externo, utilizado como guia para sustentação dos termopares, sendo fixado no centro da base das garrafas através de um pequeno suporte colado ao vidro. Os fios foram passados internamente ao tubo-guia, até altura correspondente a que se desejava posicionar a junta de medição. As juntas dos termopares tiveram suas posições determinadas (x, y e z), para posterior comparação dos dados experimentais e obtidos pelo modelo. Após preenchimento das garrafas com o produto a ser aquecido, estas foram recravadas e vedadas com silicone.

Para os experimentos de determinação de perfil térmico na extremidade do líquido, manteve-se as juntas de três termopares em contato com o vidro, como utilizado por Varga e Oliveira (2000) (Figura 4.2). Para os experimentos de comparação entre as metodologias, manteve-se a junta de um termopar próximo ao centro geométrico das garrafas (Figura 4.3).

Figura 4.2. Modelos das duas garrafas testadas (G1 e G2), com os três termopares (TP, marcados por “+” e “•”) dispostos na extremidade do produto

Figura 4.3. Modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas nas comparações entre metodologias, contendo um termopar (TP, marcado por “+”)

4.2.1.4. Sistema de aquecimento

O aquecimento das garrafas foi realizado em banho-maria agitado microprocessado (sistema PID, banho-maria ultratermostático 116/3, Fanem, Brasil) contendo três outras garrafas atuando como carga do equipamento. As garrafas foram posicionadas segundo a Figura 4.4, sobre um suporte formado por uma grade metálica, utilizada com objetivo de permitir a circulação de água por baixo das garrafas. As garrafas foram mantidas em banho-maria a 25°C até equilíbrio térmico, determinado quando a diferença de temperatura entre os quatro termopares era menor do que 0,3°C, e então introduzidas no banho-maria de processo a 90°C pelo período desejado. Tomou-se cuidado para que o posicionamento das garrafas dentro do banho-maria fosse sempre o mesmo, para todas as repetições.

Figura 4.4. Representação esquemática do sistema montado para aquecimento das garrafas

4.2.2. Determinação do coeficientes convectivos de transferência de calor (h) para as duas garrafas

Os coeficientes convectivos de transferência de calor (h) para as duas garrafas foram determinados através de metodologia de otimização envolvendo dados experimentais e obtidos por simulações de CFD, como descrito no Capítulo

3. Os valores utilizados foram de $2.150 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para o aquecimento de G1, e $1.450 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G2.

4.2.3. Determinação do perfil de temperatura na interface fluido-embalagem

Os perfis foram determinados experimentalmente para as duas garrafas, G1 e G2, em cinco repetições. As garrafas foram preparadas como citado no item 4.2.1.3, com os termopares tocando a parede interna de vidro (Figura 4.2). Foram então inseridas no banho-maria para aquecimento. As garrafas foram aquecidas vazias, para obtenção do perfil de temperatura resultante do aquecimento do vidro, sem a interferência interna de um produto.

4.2.4. Determinação do perfil de temperatura do meio de aquecimento

A determinação do perfil térmico do meio de aquecimento foi realizada juntamente com os experimentos descritos nas seções anteriores, através do posicionamento de dois termopares no banho-maria, próximos às garrafas, sendo considerada a temperatura média entre os mesmos.

4.2.5. Avaliação e comparação das metodologias

A Tabela 4.1 apresenta as características das quatro metodologias testadas, que se diferenciam pelas condições de contorno adotadas para o modelo. O M1 utilizou como condição de contorno o valor de h_{global} determinado, assim como o perfil de temperatura da água de aquecimento (T_{∞}). Os modelos M2, M3 e M4 utilizaram como condição de contorno o perfil de temperatura da água de aquecimento ou da parede interna da embalagem. O M4 considera a extremidade do fluido com perfil térmico determinado no aquecimento das garrafa com termopares presos na parede interna. O M2 considera a extremidade externa

da embalagem com temperatura da água de aquecimento, enquanto o M3 considera a extremidade do fluido com esse perfil.

Tabela 4.1. Metodologias testadas de condição de contorno para análises de CFD e respectivas condições de contorno

Metodologia	Condição de Contorno
M1	h e T_{∞}
M2	$T_{\text{extremidade_embalagem}} = T_{\infty}$
M3	$T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\infty}$
M4	$T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\text{perfil_térmico}}$

As metodologias foram avaliadas através da comparação de valores obtidos pelos modelos e experimentais, para o aquecimento de água. Posicionou-se a junta de um termopar próximo ao centro geométrico das garrafas (Figura 4.3). Preencheu-se completamente ambas as garrafas com água destilada e deionizada (Milli-Q[®]), e, após equilíbrio térmico (25°C), aqueceu-se as mesmas em banho-maria agitado microprocessado (item 4.2.1.4) a 90°C por 250 s.

As metodologias foram comparadas através do perfil térmico (e conseqüente soma residual dos quadrados - SSR, Equação 4.02) e valor de F, utilizando-se os valores de coeficiente térmico (z) e temperatura de referência (T_{ref}) de 6,94°C e 60°C, respectivamente, comuns para o processamento de cervejas (HORN et al., 1997), processo com características semelhantes ao aqui simulado. O valor de F foi comparado através de seu perfil ao longo do processo e a relação do obtido pelo modelo e experimentalmente modelo ($F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$). Quão mais próximos da unidade, mais próximo do experimental é o processo descrito pelo modelo. Valores próximos da unidade, porém um pouco abaixo da mesma, representam um modelo conservador, evitando subprocessamento de processos baseados nos modelos em questão.

Além disso, para cada metodologia, obteve-se um gráfico de $T_{\text{experimental}}$ versus T_{modelo} , obtendo-se uma regressão linear com intersecção na origem, como utilizado por Pinho e Cristianini (2006), Pinho e Cristianini (2005), Cristianini e

Massaguer (2002), Xie e Sheard (1996) e Lebowitz e Bhowmik (1989). Comparou-se então os valores da inclinação da linearização (a_{em}) e R^2 , obtendo-se assim mais dois parâmetros na comparação das metodologias.

$$SSR = \sum (T_{experimental}^{x,y,z,t} - T_{modelo}^{x,y,z,t})^2 \quad \text{Equação 4.02}$$

4.2.5.1. Modelos matemáticos

As simulações foram realizadas através de análise de CFD, utilizando-se o programa Ansys CFX 11.0 (Ansys Inc., EUA), baseado na análise de volumes finitos (FVA).

Os modelos tridimensionais foram obtidos a partir da geometria real das embalagens, obtidas por avaliação em papel milimetrado de suas seções longitudinais, como utilizado por Augusto et al. (2009), Augusto e Cristianini (2009), Augusto, Santana e Cristianini (2008), Santana (2007), Pinho e Cristianini (2005), e Cristianini e Massaguer (2002). Devido à simetria axial das embalagens, considerou-se apenas um quarto das mesmas na elaboração dos modelos, gerados à partir de revolução das áreas obtidas anteriormente.

Os modelos foram formados por três partes: produto (água pura), embalagem (paredes de vidro) e tampa metálica. Considerou-se as propriedades físicas do vidro (INCROPERA, DEWITT, 2003) e da tampa metálica (PINHO, CRISTIANINI, 2006 e 2005) médias na faixa de temperatura utilizada, como apresentado na Tabela 4.02. Utilizou-se as propriedades físicas da água descritas por Denys, Pieters e Dewettinck (2003) (k e C_p função da temperatura, ρ médio), Lide e Frederikse (1996) e Sengers e Watson (1986) (μ função da temperatura) e Chen, Huang e Ghani (2005) (β função da temperatura) (Tabela 4.3).

Tabela 4.2. Propriedades físicas do vidro e tampa metálica utilizadas nos modelos

Material	Densidade (ρ) ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	Condutividade térmica (k) ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)	Calor específico (Cp)($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$)	Fonte
Vidro	2.449	1,4	750	Incropera e DeWitt (2003)
Tampa metálica	2.702	237	903	Pinho e Cristianini (2006 e 2005)

Tabela 4.3. Propriedades físicas da água utilizadas nos modelos

Propriedade	Valor	Fonte
Densidade (ρ) ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	998,2	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Condutividade térmica (k) ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) *	$-0,7316528 + 0,007321898\cdot T - 9,492\cdot 10^{-6}\cdot T^2$	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Calor específico (Cp)($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) *	$3,991225\cdot 10^4 - 423,1844\cdot T + 1,879953\cdot T^2 - 0,00371639\cdot T^3 + 2,761713\cdot 10^{-6}\cdot T^4$	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Viscosidade (μ)($\text{Pa}\cdot\text{s}^{-1}$) *	$1,68\cdot 10^{-6}\cdot e^{15634,477/(R\cdot T)}$	Lide e Frederikse (1996) e Sengers e Watson (1986)
Coefficiente de dilatação térmica (β)(K^{-1}) **	$-4,16\cdot 10^{-8}\cdot T^2 + 1,129\cdot 10^{-5}\cdot T - 8,148\cdot 10^{-6}$	Chen, Huang e Ghani (2005)

* T em K; ** T em $^{\circ}\text{C}$; R = constante universal dos gases ideais

A malha foi gerada com refino nas bordas do fluido, região com maior gradiente de temperatura e velocidade (KUMAR, DILBER, 2007), como utilizado por diversos autores (KANNAN, SANDAKA, 2008; GHANI, FARID, 2006; VARMA, KANAN, 2006; VARMA, KANAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; GHANI et al.,

2002a; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR et al., 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987)(Figura 4.5). A dimensão máxima dos elementos gerados foi de 2 mm (VARMA, KANNAN, 2006), com refino segundo expansão geométrica de fator 1,3 (VARMA, KANNAN, 2006; VARMA, KANNAN, 2005) e dimensão máxima de 1 mm. As malhas das garrafas G1 e G2 foram formadas por cerca de $1,5 \cdot 10^5$ elementos. A minimização do valor do raiz quadrada média do erro (*root mean square* – RMS) foi adotada como critério de convergência para as simulações, com valor máximo de 10^{-4} (VARMA, KANNAN, 2006).

Figura 4.5. Malhas dos modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas nas comparações entre metodologias; no detalhe pode-se observar o refino das extremidades do fluido

Foram utilizadas as seguintes considerações e condições iniciais, freqüentemente utilizadas na literatura (KANNAN, SANDAKA, 2008; VARMA,

KANNAN; 2006, GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; CHEN et al., 2005; VARMA, KANNAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; DENYS et al., 2004; GHANI et al., 2002a; GHANI et al., 2002b; GHANI et al., 2002c; GHANI et al., 2001a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR et al., 1990):

- Temperatura inicial uniforme (25°C);
- Velocidades das correntes de convecção do fluido nos eixos x, y e z nulas em $t=0$;
- Velocidades das correntes de convecção do fluido nulas nas paredes da embalagem (*no slip condition*);
- Dissipação viscosa e geração interna de energia são desprezíveis;
- A *Aproximação de Boussinesq* (relação entre a densidade do fluido e sua temperatura, Equação 2.24) é válida

Como condição de contorno, considerou-se as metodologias aqui propostas. Utilizou-se intervalo de tempo (*timestep*) de 1,0 s.

4.3. Resultados e Discussões

4.3.1. Perfil térmico do meio de aquecimento e da interface fluido-embalagem

As Figuras 4.6 e 4.7 apresentam os perfis térmicos obtidos para três termopares encostados na parede interna das duas garrafas testadas, aquecidas em banho-maria a 90°C por 2.000 s (as figuras apresentam valores até 400 s, uma vez que permanecem praticamente constantes a partir desse período). Observa-se que o termopar encostado no fundo da garrafa possui perfil de aquecimento mais lento, uma vez que a circulação por baixo da mesma é menor.

Figura 4.6. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por "+") encostados nas paredes internas de G1. Média de cinco repetições

Figura 4.7. Perfis térmicos de três termopares (TP, marcados por “+”) encostados nas paredes internas de G2. Média de cinco repetições

Esses perfis foram utilizados como condição de contorno para a metodologia M4.

4.3.2. Comparação entre as quatro metodologias

As Figuras 4.8 e 4.9 apresentam os perfis térmicos dos modelos testados para as garrafas G1 e G2, respectivamente, assim como os perfis de F correspondentes.

Para ambas as garrafas, observa-se que o modelo que utiliza como condição de contorno valores de h e perfil real de temperatura da água de aquecimento (metodologia M1) apresenta valores mais próximos do experimental.

O modelo M2 (temperatura da água de aquecimento é utilizada como condição de contorno para o aquecimento da extremidade externa da embalagem) apresentou perfil de aquecimento mais rápido que o experimental, para ambas as garrafas.

Os modelos M4 (extremidade do fluido com perfil térmico da parede interna) e M3 (extremidade do fluido com o perfil térmico da água de aquecimento) apresentaram curvas de aquecimento muito mais rápidas do que a experimental, com valores de e e $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ muito superiores.

Figura 4.8. Perfis térmicos (esquerda) e valor de F correspondente (direita) experimental (E) e dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno avaliadas (M1, M2, M3, M4) para G1 (a imagem no detalhe apresenta o ponto onde as leituras foram realizadas)

Figura 4.9. Perfis térmicos (esquerda) e valor de F correspondente (direita) experimental (E) e dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno avaliadas (M1, M2, M3, M4) para G2 (a imagem no detalhe apresenta o ponto onde as leituras foram realizadas)

Observa-se, portanto, que, embora utilizadas na literatura, as metodologias que consideram perfis térmicos como condição de contorno de modelamentos matemáticos superestimam a transferência de calor no aquecimento de embalagens de vidro em imersão em água. Tal resultado se deve ao fato da consideração do valor de h infinito (ERDOĞDU, 2008), superestimando o fluxo de calor. No presente caso, como a condição de temperatura constante foi estabelecida para a extremidade do próprio fluido, considera-se como infinito o h interno da garrafa, isto é, entre o fluido e a parede interna da embalagem. Ao considerar a resistência térmica nesse ponto desprezível, o modelo superestima o aquecimento do produto.

Ao se considerar que a resistência térmica à transferência de calor através do fluido é pequena, observa-se que o fluxo de calor que percorre o fluido será fortemente influenciado pelo valor da resistência térmica da interface fluido-

embalagem, explicando os resultados obtidos na metodologia que considera o $h_{\text{fluido-sólido}}$ infinito.

De fato, ao se comparar a variação do fluxo de calor utilizado pelo programa para o cálculo do aquecimento do fluido ao longo do processo, observa-se grande diferença entre os modelos que utilizam as condições de contorno referentes ao h e T_{∞} (M1) e perfis térmicos como condição de contorno (M4) (Figuras 4.10 e 4.11).

Os trabalhos que apresentam perfis térmicos como condição de contorno muitas vezes não apresentam comparação com valores experimentais, podendo apresentar uma taxa de aquecimento e, conseqüentemente, de F , consideravelmente mais alta que a real. A utilização dessas simulações para dimensionamento de processos pode resultar em subprocessamento com comprometimento da segurança e estabilidade do produto.

Figura 4.10. Fluxo de calor (q'' , em W/m^2) dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno M1 (h , T_{∞}) e M4 (Tint) para G1 (a imagem no detalhe apresenta os pontos onde as leituras foram realizadas)

Figura 4.11. Fluxo de calor (q'' , em W/m^2) dos modelos de CFD utilizando as metodologias de condições de contorno M1 (h, T^∞) e M4 (Tint) para G2 (a imagem no detalhe apresenta os pontos onde as leituras foram realizadas)

As Tabelas 4.4 e 4.5 apresentam a comparação entre os modelos analisados e os valores experimentais, através da SSR, inclinação (a_{em}) e R^2 da linearização e comparação entre os valores de esterilização ($F_{modelo}/F_{experimental}$), para G1 e G2, respectivamente.

Para ambas as garrafas, observa-se que o modelo que utiliza como condição de contorno valores de h e perfil real de temperatura da água de aquecimento (metodologia M1) apresenta valores mais próximos do experimental, com inclinações a_{em} (1,02 para G1 e 1,01 para G2) e $F_{modelo}/F_{experimental}$ (1,00 para G1 e 0,96 para G2) próximas da unidade. Conforme observado, os modelos que utilizam perfis térmicos como metodologia de condição de contorno superestimam o processo térmico, com valores de $F_{modelo}/F_{experimental}$ de 4 a 8 para M2, 130 a 177 para M4 e 366 a 369 para M3, indicando claramente não serem apropriados para avaliação de processos térmicos de alimentos.

Tabela 4.4. Avaliação das metodologias M1, M2, M3 e M4 como condição de contorno para modelos de CFD através dos valores de SSR, a_{em} , R^2 , e $F_{modelo}/F_{experimental}$ para G1

Modelo	Condição de Contorno	SSR	a_{em}	R^2	$F_{modelo}/F_{experimental}$
M1	h e T_{∞}	965,8	1,0190	0,9909	1,00
M2	$T_{extremidade_embalagem} = T_{\infty}$	7.125,6	1,0826	0,9911	4,11
M3	$T_{extremidade_fluido} = T_{\infty}$	166.708,3	1,3689	0,4331	366,01
M4	$T_{extremidade_fluido} = T_{perfil_térmico}$	67.786,6	1,2514	0,9371	130,24

Tabela 4.5. Avaliação das metodologias M1, M2, M3 e M4 como condição de contorno para modelos de CFD através dos valores de SSR, a_{em} , R^2 , e $F_{modelo}/F_{experimental}$ para G2

Modelo	Condição de Contorno	SSR	a_{em}	R^2	$F_{modelo}/F_{experimental}$
M1	h e T_{∞}	668,1	1,0117	0,9897	0,96
M2	$T_{extremidade_embalagem} = T_{\infty}$	11.191,3	1,1140	0,9901	7,69
M3	$T_{extremidade_fluido} = T_{\infty}$	169.963,8	1,1405	0,4536	368,78
M4	$T_{extremidade_fluido} = T_{perfil_térmico}$	69.880,4	1,2779	0,9372	176,64

Os resultados obtidos estão de acordo com o esperado, devido as simplificações consideradas nas metodologias avaliadas.

A metodologia M1 (h e T_{∞}) apenas considera que o coeficiente convectivo de transferência de calor (h) entre o meio de aquecimento e a embalagem é uniforme e constante. Tal simplificação torna M1 a metodologia que descreve o processo real com maior rigor.

A metodologia M2 ($T_{extremidade_embalagem} = T_{\infty}$) considera o h entre o meio de aquecimento e a embalagem ($h_{externo}$) infinito, superestimando o fluxo de calor que entra no sistema. Dessa forma, os resultados obtidos através dessa metodologia divergem do experimental, porém estando mais próximos do que as metodologias M3 e M4.

A metodologia M4 ($T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\text{perfil_térmico}}$) utiliza como condição de contorno o perfil térmico previamente estabelecido na interface fluido-embalagem. Dessa forma, considera como infinito o coeficiente convectivo de transferência de calor entre o fluido aquecido e a parede interna da embalagem (h_{interno}). Os resultados obtidos por essa metodologia também superestimam o fluxo de calor que entra no sistema, divergindo dos valores experimentais mais do que a metodologia M2. Entretanto, apresenta valores mais próximos do que a metodologia M3.

A metodologia M3 ($T_{\text{extremidade_fluido}} = T_{\infty}$) utiliza como condição de contorno da extremidade externa do fluido (interface fluido-embalagem) o perfil térmico do meio de aquecimento. Dessa forma, considera infinito tanto o h_{interno} quanto o h_{externo} , assim como desprezível a resistência térmica da embalagem. Conforme esperado, é a metodologia que resulta em maior desvio em relação aos dados experimentais.

4.4. Conclusões

Comparou-se quatro metodologias, considerando-se o perfil térmico da água de aquecimento (T_{∞}) e h medido, T_{∞} como condição de contorno do exterior da embalagem, T_{∞} como condição de contorno da extremidade do produto líquido aquecido, e perfil interno de temperatura ($T=T(x,y,z,t)$), medido na extremidade interna da embalagem, como condição de contorno da extremidade do produto. Os modelos que consideram valor medido de h e T_{∞} apresentaram boa concordância com os valores experimentais, comparados através de história térmica e perfil do valor de esterilização (F), mostrando-se apropriados como condição de contorno. Os modelos que utilizam os perfis térmicos da água de aquecimento ou medidos na parede interna da embalagem, embora utilizados na literatura, apresentaram aquecimento mais rápido que os valores experimentais, não se mostrando apropriados por superestimarem o aquecimento do produto, comprometendo sua segurança e conservação.

4.5. Referências

AKTERIAN, S. G.; FIKIIN, K.. Numerical simulation of unsteady heat conduction in arbitrary shaped canned foods during sterilization processes. **Journal of Food Engineering**, v. 21, p. 343-54, 1994.

AUGUSTO, P. E. D.; CRISTIANINI, M. Avaliação de erros na determinação de histórias térmicas de produtos processados termicamente com registradores internos de temperatura. **Brazilian Journal of Food Technology**, (aceito para publicação), 2009

AUGUSTO, P. E. D.; PINHEIRO, T. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de fluidodinâmica computacional (CFD) na avaliação do efeito da geometria e orientação de garrafas no tratamento térmico de bebidas. In...VII Brazilian Meeting on Chemistry of Food and Beverages (BMCFB). **Anais...**, 2008.

AUGUSTO, P. E. D.; PINHEIRO, T. F.; TRIBST, A. A. L.; CRISTIANINI, M. Evaluation of methodologies for mathematical modeling of packaged conductive foods heat process. **International Journal of Food Engineering**, (aceito para publicação), 2009

AUGUSTO, P. E. D.; SANTANA, F. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de modelagem matemática para avaliação dos efeitos da temperatura de processo e das propriedades térmicas na esterilização de alimentos. **Brazilian Journal of Food Technology**, v.11, n.2, p.159-168, 2008.

BRANDON, H.; GARDNER, R.; HULING, J.; STAACK, G. Time-dependent modeling of in-package pasteurization. **MBAA Technical Quarterly**, v.21, n.4, p.153-159, 1984.

CHEN, X. D.; HUANG, H. J.; GHANI, A. G. A. Thermal sterilization of liquid foods in a sealed container – developing simple correlations to account for natural convection. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n.1, article 5, 2005.

CRISTIANINI, M. **Estudo da distribuição de temperaturas durante o processo de esterilização de atum (*Katsuwonus pelamis*) em bolsa flexível**. Tese (Doutorado em Ciência de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 1998.

CRISTIANINI, M.; MASSAGUER, P. R. Thermal process evaluation of retortable pouches filled with conduction heated food. **Journal of Food Process Engineering**, v.25, p.395-405, 2002.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerical modeling of natural convection heating in canned liquid foods. **Transactions of the ASAE**, v. 30, n. 5, p. 1542-51, 1987.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerically predicted transient temperature and velocity profiles during natural convection heating of canned liquid foods. **Journal of Food Science**, v. 53, n. 1, p. 191-5, 1988.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Combined CFD and experimental approach for determination of the surface heat transfer coefficient during thermal processing of eggs. **Journal of Food Science**, v. 68, n. 3, p. 943-51, 2003.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis of combined conductive and convective heat transfer in model eggs. **Journal of Food Engineering**, v. 63, p. 281-90, 2004.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis for process impact assessment during thermal pasteurization of intact eggs. **Journal of Food Protection**, v. 68, n.2, p. 366-374, 2005.

ENGELMAN, M. S.; SANI, R. L.. Finite-element simulation of an in-package pasteurization process. **Numerical Heat Transfer**, v. 6, p. 41-54, 1983.

ERDOĞDU, F. A review on simultaneous determination of thermal diffusivity and heat transfer coefficient. **Journal of Food Engineering**, v.86, n.3, p.453-459, 2008.

FARID, M.; GHANI, A. G. A. A new computational technique for the estimation of sterilization time in canned food. **Chemical Engineering and Processing**, v.43, n.4, p.523-531, 2004.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of natural convection heating of canned food by computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 41, p. 55-64, 1999a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. An investigation of deactivation of bacteria in a canned liquid food during sterilization using computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Food Engineering**, v. 42, p. 207-14, 1999b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Thermal sterilization of canned food in a 3-D pouch using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 48, p. 147-56, 2001a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of biochemical changes in a viscous liquid canned food during sterilization using computational fluid dynamics. **Food Australia**, v. 53, n. 1-2, p. 48-53, 2001b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Numerical simulation of transient temperature and velocity profiles in a horizontal can during sterilization using

computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 77-83, 2002a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal inactivation of *Bacillus stearothermophilus* in food pouches. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 221-8, 2002b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal destruction of vitamin C in food pouches. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 129-43, 2002c.

GHANI, A. G. A.. A computer simulation of heating and cooling liquid food during sterilization process using computational fluid dynamics. **Association for Computing Machinery New Zealand Bulletin**, v. 2, n. 3. Disponível em <http://www.acm.org/chapters/acm_nz/bulletin/vol2/issue3/articles/v2i3id01.pdf>, acesso em 19/01/2007, 2006.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.. Using the computational fluid dynamics to analyze the thermal sterilization of solid-liquid food mixture in cans. **Innovative Food Science & Emerging Technologies**, v. 7, p. 55-61, 2006.

HANZANA, T.; WANG, Q. H.; SUZUKI, M.; SAKAI, N.. Numerical analysis of slowest heating or cooling point in a canned food in oil. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 31, n. 3, p. 451-5, 1998.

HORN, C. S.; FRANKE, M.; BLAKEMORE, B.; STANNEK, W. Modeling and simulation of pasteurization and staling effects during tunnel pasteurization of bottled beer. **Food and Bioproducts Processing**, v.75, n.1, p.23-33, 1997.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. Rio de Janeiro: LTC, 2003.

JACZYNSKI, J.; PARK, J. W.. Temperature prediction during thermal processing of surimi seafood. **Journal of Food Science**, v. 67, n. 8, p. 3053-7, 2002.

KANNAN, A.; SANDAKA P. C. G. Heat transfer analysis of canned food sterilization in a still retort. **Journal of Food Engineering**, v. 88, n.2, p.213-228; 2008.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.; BLAYLOCK, J.. Numerical simulation of natural convection heating of canned thick viscous liquid food products. **Journal of Food Science**, v. 55, n. 5, p. 1403-1411, 1420, 1990.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.. Transient temperature and velocity profiles in a canned non-Newtonian liquid food during sterilization in a still-cook retort. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 34, n. 4/5, p. 1083-96, 1991.

KUMAR, A.; DILBER, I. Fluid flow and its modeling using computational fluid dynamics. In... SABLANI, S. S.; DATTA, A. K.; SHAFIURRAHMAN, M. (Ed.) **Handbook of food bioprocess modeling techniques**. Boca Raton: CRC Press, 2007.

LEBOWITZ, S. F.; BHOWMIK, S. R. Determination of retortable pouch heat transfer coefficients by optimization method. **Journal of Food Science**, v.54, n.6, p.1407-1412, 1989.

LIDE, D. R.; FREDERIKSE, H. P. R. **CRC handbook of chemistry and physics**. Boca Raton: CRC Press, 76thed., 1996.

MARTINS, R. C. Simple finite volumes and finite elements procedures for food quality and safety simulations. **Journal of Food Engineering**, v.73, n.4, p.327-338, 2006.

NORTON, T.; SUN, D. W.. Computational fluid dynamics (CFD) – an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: a review. **Trends in Food Science and Technology**, v. 17, p. 600-20, 2006.

PINHO, C.. **Modelamento matemático do processo de esterilização de alimentos condutivos em embalagens de vidro**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Disponível em <<http://libdigi.unicamp.br/document/?code=vtls000317685>>, acesso em 29/01/2007, 2003.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M.. Three-Dimensional Mathematical Modeling of Microbiological Destruction of *Bacillus stearothermophilus* in conductive baby food packed in glass container. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n. 2, p. 1-8, 2005.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M.. Método de otimização para determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor em alimentos esterilizados em embalagem de vidro. **Brazilian Journal of Food Technology**, v. 9, n. 3, p. 157-63, 2006.

PLAZL, I.; LAKNER, M.; KOLOINI, T.. Modeling of temperature distributions in canned tomato based dip during industrial pasteurization. **Journal of Food Engineering**, v. 75, p. 400-6, 2006.

PORNCHALOEMPONG, P.; BALABAN, M. O.; TEIXEIRA, A. A.; CHAU, K. V.. Numerical simulation of conduction heating in conically shaped bodies. **Journal of Food Process Engineering**, v. 25, p. 539-55, 2003a.

PORNCHALOEMPONG, P.; BALABAN, M. O.; TEIXEIRA, A. A.; CHAU, K. V.. Optimization of quality retention in conduction-heating foods of conical shape. **Journal of Food Process Engineering**, v. 25, p. 557-70, 2003b.

SANTANA, F. F. **Modelamento Matemático de Alimentos com Particulados pelo Método dos Elementos Finitos**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 2007.

SCOTT, G.; RICHARDSON, P.. The application of computational fluid dynamics in the food industry. **Trends in Food Science and Technology**, v. 8, n. April, p. 119-24, 1997.

SENGERS, J. V.; WATSON, J. T. R. Improved international formulations for the viscosity and thermal conductivity of water substance. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, v.15, n.4, p.1291-1314, 1986.

VARGA, S.; OLIVEIRA, J. C.. Determination of the heat transfer coefficient between bulk medium and packed containers in a batch retort. **Journal of Food Engineering**, v. 44, p. 191-8, 2000.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. Enhanced food sterilization through inclination of the container walls and geometry modifications. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 3753-62, 2005.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. CFD studies on natural convective heating of canned food in conical and cylindrical containers. **Journal of Food Engineering**, v. 77, p. 1024-23, 2006.

WANG, Q. Z.; SAKAI, N.; HANZAWA, T.. Numerical analysis of heat transfer of canned liquid foods containing fibers or particles during sterilization. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 33, n.5, p. 703-8, 2000.

XIA, B.; SUN, D. W.. Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: a review. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 5-24, 2002.

XIE, G.; SHEARD, A. M. Comparison of two methods used to determine apparent heat transfer coefficient for pouches pasteurized in a combination oven. **LWT – Food Science and Technology**, v.29, n.1-2, p.100-105, 1996.

Capítulo 5: Inativação térmica de *Lactobacillus plantarum* em alimento líquido modelo*

* capítulo enviado para publicação, de forma condensada, como:

AUGUSTO, Pedro E. D.; TRIBST, Aline A. L.; CRISTIANINI, Marcelo. Thermal inactivation of *Lactobacillus plantarum* in a liquid model food.

Resumo

O tratamento térmico é um dos métodos mais seguros e utilizados para a conservação de alimentos. A utilização de alimentos modelos no estudo de tratamentos térmicos possui diversas vantagens. Entretanto, a correta caracterização física do mesmo, assim como a determinação da resistência térmica de microrganismos nesse modelo são essenciais. O presente trabalho determinou as características reológicas de uma suspensão 0,3% (m/m) de carboxi-metil-celulose (CMC), utilizada como alimento líquido modelo, e a resistência térmica de *Lactobacillus plantarum*, um microrganismo alvo de processos de pasteurização, nesse sistema. A caracterização reológica foi realizada utilizando-se um reômetro de cilindros concêntricos de parede dupla com tensão controlada, entre as temperaturas de 25°C e 80°C. A resistência térmica de *L. plantarum* foi determinada através do método do frasco de três bocas, nas temperaturas de 52°C, 55°C, 58°C e 61°C. O comportamento reológico do alimento modelo se ajustou à Lei da Potência, com comportamento pseudoplástico, apresentando índice de consistência (k) de 0,09 Pa.sⁿ e índice de comportamento (n) de 0,80 à 25°C. Os parâmetros A_k e energia de ativação (E_{a_k}) do modelo de Arrhenius foram 0,0003 Pa.sⁿ e 14.140,7 J.mol⁻¹K⁻¹, respectivamente. Os valores de $D_{52^\circ\text{C}}$, $D_{55^\circ\text{C}}$, $D_{58^\circ\text{C}}$ e $D_{61^\circ\text{C}}$ de *L. plantarum* foram, respectivamente, 76,3 s, 36,7 s, 16,4 s e 7,3 s, com z de 8,9°C. Devido à escassez desses dados na literatura, os resultados obtidos contribuem para estudos de processos térmicos de alimentos.

Palavras-chave:

Alimento modelo, inativação térmica, reologia, tratamento térmico, termobacteriologia.

Abstract

Thermal process is one of the safest and most frequently used methods for food preservation. The use of model food in thermal treatment studies has several experimental advantages and enables reproducibility. Correct physical characterization of the model food and determination of thermal resistance of microorganisms are essential in thermal treatment experiments. The present work determined the rheological characteristics of a 0.3% (w/w) carboxymethylcellulose (CMC) suspension, used as model liquid food, and the thermal resistance of *Lactobacillus plantarum*, a target microorganism in pasteurization processes. The rheological characterization was conducted using a double wall concentric-cylinder rheometer with controlled tension, in temperatures ranging from 25°C to 80°C. The *L. plantarum* thermal resistance was evaluated using the three-mouth flask method, at 52°C, 55°C, 58°C and 61°C. The rheological behavior of the model food was adjusted to the Power Law, with pseudoplastic behavior, presenting consistency index (k) of 0.09 Pa.s ^{n} and behavior index (n) of 0.80 at 25°C. The parameters A_k and the activation energy (E_{a_k}) of the Arrhenius model were 0.0003 Pa.s ^{n} and 14,140.7 J.mol⁻¹K⁻¹, respectively. The values of $D_{52^\circ\text{C}}$, $D_{55^\circ\text{C}}$, $D_{58^\circ\text{C}}$ and $D_{61^\circ\text{C}}$ of *L. plantarum* were, respectively, 76.3 s, 36.7 s, 16.4 s and 7.3 s, with z of 8.9°C. The data on the model liquid food system and thermobacteriology described herein are potentially useful for future studies on food thermal processes and represent a contribution to the development of efficacious food processing protocols.

Keywords:

Model food, rheology, thermal death kinetics, thermal process, thermobacteriology.

5.1. Introdução

O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados para garantia de conservação e segurança de alimentos (HUANG, 2009; GHANI et al., 2001), mesmo comparando-se com os recentes avanços de outras técnicas (FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 1999a).

A utilização de alimentos modelos no estudo de tratamentos térmicos possibilita a realização de experimentos de forma mais simples, barata e contínua, sem grandes modificações no produto (BERTO et al., 2003). Além disso, o principal enfoque na utilização de soluções modelos em estudos científicos é a possibilidade de reprodução por diferentes grupos de pesquisa, suprimindo-se os efeitos de variabilidade inerentes aos alimentos.

Entretanto, observa-se na literatura pouca informação referente à caracterização de alimentos modelos e cinética de inativação de microrganismos nos mesmos, muitas vezes resultando em não-homogeneidade na realização dos estudos de transferência de calor. A análise de tratamentos térmicos de alimentos líquidos através de fluidodinâmica computacional (CFD) é um exemplo de área onde se observa pouca homogeneidade entre os modelos utilizados, até mesmo resultando em disparidades.

Os primeiros trabalhos de CFD foram realizados com água como solução modelo (BRANDON, PELTON, STAACK, 1982; BRANDON, HULING, STAACK, 1983; ENGELMAN, SANI, 1983; BRANDON et al., 1984; DATTA, TEIXEIRA, 1987; DATTA, TEIXEIRA, 1988). Entretanto, a utilização de água limita os estudos a produtos Newtonianos (Equação 5.01) e de baixa consistência. A utilização de suspensões de carboxi-metil-celulose (CMC) foi proposta por Kumar, Bhattacharya e Blaylock (1990), possibilitando a análise de alimentos de alta consistência e com comportamento pseudoplástico (Equação 5.02, Lei da Potência), característica de grande parte dos alimentos fluidos:

$$\tau = \mu\dot{\gamma} \quad (\text{Equação. 5.01})$$

$$\tau = k\dot{\gamma}^n \quad (\text{Equação. 5.02})$$

Onde τ é a tensão de cisalhamento (Pa), μ é a viscosidade (Pa.s), $\dot{\gamma}$ a taxa de deformação (s^{-1}), k é o índice de consistência do fluido ($Pa.s^n$) e n é o índice de comportamento do fluido (adimensional) (RAO, 1999).

Kumar, Bhattacharya e Blaylock (1990) propuseram a utilização de suspensão de CMC como modelo de alimentos consistentes. Os autores não realizaram experimentos práticos, e consideraram uma CMC genérica com k e n estimados em $0,342 Pa.s^n$ e $0,25$. Segundo os autores, a suspensão pode ser utilizada como modelo para purês de tomate, cenoura, ervilha, damasco, maçã e banana.

Kumar e Bhattacharya (1991) utilizaram suspensão 0,85% (m/m) de CMC e propriedades reológicas previamente obtidas, para simulação de tratamento térmico de alimento pseudoplástico consistente. Seus dados foram posteriormente utilizados por Ghani et al. (1999a), Ghani et al. (1999b), Denys, Pieters e Dewettinck (2004), Farid e Ghani (2004), Varma e Kannan (2005), Chen, Huang e Ghani (2005), Varma e Kannan (2006) e Kannan e Sandaka (2008), como apresentado na Tabela 5.1.

Observa-se que as propriedades reológica foram inicialmente medidas em trabalho citado por Kumar e Bhattacharya (1991), sem especificação de tipo, marca ou modelo de CMC utilizada, nem condições e temperatura de medição e então posteriormente utilizada por diversos autores. Um trabalho recente (KANNAN, SANDAKA, 2008) caracteriza reologicamente uma suspensão 0,85% de CMC, obtendo valores diferentes do reportado por Kumar e Bhattacharya (1991), porém utiliza os últimos na simulação de tratamento térmico.

Tabela 5.1. Dados reológicos de suspensões de CMC utilizadas em trabalhos de fluidodinâmica computacional (CFD)

Referência	k (Pa.s ⁿ)	n	Tipo de Fluido (Modelo)	Observações
“CMC” Kumar, Bhattacharya e Blaylock (1990)	0,342	0,25	Newtoniano*	Estimado; sem determinações práticas
“CMC 0,85% (m/m)” Kumar e Bhattacharya (1991)	0,002232	0,57	Pseudoplástico	Utilizado de trabalho prévio; condições de medidas não citadas
“CMC 0,85% (m/m)” Ghani et al. (1999a); Ghani et al. (1999b); Farid e Ghani (2004)	-	-	Newtoniano*	Sem determinações práticas; dados obtidos de Kumar e Bhattacharya (1991)
“CMC 2% (m/m)” Denys, Pieters, Dewettinck (2004)	-	-	Newtoniano*	Considerou propriedades reológicas fornecidas pelo fabricante e comportamento Newtoniano
“CMC 0,85% (m/m)” Varma e Kannan (2005); Varma e Kannan (2006)	-	-	Pseudoplástico	Dados considerados a 40°C; sem determinações práticas; dados obtidos de Kumar e Bhattacharya (1991)
“CMC 0,85% (m/m)” Kannan e Sandaka (2008)	1,411*10 ⁻⁵	0,82	Pseudoplástico	Embora tenham medido os valores apresentados, utilizaram no modelo os valores citados por Kumar e Bhattacharya (1991)

* Os autores consideram que, devido a baixa taxa de deformação envolvida na esterilização de alimentos (ordem de 0,01s⁻¹), o fluido pode ser considerado independente da taxa de deformação (Newtoniano)

Além disso, alguns autores (KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; FARID, GHANI, 2004), mesmo citando a suspensão de CMC como fluido pseudoplástico, utilizam modelo independente da taxa de deformação (Newtoniano) nas análises de CFD devido as baixas taxas de deformação envolvidas (na ordem de 0,01 s⁻¹). Essa simplificação torna a modelagem matemática mais rápida e fácil, porém resulta em divergências entre estudos. Varma e Kannan (2005) e Ghani, Farid e Chen (2002) chegaram a

resultados opostos ao compararem a eficiência do aquecimento de alimentos acondicionados em latas com orientações vertical ou horizontal, utilizando modelos reológicos diferentes.

Os trabalhos de CFD também não apresentam homogeneidade no modelo adotado para a variação dos parâmetros reológicos com a temperatura. Alguns autores utilizam polinômios de segundo (GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; FARID, GHANI, 2004) ou terceiro grau (DENYS, PIETERS, DEWETTINCK, 2004) para variação da viscosidade, adotando comportamento Newtoniano, enquanto outros autores adotam um modelo de Arrhenius (KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; VARMA, KANNAN, 2005; VARMA, KANNAN, 2006; KANNAN, SANDAKA, 2008). No modelo de Arrhenius, o índice de consistência do fluido (k , em $\text{Pa}\cdot\text{s}^n$) e o índice de comportamento do fluido (n , adimensional), parâmetros da Lei da Potência, se relacionam com a temperatura segundo as Equações 5.03 e 5.04 (RAO, 1999):

$$k = A_k e^{\left(\frac{Ea_k}{RT}\right)} \quad (\text{Equação. 5.03})$$

$$n = A_n e^{\left(\frac{Ea_n}{RT}\right)} \quad (\text{Equação. 5.04})$$

Onde A_k e A_n são constantes de proporcionalidade ($\text{Pa}\cdot\text{s}^n$) para k e n , Ea_k e Ea_n são a energia de ativação ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$) para k e n , R é a constante dos gases ideais ($8,314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) e T a temperatura (K). Embora o índice de comportamento do fluido (n) seja considerado relativamente constante em relação a temperatura (RAO, 1999), sua relação através do modelo de Arrhenius foi testada.

Além disso, observa-se que as características reológicas da CMC são bastante variáveis em função do tamanho da cadeia e grau de substituição, e, portanto, entre amostras comerciais, como pode ser observado na Tabela 5.2. A medição experimental dos parâmetros reológicos do alimento modelo é, portanto, necessária para modelamento matemático eficiente. A utilização de dados de

literatura pode apresentar grandes erros, uma vez que a amostra e condições de uso não são iguais.

Tabela 5.2. Caracterização reológica de suspensão 1,0% (m/m) de CMC em diferentes trabalhos

k (Pa.sⁿ)	n	T (°C)	Referência
77,4	0,888	25	Cancela, Álvarez e Maceiras (2005)
2,23	0,55	60	Awuah, Ramaswamy e Simpson (1993)
1,19	0,56	60	Abdelrahim e Ramaswamy (1995)
1,0	0,72	-	Tiwari et al. (2008)
0,45	0,77	30	Rao, Walter e Cooley (1981)
0,057	0,572	20	Yaşar, Toğrul e Arslan (2007)

Observa-se, portanto, que os trabalhos de CFD não apresentam uniformidade no tratamento reológico dos alimentos modelos utilizados, criando-se a demanda pela caracterização de líquidos para esse fim. O presente trabalho teve como objetivo caracterizar reologicamente um alimento líquido modelo (suspensão 0,3% de CMC) e caracterizar no mesmo a inativação térmica de (*Lactobacillus plantarum*), um microrganismo que pode ser considerado modelo em processos de pasteurização, gerando assim subsídios para estudos de tratamentos térmicos.

5.2. Material e Métodos

5.2.1. Alimento modelo

Utilizou-se uma suspensão 0,3% (m/m) de carboxi-metil-celulose (CMC) em água destilada e deionizada (Milli-Q[®]) como alimento líquido modelo, de marca comercial Denvercel FG1808A (Denver, Brasil), e grau de substituição de 0,70-0,85. A CMC foi dispersa sob vigorosa agitação em água destilada e deionizada (Milli-Q[®]), utilizando um agitador mecânico (Fisatrom 710, Brazil), e então deixada em repouso na geladeira até o dia seguinte para completa hidratação e liberação de bolhas de ar (ABDELRAHIM, RAMASWAMY, 1995). A baixa concentração da suspensão permite a consideração de propriedades térmicas iguais às da água pura, sendo necessária apenas a realização de sua caracterização reológica. O pH e atividade de água (A_w) da suspensão foram, respectivamente, $6,95 \pm 0,04$ e $0,995 \pm 0,004$ (média $\pm$ desvio padrão a 25°C; triplicata).

5.2.2. Caracterização reológica do alimento modelo

A caracterização reológica do alimento modelo foi realizada utilizando um reômetro com tensão controlada (Carri-Med CSL2 500, TA Instruments, Inglaterra). Ao reômetro foram acoplados cilindros concêntricos de parede dupla, de aço inoxidável, sendo o interno rotativo (20,38mm de raio interno e 21,96mm de raio externo) e o externo fixo (20mm de raio interno e 22,38mm de raio externo), com um *gap* de 500mm. As curvas de escoamento foram obtidas em experimentos com variação controlada da tensão de cisalhamento (τ), em intervalo pré-determinado para obtenção de taxa de deformação ($\dot{\gamma}$) máxima de 300s^{-1} . As análises foram feitas em triplicata, para as temperaturas de 25°C, 40°C, 60°C e 80°C, cobrindo a faixa de temperatura utilizada no presente trabalho. As curvas de escoamento foram linearizadas e obtida a regressão para modelo pseudoplástico (Lei da Potência, Equação 5.02), como descrito por Rao (1999). O comportamento

reológico da suspensão de CMC foi relacionada com a temperatura através do modelo de Arrhenius, onde o k e o n são escritos segundo as Equações 5.03 e 5.04 (RAO, 1999). Os resultados foram analisados através de análise de variância (ANOVA) e Teste de Tukey ($p < 0,05$), utilizando-se o programa Statistica 5.5 (StatSoft, EUA).

5.2.3. Microrganismo modelo

Como microrganismo modelo escolheu-se *Lactobacillus plantarum*, capaz de se desenvolver em um grande número de alimentos líquidos, estando naturalmente presente em diversos sucos de frutas (SAMPEDRO et al., 2007), cervejas (FRANCHI et al., 2003), entre outros. Além disso, o fato de conseguir contagens iniciais da ordem de 10^9 UFC/mL torna esse microrganismo adequado às análises de tratamentos térmicos de alimentos pasteurizados.

Cepas ATCC 8014 de *Lactobacillus plantarum* foram obtidas da Fundação André Tosello de Pesquisa e Tecnologia (Campinas, Brasil – www.fat.org.br). A cultura foi repicada em caldo MRS (*deMan, Rogosa, Sharpe*)(Oxoid, Inglaterra) e incubada a 30°C por 16h, com contagens após 48h, condições previamente determinadas para garantia de contagens na ordem de 10^9 UFC/mL e cultura no começo da fase estacionária, como utilizado por Sampedro et al. (2007), De Angelis et al. (2004), Selma et al. (2004) e Shearer et al. (2002).

5.2.4. Inativação térmica

A inativação térmica do microrganismo modelo foi realizada através da metodologia do frasco de três bocas (STUMBO, 1973). O frasco consiste em um balão de três bocas, através das quais são inseridos um termopar para controle de temperatura, uma haste com hélice para agitação (boca central) e ponteiros de micropipeta para retirada de amostras.

A determinação da resistência térmica microbiana é realizada na literatura através de vários métodos. Na maioria dos métodos, a amostra é inoculada com a

suspensão microbiana e colocada em um pequeno recipiente, sendo então imerso no meio de troca térmica, como utilizado no tradicional método do tubo TDT de vidro (CHUNG, WANG, TANG, 2007; DE ANGELIS et al., 2004; TAJCHAKAVIT, RAMASWAMY, FUSTIER, 1998, STUMBO, 1973), ou dos métodos derivados, como do tubo TDT de alumínio (AL-HOLY et al., 2004), tubos capilares de vidro (CHUNG, WANG, TANG, 2007), tubos capilares de aço inoxidável (HAAS, BEHSNILIAN, SCHUBERT, 1996a e 1996b), discos TDT de alumínio (CHUNG, BIRLA, TANG, 2008) e esferas TDT de vidro (CASADEI et al., 2001). Nessas metodologias, o atraso térmico (lag) decorrente da transferência de calor pelo material do recipiente e através da amostra resulta em processo não isotérmico, comprometendo a determinação dos parâmetros de inativação microbiana (CHUNG, BIRLA, TANG, 2008; CHUNG, WANG, TANG, 2007; AL-HOLY et al., 2004; LOSS, HOTCHKISS, 2004; STUMBO, 1973). Chung, Birla e Tang (2008) e Chung, Wang e Tang (2007) observam que a exposição prolongada a altas temperaturas decorrentes do atraso térmico podem aumentar a resistência térmica de bactérias devido a formação de proteínas protetoras.

A utilização da metodologia do frasco de três bocas é uma forma simples de se determinar a resistência térmica de microrganismos em temperaturas abaixo da temperatura de ebulição da água à pressão atmosférica, com atraso térmico desprezível. Uma vez que o inóculo é adicionado à amostra apenas quando esta alcança a temperatura desejada, e como a quantidade de inóculo adicionada é pequena o suficiente para não causar mudança considerável na temperatura da amostra, o aquecimento é virtualmente instantâneo (STUMBO, 1973). Dessa forma, é esperado que os parâmetros de inativação térmica microbiana obtidos por essa técnica sejam mais exatos do que os obtidos através das técnicas de recipientes-TDT. A metodologia do frasco de três bocas foi utilizada com sucesso nos trabalhos de Reveron, Barreiro e Sandoval (2005), Reveron, Barreiro e Sandoval (2003) e Franchi et al. (2003), com inativação térmica de bactérias, bolores e leveduras.

A resistência térmica foi determinada nas temperaturas de 52°C, 55°C, 58°C e 61°C. A suspensão estéril de CMC foi colocada no frasco, e este imerso em um banho-maria. Após equilíbrio térmico na temperatura desejada, adicionou-

se 1% em volume do inóculo, preparado como descrito anteriormente. Amostras foram retiradas em intervalos de tempo previamente determinados, e rapidamente colocadas em tubos imersos em banho de água e gelo. O tempo total de processo, a cada temperatura, foi determinado para garantia de redução de pelo menos cinco ciclos logarítmicos na contagem microbiana. Após diluições em água peptonada (0,1%, m/m, peptona de caseína, Merck, Alemanha), as amostras foram inoculadas em profundidade em agar MRS (Oxoid, Inglaterra) a 30°C durante 48h, para posterior contagem. A análise foi feita com quatro (52°C, 55°C e 58°C) ou cinco (61°C) repetições.

Os valores do tempo de redução decimal (D_T) foram obtidos à partir da inclinação das curvas de inativação térmica (logaritmo do número de sobreviventes em relação ao tempo, para cada temperatura, Figura 5.3) para cada repetição; e do coeficiente térmico (z) foi obtido à partir da inclinação da curva fantasma TDT (logaritmo dos valores de D_T obtidos em relação à temperatura, Figura 5.4), como descrito por Pflug (1988) e Stumbo (1973).

5.3. Resultados e Discussões

5.3.1. Caracterização reológica do alimento modelo

A Figura 5.1 apresenta as curvas de escoamento da suspensão de CMC 0,3% (m/m) analisada a 25°C, 40°C, 60°C e 80°C. As curvas apresentam perfil pseudoplástico, com esperada redução na viscosidade aparente ($\mu_a = \tau / \dot{\gamma}$) com o aumento da temperatura. A caracterização reológica, obtida nas mesmas temperaturas, apresentou boa correlação com a Lei da Potência, com R^2 superiores a 0,99, e comportamento pseudoplástico, caracterizado pelo índice de comportamento (n) menor que a unidade (Tabela 5.3).

Figura 5.1. Curvas de escoamento da suspensão de CMC 0,3% (m/m) analisada a 25°C, 40°C, 60°C e 80°C

Tabela 5.3. Caracterização reológica da suspensões de CMC 0,3% utilizada, segundo modelo pseudoplástico (Lei da Potência: $\tau = k\dot{\gamma}^n$)

T (°C)	k (Pa.s ⁿ)	n	R ²
25	0,088±0,001 ^a	0,795±0,003 ^a	0,996
40	0,068±0,003 ^b	0,806±0,004 ^a	0,997
60	0,046±0,002 ^c	0,830±0,007 ^b	0,998
80	0,037±0,004 ^d	0,831±0,011 ^b	0,998

* médias com as mesmas letras por coluna não apresentam diferença significativa (p<0,05)

A Tabela 5.4 compara os parâmetros de caracterização reológica k e n obtidos para o fluido modelo com possíveis alimentos que ele poderia diretamente representar. Observa-se assim que o alimento modelo proposto pode representar sucos de frutas em diversos estudos, como no de tratamentos térmicos, possibilitando a realização de experimentos mais simples, baratos e reprodutíveis.

A Figura 5.2 apresenta o comportamento em relação a temperatura dos parâmetros de caracterização reológica k e n para a suspensão de CMC analisada. Tais curvas são utilizadas na obtenção das constantes da equação de Arrhenius, através de sua linearização (RAO, 1999). A variação do índice de comportamento (n) se mostrou pequena em relação a mudança de temperatura, como também pode ser observado na Tabela 5.3.

Tabela 5.4. Caracterização reológica das suspensões de CMC utilizada e possíveis alimentos para atuação como alimento modelo

Produto	k (Pa.s ⁿ)	n	T (°C)	Referência
CMC 0,3%	0,09	0,80	25	Presente trabalho
Suco de “gilaboru” 35,0°Brix	0,08	0,897	30	Altan, Kus e Kaya (2005)
Suco de mirtilho (blueberry) 24,9°Brix	0,047	0,76	20	Cepeda et al. (2002)
Suco de pomelo 21°Brix	0,046	0,758	-	Chuag et al. (2008)
Suco de amora 20,0°Brix	0,039	0,634	22	Cabral et al. (2007)
Polpa de manga centrifugada	0,25	0,72	30	Vidal, Pelegrine e Gasparetto (2004)
Suco de cenoura	0,09	0,51	25	Vandresen et al. (2008)
Leite concentrado (42,4% de sólidos)	0,07	0,89	25	Vélez-Ruiz e Barbosa- Cánovas (1998)

Figura 4.2. Comportamento em relação a temperatura dos parâmetros de caracterização reológica k e n para a suspensão de CMC analisada

Segundo Rao (1999) e Acquarone (1997), a pequena variação do n em relação a temperatura possibilita a utilização de valor constante e igual a média obtida na faixa de temperatura testada (0,8155). Essa consideração é utilizada nos trabalhos de CFD onde o modelo pseudoplástico é adotado (KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; VARMA, KANNAN, 2005; VARMA, KANNAN, 2006; KANNAN, SANDAKA, 2008). Dessa forma, a Equação 5.02 pode ser escrita como:

$$\tau = A_k e^{\left(\frac{Ea_k}{RT}\right)} \dot{\gamma}^{\bar{n}} \quad (\text{Equação. 5.05})$$

Onde $\bar{n}$ representa o valor médio do índice de comportamento do fluido na faixa de temperatura analisada. As constantes A_k e energia de ativação (Ea_k) do modelo de Arrhenius (Equação. 5.05) foram, respectivamente, 0,0003 Pa.sⁿ e 14.140,7 J.mol⁻¹K⁻¹. O valor obtido de energia de ativação (Ea_k) se mostrou coerente com o relatado para diferentes produtos, como apresentado na Tabela 5.5.

Tabela 5.5. Energia de ativação do modelo de Arrhenius para a CMC testada e comparação com outros produtos

Produto	Ea_k (J.mol⁻¹K⁻¹)	Referência
CMC 0,3%	14.105	Presente trabalho
CMC	17.130	Kumar, Bhattacharya e Blaylock (1990)
CMC 0,85%	30.740	Kumar e Bhattacharya (1991)
Polpa de jabuticaba	12.998	Sato e Cunha (2007)
Purê de pêssego	14.800 – 18.200	Toralles, Vendruscolo e Vendruscolo (2006)
Suco de acerola	7.482 – 14.630	Silva, Guimaraes, e Gasparetto (2005)
Concentrado de tomate	8.600 – 13.000	Dak, Verma e Jaaffrey (2008)
Suco de amora	44.345	Cabral et al. (2007)

5.3.2. Inativação térmica de *Lactobacillus plantarum*

A Figura 5.3 apresenta as curvas de inativação térmica de *L. plantarum* em CMC 0,3% à 52°C, 55°C, 58°C e 61°C, assim como as regressões lineares de cada repetição. A inativação térmica de *L. plantarum* no alimento modelo pôde ser bem descrita por uma cinética de primeira ordem, na faixa de temperatura avaliada, com valor de R^2 sempre superior a 0,90 (Tabela 5.6), como observado por De Angelis et al. (2004), Franchi et al. (2003), Jordan e Cogan (1999) e Tajchakavit, Ramaswamy e Fustier (1998).

Figura 5.3. Curvas de inativação térmica de *L. plantarum* em CMC 0,3% à 52°C, 55°C, 58°C e 61°C (cada repetição é apresentada pelos marcadores e curvas de regressão linear)

Na Tabela 5.6 também são apresentados os valores de tempo de redução decimal (D_T) para cada repetição realizada e a média, para as quatro temperaturas analisadas. Os resultados obtidos apresentam boa repetibilidade, atestada pelos baixos valores de desvio padrão (resultado em coeficientes de variação de 3 a 7%).

Tabela 5.6. Tempos de redução decimal (D_T) de *L. plantarum* em CMC 0,3% à 52°C, 55°C, 58°C e 61°C ($z = 8,9^\circ\text{C}$, $R^2 = 0,9996$)

Repetição	52°C		55°C		58°C		61°C	
	D_T (s)	R^2						
1	76,3	0,95	38,2	0,96	16,7	0,88	7,4	0,98
2	73,0	0,91	37,9	0,96	16,6	0,95	7,0	0,95
3	78,1	0,97	34,3	0,93	16,9	0,91	6,9	0,97
4	79,4	0,98	37,6	0,96	16,1	0,95	8,0	0,91
5	74,6	0,93	35,7	0,92	15,6	0,95		
Média	76,3		36,7		16,4		7,3	
Desvio Padrão	2,6		1,7		0,5		0,5	

A resistência térmica de microrganismos possui grande variação em função do meio e cepa utilizada, como pode ser observado em trabalhos da literatura. O tempo de redução decimal (D_T) a 55°C de *L. plantarum* varia de 8,6s para a cepa DPC 1919 em MRS caldo (JORDAN, COGAN, 1999) até 52,5s para a ATCC 1491 em suco de maçã (TAJCHAKAVIT, RAMASWAMY, FUSTIER, 1998). À 56°C, o D_T para a cepa DPC 2102 varia de 0,7s em MRS caldo para 1,4s em leite (JORDAN, COGAN, 1999). Segundo Stumbo (1973), a resistência térmica de bactérias é, em geral, maior quanto maior são o pH ou a concentração de açúcares ou gordura no meio. Tal fato pode ser observado ao se comparar os resultados do presente trabalho com os obtidos por Franchi et al. (2003), ambos realizados com a mesma cepa de *L. plantarum* (ATCC 8014). O valor de $D_{61^\circ\text{C}}$ na suspensão de CMC foi 7,3 s (presente trabalho), valor inferior ao $D_{60^\circ\text{C}}$ de 17,4 s obtido por Franchi et al. (2003) para caldo-de-cana 14°Brix (pH = 6,5).

Essa característica confirma a necessidade da determinação da resistência térmica de microrganismos em alimentos modelos, cuja utilização em estudos de processos térmicos é extremamente desejável, como descrito anteriormente. A resistência térmica microbiana nesses meios podem ser bastante diferentes dos alimentos simulados, como sucos com baixo pH e alta concentração de açúcares. À partir da determinação de resistências térmicas microbianas em alimentos modelos, os estudos e simulações de tratamentos térmicos podem ser realizados de forma mais simples, barata e reprodutiva. Mesmo assim, os valores obtidos no presente trabalho estão dentro do esperado segundo trabalhos apresentados na literatura, como apresentado na Tabela 5.7.

Tabela 5.7. Comparação entre tempos de redução decimal (D_T) de *L. plantarum* em diferentes trabalhos

Cepa	Meio	D_T	Referência
ATCC 8014	CMC 0,3%	$D_{55^\circ\text{C}} = 36,7\text{s}$ $D_{61^\circ\text{C}} = 7,3\text{s}$	Presente trabalho
DPC 2739	Leite	$D_{60^\circ\text{C}} = 32,9\text{s}$	De Angelis et al. (2004)
ATCC 8014	Caldo de cana-de-açúcar	$D_{60^\circ\text{C}} = 17,4\text{s}$	Franchi et al. (2003)
DPC 1919	MRS caldo	$D_{55^\circ\text{C}} = 8,6\text{s}$	Jordan e Cogan (1999)
DPC 2102	MRS caldo Leite	$D_{56^\circ\text{C}} = 0,7\text{s}$ $D_{56^\circ\text{C}} = 1,4\text{s}$	
ATCC 14917	Suco de maçã	$D_{55^\circ\text{C}} = 52,5\text{s}$ $D_{60^\circ\text{C}} = 21,9\text{s}$	Tajchakavit, Ramaswamy e Fustier (1998)

A partir dos valores de D_T , obteve-se a curva de inativação térmica de *L. plantarum* no alimento modelo, apresentada na Figura 5.4. O valor do coeficiente térmico (z) foi determinado como $8,9^\circ\text{C}$, com R^2 de 0,9996. O valor obtido se

encontra dentro do esperado, como pode ser observado na Tabela 5.8, através da comparação com outros trabalhos.

Figura 5.4. Curva de inativação térmica de *L. plantarum* em CMC 0,3%; as barras verticais representam o desvio padrão em cada temperatura

Tabela 5.8. Comparação entre coeficientes térmicos (z) de *L. plantarum* em diferentes meios e trabalhos

Cepa	Meio	z (°C)	Referência
ATCC 8014	CMC 0,3%	8,9	Presente trabalho
DPC 2739	Leite	9,0	De Angelis et al. (2004)
DPC 1919	MRS caldo	6,7	Jordan e Cogan (1999)
DPC 2102	MRS caldo	6,2	
ATCC 14917	Suco de maçã	15,9	Tajchakavit, Ramaswamy e Fustier (1998)

5.4. Conclusões

A utilização de alimentos modelos no estudo de tratamentos térmicos possui diversas vantagens, porém a correta caracterização do mesmo, assim como a determinação da resistência térmica de microrganismos nesse modelo são essenciais.

Determinou-se as características reológicas de uma suspensão 0,3% de CMC entre 25°C e 80°C, utilizada como alimento modelo para sucos de frutas. Obteve-se comportamento pseudoplástico, com índice de consistência (k) de 0,09 Pa.sⁿ e índice de comportamento (n) de 0,80 à 25°C. Os parâmetros A_k e energia de ativação (E_{a_k}), do modelo de Arrhenius foram 0,0003 Pa.sⁿ e 14.140,7 J.mol⁻¹K⁻¹, respectivamente.

No mesmo modelo, determinou-se a resistência térmica de *Lactobacillus plantarum*, um microrganismo alvo de processos de pasteurização, obtendo-se valores de $D_{55^\circ\text{C}}$ e z de, respectivamente, 36,7s e 8,9°C.

Devido à escassez desses dados na literatura, os resultados obtidos contribuem para estudos de processos térmicos de alimentos.

5.5. Referências

ABDELRAHIM, K. A.; RAMASWAMY, H. S. High temperature/pressure rheology of carboxymethyl cellulose (CMC). **Food Research International**, v.28, n.3, p. 285-290, 1995,

ACQUARONE, V. M. **Caracterização reológica de soluções de CMC: viscoelasticidade e influência de características da molécula**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 1997.

AL-HOLY, M.; QUINDE, Z.; GUAN, D.; TANG, J.; RASCO, B. Thermal inactivation of *Listeria innocua* in salmon (*Oncorhynchus keta*) caviar using conventional glass and novel aluminum thermal-death-time tubes. **Journal of Food Protection**, v.67, n.2, p.383-386, 2004.

ALTAN, A.; KUS, S.; KAYA, A. R. Rheological behaviour and time dependent characterisation of gilaboru juice (*Viburnum opulus* L.). **Food Science and Technology International**, v.11, n.2, p.129-137, 2005.

AWUAH, G. B.; RAMASWAMY, H. S.; SIMPSON, B. K. Surface heat transfer coefficients associated with heating of food particles in CMC solutions. **Journal of Food Process Engineering**, v.16, n.1, p.39-57, 1993.

BERTO, M. I.; GRATÃO, A. C. A.; VITALI, A. A.; SILVEIRA JR, V. Rheology of sucrose-CMC model solution. **Journal of Texture Studies**, v.34, n.4, p.391-400, 2003.

BRANDON, H.; PELTON, P.; STAACK, G. State-of-the-art methodology for evaluation of pasteurizer heating and cooling processes. **MBAA Technical Quarterly**, v.19, n.1, p.34-40, 1982.

BRANDON, H.; HULING, J.; STAACK, G. Computer simulation of pasteurizer performance. **MBAA Technical Quaterly**, v.20, n.1, p.39-46, 1983.

BRANDON, H.; GARDNER, R.; HULING, J.; STAACK, G. Time-dependent modeling of in-package pasteurization. **MBAA Technical Quaterly**, v.21, n.4, p.153-159, 1984.

CABRAL, R. A. F.; ORREGO-ALZATE, C. E.; GABAS, A. L.; TELIS-ROMERO, J. Rheological and thermophysical properties of blackberry juice. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v.27, n.3, p.589-596, 2007.

CANCELA, M. A.; ÁLVAREZ, E.; MACEIRAS, R. Effects of temperature and concentration on carboxymethylcellulose with sucrose rheology. **Journal of Food Engineering**, v.71, n.4, p.419-424, 2005.

CASADEI, M. A.; INGRAM, R.; HITCHINGS, E.; ARCHER, J.; GAZE, J. E. Heat resistance of *Bacillus cereus*, *Salmonella typhimurium* and *Lactobacillus delbrueckii* in relation to pH and ethanol. **International Journal of Food Microbiology**, v.63, n.1-2, p.125-134, 2001.

CEPEDA, E.; HERMOSA, M.; LLORENS, F.; VILLARÁN, M. C. Rheological behaviour of blueberry cloudy juice (*Vaccinium corymbosum* L.). **International Journal of Food Science and Technology**, v.37, p.271-276, 2002.

CHEN, X. D.; HUANG, H. J.; GHANI, A. G. A. Thermal sterilization of liquid foods in a sealed container – developing simple correlations to account for natural convection. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n.1, article 5, 2005.

CHUAH, T. G.; KESHANI, S.; CHIN, N. L.; LAU, M. C.; CHIN, D. S. J. Rheological properties of diluted pummelo juice as affected by three different concentrations. **International Journal of Food Engineering**, v.4, n.5, Article 1, 2008.

CHUNG, H. J.; BIRLA, S. L.; TANG, J. Performance evaluation of aluminum test cell designed for determining the heat resistance of bacterial spores in foods. **LWT - Food Science and Technology**, v.41, n.8, p.1351-1359, 2008.

CHUNG, H. J.; WANG, S.; TANG, J. Influence of heat transfer with tube methods on measured thermal inactivation parameters for *Escherichia coli*. **Journal of Food Protection**, v.70, n.4, p.851-859, 2007.

DAK, M.; VERMA, R. C.; JAAFFREY, S. N. A. Rheological properties of tomato concentrate. **International Journal of Food Engineering**, v.4, n.7, article 11, 2008.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerical modeling of natural convection heating in canned liquid foods. **Transactions of the ASAE**, v. 30, n. 5, p. 1542-51, 1987.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerically predicted transient temperature and velocity profiles during natural convection heating of canned liquid foods. **Journal of Food Science**, v. 53, n. 1, p. 191-5, 1988.

DE ANGELIS, M.; DI CAGNO, R.; HUET, C.; CRECCHIO, C.; FOX, P. F.; GOBBETTI, M. Heat shock response in *Lactobacillus plantarum*. **Applied and Environmental Microbiology**, v.70, n.3, p.1336-1346, 2004.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis of combined conductive and convective heat transfer in model eggs. **Journal of Food Engineering**, v. 63, p. 281-90, 2004.

ENGELMAN, M. S.; SANI, R. L.. Finite-element simulation of an in-package pasteurization process. **Numerical Heat Transfer**, v. 6, p. 41-54, 1983.

FARID, M.; GHANI, A. G. A. A new computational technique for the estimation of sterilization time in canned food. **Chemical Engineering and Processing**, v.43, n.4, p.523-531, 2004.

FRANCHI, M.A.; SERRA, G.E.; SVILOSEN, J.; CRISTIANINI, M. Thermal death kinetics of bacterial contaminants during cane sugar and alcohol production. **International Sugar Journal**, v.105, n.1259, p. 527-530, 2003.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of natural convection heating of canned food by computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 41, p. 55-64, 1999a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. An investigation of deactivation of bacteria in a canned liquid food during sterilization using computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Food Engineering**, v. 42, p. 207-14, 1999b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Thermal sterilization of canned food in a 3-D pouch using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 48, p. 147-56, 2001.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Numerical simulation of transient temperature and velocity profiles in a horizontal can during sterilization using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 77-83, 2002.

HAAS, J.; BEHSNILIAN, D.; SCHUBERT, H. Determination of the heat resistance of bacterial spores by the capillary tube method. I: calculation of two borderline cases describing quasi-isothermal conditions. **LWT - Food Science and Technology**, v.29, n.3, p.197-202, 1996a.

HAAS, J.; BEHSNILIAN, D.; SCHUBERT, H. Determination of the heat resistance of bacterial spores by the capillary tube method. II: kinetic parameters of *Bacillus stearothermophilus* spores. **LWT - Food Science and Technology**, v.29, n.4, p.299-303, 1996b.

HUANG, L. Thermal inactivation of *Listeria monocytogenes* in ground beef under isothermal and dynamic temperature conditions. **Journal of Food Engineering**, v.90, n.3, p.380-387, 2009.

JORDAN, K. N.; COGAN, T. M. Heat resistance of *Lactobacillus* spp. Isolated from Cheddar cheese. **Letters in Applied Microbiology**, v.29, n.2, p.136-140, 1999.

KANNAN, A.; SANDAKA P. C. G. Heat transfer analysis of canned food sterilization in a still retort. **Journal of Food Engineering**, v. 88, n.2, p.213-228; 2008.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.; BLAYLOCK, J.. Numerical simulation of natural convection heating of canned thick viscous liquid food products. **Journal of Food Science**, v. 55, n. 5, p. 1403-1411, 1420, 1990.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.. Transient temperature and velocity profiles in a canned non-Newtonian liquid food during sterilization in a still-cook retort. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 34, n. 4/5, p. 1083-96, 1991.

LOSS, C. R.; HOTCHKISS, J. H. Determination of thermal inactivation kinetics of microorganisms with a continuous microflow apparatus. **Journal of Food Protection**, v.67, n.11, p.2560-2564, 2004.

PFLUG, I. J. **Selected papers on the microbiology and engineering of sterilization processes**. Minneapolis: Environmental Sterilization Laboratory, 5th ed., 1988.

RAO, M. A. Flow and functional models for rheological properties of fluid foods. In: RAO, M. A. **Rheology of fluid and semisolid foods: principles and applications**, pp.25-58, Gaithersburg: Aspen Publishers , 1999.

RAO, M. A.; WALTER, R. H.; COOLEY, H. J. Effect of heat treatment on the flow properties of aqueous guar gum and sodium carboxymethylcellulose (CMC) solutions. **Journal of Food Science**, v.46, n.3, p.896-899, 902, 1981.

REVERON, I. M.; BARREIRO, J. A.; SANDOVAL, A. J. Thermal resistance of *Saccharomyces cerevisiae* in Pilsen beer. **Journal of the Institute of Brewing**, v.109, n.2, p.120-122, 2003.

REVERON, I. M.; BARREIRO, J. A.; SANDOVAL, A. J. Thermal death characteristics of *Lactobacillus paracasei* and *Aspergillus niger* in Pilsen beer. **Journal of Food Engineering**, v.66, n.2, p.239-243, 2005.

SAMPEDRO, F.; RIVAS, A.; RODRIGO, D.; MARTÍNEZ, A.; RODRIGO, M. Pulsed electric fields inactivation of *Lactobacillus plantarum* in an Orange juice-milk based beverage: effect of process parameters. **Journal of Food Engineering**, v.80, n.3, p.937-938, 2007.

SATO, A. C. K.; CUNHA, R. L. Influência da temperatura no comportamento reológico da polpa de jabuticaba. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v.27, n.4, p.890-896, 2007.

SELMA, M. V.; SLMERÓN, M. C.; VALERO, M.; FERNÁNDEZ, P. S. Control of *Lactobacillus plantarum* and *Escherichia coli* by pulsed electric fields in MRS broth, nutrient broth and Orange-carrot juice. **Food Microbiology**, v.21, n.5, p.519-525, 2004.

SHEARER, A. E. H.; MAZZOTTA, A. S.; CHUYATE, R.; GOMBAS, D. E. Heat resistance of juice spoilage microorganisms. **Journal of Food Protection**, v.65, n.8, p.1271-1275, 2002.

SILVA, F.C.; GUIMARAES, D. H. P.; GASPARETTO, C. A. Reologia do suco de acerola: efeitos da concentração e temperatura. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v.25, n.1, p.121-126, 2005.

STUMBO, C. R.. **Thermobacteriology in food processing**. San Diego: Academic Press, 2nd ed., 1973.

TAJCHAKAVIT, S.; RAMASWAMY, H. S.; FUSTIER, P. Enhanced destruction of spoilage microorganisms in apple juice during continuous flow microwave heating. **Food Research International**, v.31, n.10, p.713-722, 1998.

TIWARI, B. K. ; MUTHUKUMARAPPAN, K.; O'DONNELL, C. P.; CHENCHIAIAH, M; CULLEN, P. J. Effect of ozonation on the rheological and colour characteristics of hydrocolloid dispersions. **Food Research International**, v.41, n.10, p.1035-1043, 2008.

TORALLES, R. P.; VENDRUSCOLO, J. Z.; VENDRUSCOLO, C. T. Reologia de purê homogêneo de pêsego: efeito da temperatura e concentração. **Brazilian Journal of Food Technology**, v.9, n.1, p.1-8, 2006.

YAŞAR, F.; TOĞRUL, H.; ARSLAN, N. Flow properties of cellulose and carboxymethyl cellulose from orange peel. **Journal of Food Engineering**, v.81,n.1, p.187-199, 2007.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. Enhanced food sterilization through inclination of the container walls and geometry modifications. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 3753-62, 2005.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. CFD studies on natural convective heating of canned food in conical and cylindrical containers. **Journal of Food Engineering**, v. 77, p. 1024-23, 2006.

VIDAL, J. R. M. B.; PELEGRINE, D. H.; GASPARETTO, C. A. Efeito da temperatura no comportamento reológico da polpa de manga (*Mangifera indica* L-Keitt). **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v.24, n.1, p.39-42, 2004.

Capítulo 6: Simulação numérica de tratamento térmico de alimentos líquidos embalados através de fluidodinâmica computacional (CFD)

Resumo

A crescente busca por alimentos mais seguros e de melhor qualidade nutricional e sensorial cria a necessidade de melhor entendimento dos processos envolvidos na produção dos mesmos. A fluidodinâmica computacional (CFD) vem sendo utilizada por diversos autores para melhor entendimento de tratamentos térmicos de alimentos líquidos, um dos métodos mais seguros e utilizados para a conservação de alimentos. No entanto, poucos trabalhos realizam a comparação dos dados obtidos por CFD com experimentais, especialmente em relação a inativação microbiana, colocando em dúvida a real validade dessa técnica na avaliação de processos térmicos de alimentos. O presente trabalho avaliou um processo de pasteurização de um alimento líquido modelo em duas garrafas comerciais através de modelagem matemática por CFD. A validação dos modelos obtidos foi realizada através da avaliação de perfil de temperatura e da inativação microbiológica de um microrganismo modelo (*Lactobacillus plantarum*). Embora os perfis de temperatura obtidos indiquem boa correlação das simulações de CFD com os dados experimentais, a análise de validação microbiológica indicou grande desvio entre os valores experimentais e obtidos pelo modelo, apontando que a utilização de CFD na avaliação de tratamentos térmicos deve ser vista com cautela, principalmente em processos onde a resistência térmica do microrganismo avaliado é baixa nas condições de processamento. Nesse caso, mesmo pequenos desvios entre as temperaturas do modelo e experimentais resultam em considerável inativação microbiana. Diferenças entre os resultados obtidos para ambas as garrafas enfatizam a necessidade de avaliação do processo para cada geometria utilizada, além da necessidade de maiores estudos em relação a influência da geometria da embalagem em processos térmicos. Os resultados obtidos comprovam a necessidade de validação dos modelos obtidos através de avaliação de perfil térmico e inativação microbiológica.

Palavras-chave:

Convecção, fluidodinâmica computacional (CFD), modelamento matemático, tratamento térmico, validação.

Abstract

The growing demand for safer and high-quality food products creates the need for better knowledge of the processes involved in food production. The computational fluid dynamics (CFD) have been widely used for better understand of food thermal process, one of the safest and most frequently used methods for food preservation. However, only a few works compared the CFD results with experimental ones, specially with microbiological inactivation. The effectiveness of CFD utilization in thermal process evaluation is no clear due this lack of information. The present work has evaluated a model liquid food pasteurization in two commercial bottles by CFD mathematical modeling. The evaluation of the models was performed by the evaluation of the temperature profile and the microbial inactivation for a model microorganism (*Lactobacillus plantarum*). The thermal profile obtained by CFD shown good correlation with experimental values, even though the microbiological validation shown large deviation between the experimental values and obtained by the model. These results indicate that the CFD utilization in thermal process evaluation might be carefully seen, in especial when the microorganism thermal resistance is low in process conditions. In these situations, even small differences between CFD and experimental temperatures results in considerable microbial inactivation divergence. The differences obtained between the analysed bottles emphasize the need for process evaluation for each geometry, as the need for more studies on the influence of the geometry of the package in thermal processes. The results obtained in this work show the need for CFD models evaluation by thermal profile and microbiological inactivation.

Keywords:

Computational fluid dynamics (CFD), convection, mathematical modelling, thermal process, validation.

6.1. Introdução

O tratamento térmico é um dos métodos mais utilizados para a conservação de alimentos (GHANI et al., 2001a), sendo que a *appertização* ainda é o método de conservação mais efetivo, mesmo comparando-se com os recentes avanços de outras técnicas (FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 1999a). A crescente busca por alimentos mais seguros e de melhor qualidade nutricional e sensorial cria a necessidade de melhor entendimento dos processos envolvidos na produção dos mesmos.

A utilização de modelamento matemático da transferência de calor na avaliação de tratamentos térmicos vem se mostrando uma poderosa ferramenta na garantia da segurança sem comprometimento da qualidade nutricional e sensorial dos alimentos (MARTINS, 2006; PORNCHALOEMPONG et al., 2003; PINHO, CRISTIANINI, 2005). Permite a minimização dos experimentos de tentativa e erro, utilizados no desenvolvimento e testes de tecnologias na indústria, representando grandes custos e treinamento de pessoal (MARTINS, 2006). Entretanto, Kannan e Sandaka (2008) observam a necessidade de se conhecer melhor o fenômeno de transferência de calor associado aos tratamentos térmicos de alimentos líquidos para melhoria dos processos. Segundo Xia e Sun (2002), a utilização de modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD) na indústria de alimentos pode auxiliar esses desenvolvimentos.

A CFD é uma técnica numérica de resolução de equações que governam o escoamento de fluidos e transferência de calor em uma determinada geometria. Consiste na resolução numérica e simultânea das *Equações de Transporte de Navier-Stokes*, que descrevem a conservação de massa, quantidade de movimento e energia e de equações de estado (NORTON, SUN, 2006; SCOTT, RICHARDSON, 1997).

Diversos autores vem utilizando a CFD como ferramenta para avaliação de tratamentos térmicos de alimentos. A utilização da técnica permite o acompanhamento do tratamento térmico através de perfis de isotermas, de

velocidade das correntes convectivas, localização do ponto frio ou região de aquecimento mais lento (RAML) e transformações nos alimentos, como inativação e destruição de microrganismos, enzimas e nutrientes.

Sua utilização deve ser avaliada através da realização de experimentos de validação do modelo (KUMAR, DILBER, 2007; NORTON, SUN, 2006; CHEN, HUANG, GHANI, 2005), principalmente devido às aproximações e considerações realizadas na formulação do modelo (XIA, SUN, 2002). No entanto, poucos trabalhos na literatura realizam essa validação de forma apropriada.

Muitos trabalhos de CFD não realizam nenhum tipo de validação com dados experimentais (GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; CHEN et al., 2005; VARMA, KANNAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999b; GHANI et al., 2001b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; BRANDON et al., 1984; ENGELMAN, SANI, 1983), enquanto outros só o fazem através da avaliação visual do perfil térmico de determinado ponto do alimento (KANNAN, SANDAKA, 2008; VARMA, KANNAN, 2006; DENYS, PIETERS, DEWETTINK, 2004; GHANI et al., 2001a; WANG, SAKAI, HANZAWA, 2000; GHANI et al., 1999a; DATTA, TEIXEIRA, 1987; BRANDON, PELTON, STAACK, 1982). A comparação quantitativa de perfis de temperatura obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD é realizada apenas nos trabalhos de Krishnamurthy et al. (2008), Dilay et al. (2006), Horn et al. (1997) e Brandon, Huling e Staack (1983). A comparação dos dados de inativação microbiana obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD é realizada apenas no trabalho de Ghani, Farid e Chen (2002b).

A falta de uniformidade na avaliação ou mesmo falta de validação experimental coloca em dúvida a real validade da CFD na avaliação de tratamentos térmicos de alimentos. O presente trabalho avaliou o processo de pasteurização de um alimento líquido modelo em duas garrafas comerciais através de modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD), realizando-se a validação dos modelos obtidos através de avaliação de perfil térmico e inativação microbiológica.

6.2. Material e Métodos

6.2.1. Montagens experimentais

6.2.1.1. Embalagens

Utilizou-se duas garrafas comerciais de cerveja modelo *long neck*, denominadas G1 e G2 (Figura 6.1), com paredes de 2 mm de espessura. G1 possui 375 mL de volume, 219 mm de altura e corpo com 60 mm de diâmetro externo; G2 possui 370 mL, 225 mm de altura e corpo com 60 mm de diâmetro externo).

Figura 6.1. Modelos das duas garrafas avaliadas (G1 e G2)

6.2.1.2. Termopares

A medição de temperaturas no interior das garrafas deve ser realizada com a menor interferência o possível. Para tal, utilizou-se termopares tipo-T flexíveis AWG 30 (Omega Engineering, EUA), soldados, montados e calibrados no

laboratório. Os termopares foram calibrados na faixa de 25°C a 95°C, utilizada no presente trabalho. Para a calibração, foi utilizado um banho-maria bem agitado (Polystat – Cole Parmer, EUA) com água cuja temperatura foi monitorada por um PT100 (RTD - Detector de temperatura por resistência) com curva de calibração conhecida (Ahlborn, Alemanha). Os termopares e o PT100 foram posicionados no banho apontados para um mesmo ponto, e conectados a um aquisitor de dados (ALMEMO 2890-9, Ahlborn, Alemanha), obtendo-se assim a curva de calibração de cada termopar (R^2 superior a 0,9999).

6.2.1.3. Posicionamento dos termopares nas embalagens

Para cada uma das garrafas, os termopares foram introduzidos por um pequeno orifício na tampa. Pelo mesmo furo foi introduzido um tubo oco de polietileno de baixa densidade (PEBD) reto e rígido, com 3 mm de diâmetro externo, utilizado como guia para sustentação dos termopares, sendo fixado no centro da base das garrafas através de um pequeno suporte colado ao vidro. Os fios foram passados internamente ao tubo-guia, até altura correspondente a que se desejava posicionar a junta de medição. As juntas dos termopares foram mantidas próximas ao centro geométrico das garrafas (Figura 6.2) e tiveram suas posições determinadas (x, y e z), para posterior comparação dos dados experimentais e obtidos pelo modelo. Após preenchimento das garrafas com o produto a ser aquecido, estas foram recravadas e vedadas com silicone, sendo os termopares conectados a um aquisitor de dados (ALMEMO 2890-9, Ahlborn, Alemanha).

Figura 6.2. Modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas na validação do modelo matemático, contendo um termopar (TP, marcado por “+”)

6.2.1.4. Sistemas de aquecimento e resfriamento

Os processos de aquecimento e resfriamento das garrafas foram realizados através de imersão total em água. O aquecimento foi realizado em banho-maria agitado microprocessado (sistema PID, banho-maria ultratermostático 116/3, volume nominal de 60 L, Fanem, Brasil) contendo três outras garrafas atuando como carga do equipamento. As garrafas foram posicionadas sobre um suporte formado por uma grade metálica, utilizada com objetivo de permitir a circulação de água por baixo das garrafas. O resfriamento foi realizado de forma semelhante, em equipamento similar (banho-maria Unitemp, volume nominal de 36 L, Fanem, Brasil).

6.2.1.5. Sistema modelo

Utilizou-se alimento líquido modelo caracterizado no Capítulo 5, formado por suspensão 0,3% (m/m) de carboxi-metil-celulose (CMC) de marca comercial Denvercel FG1808A (Denver, Brasil) e grau de substituição de 0,70-0,85 em água destilada e deionizada (Milli-Q®). A CMC foi dispersa sob vigorosa agitação em água destilada e deionizada, e então deixada em repouso na geladeira até o dia seguinte para completa hidratação e liberação de bolhas de ar (ABDELRAHIM, RAMASWAMY, 1995).

A caracterização reológica do alimento modelo, descrita no Capítulo 5, apresentou comportamento pseudoplástico, com índice de consistência (k) de 0,09 Pa.sⁿ e índice de comportamento (n) de 0,80 à 25°C, índice de comportamento médio ($\bar{n}$) de 0,8155 na faixa de temperatura estudada e parâmetros A_k e energia de ativação (Ea_k), do modelo de Arrhenius (Equação 6.01; RAO, 1999), de 0,0003 Pa.sⁿ e 14.140,7 J.mol⁻¹K⁻¹, respectivamente.

$$\tau = A_k e^{\left(\frac{Ea_k}{RT}\right)} \dot{\gamma}^{\bar{n}} \quad (\text{Equação. 6.01})$$

Diversos trabalhos de CFD consideram que a taxa de cisalhamento envolvida nos processos térmicos de alimentos dentro da embalagem são pequenas o suficiente para que fluidos pseudoplásticos sejam considerados Newtonianos (KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; FARID, GHANI, 2004), tornando a modelagem matemática mais rápida e fácil. Para avaliação dessa simplificação, obteve-se a caracterização do alimento modelo segundo modelo Newtoniano (Equação 6.02; RAO, 1999), para taxas de deformação ($\dot{\gamma}$) menores que 10 s⁻¹.

$$\tau = \mu_{ref} e^{\left(\frac{Ea}{RT}\right)} \dot{\gamma} \quad (\text{Equação. 6.02})$$

6.2.2. Determinação do coeficientes convectivos de transferência de calor (h) entre as garrafas e os sistemas de aquecimento e resfriamento

Os coeficientes convectivos de transferência de calor (h) para as duas garrafas foram determinados através de um problema inverso de transferência de calor (*inverse heat transfer problem*). Utilizou-se metodologia de otimização envolvendo dados experimentais e obtidos por simulações de CFD, como descrito no Capítulo 3.

O valor de h no sistema de aquecimento foi $2.150 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G1 e $1.450 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G2, e no de resfriamento, $1.125 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G1 e $675 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ para G2.

6.2.3. Validação do modelo através de comparação de histórias térmicas

A validação do modelo foi realizada através de comparação na história térmica de um ponto, correspondente a localização do termopar no produto, próximo ao centro geométrico das garrafas. Ambas as garrafas foram preparadas como descrito no item 6.2.1.3., totalmente preenchidas com o alimento modelo, e então recravadas, sendo mantidas em banho-maria a 30°C até equilíbrio térmico.

As garrafas foram então imersas no banho-maria de aquecimento, a 60°C , por 7min, sendo então cuidadosamente transferidas ao banho-maria de resfriamento, a 30°C , durante 8min. A temperatura de cada termopar foi obtida em intervalos de 2 s, sendo os experimentos realizados com quatro repetições.

Os dados obtidos experimentalmente foram então comparados com os gerados à partir dos modelos matemáticos, considerando-se modelo reológico Newtoniano e pseudoplástico. A comparação foi realizada através da história térmica obtida e valor de esterilização no termopar (F_p , Equação 6.03), utilizando-se os valores de coeficiente térmico (z) e temperatura de referência (T_{ref}) de $8,9^{\circ}\text{C}$

e 55°C, respectivamente, valores previamente determinados para *Lactobacillus plantarum* no alimento modelo (Capítulo 5).

$$Fp = \int_{t_0}^{t_f} 10^{\frac{T(t)-T_{ref}}{z}} dt \quad (\text{Equação. 6.03})$$

6.2.4. Validação microbiológica do modelo

Lactobacillus plantarum foi utilizado como microrganismo modelo, devido seu potencial de crescimento em produtos que sofrem processos térmicos semelhantes ao aqui apresentados, como diversos sucos de frutas (SAMPEDRO et al., 2007) e cervejas (FRANCHI et al., 2003).

Cepas ATCC 8014 de *Lactobacillus plantarum* foram obtidas da Fundação André Tosello de Pesquisa e Tecnologia (Campinas, Brasil – www.fat.org.br). A resistência térmica do microrganismo foi previamente determinada no alimento modelo utilizado (Capítulo 5), observando-se cinética de primeira ordem com $D_{55^\circ\text{C}} = 36,7 \text{ s}$ e $z = 8,9^\circ\text{C}$.

A cultura foi repicada em caldo MRS (*deMan, Rogosa, Sharpe*)(Oxoid, Inglaterra) e incubada a 30°C por 16 h, condições previamente determinadas para garantia de contagens na ordem de 10^9 UFC/mL e cultura no começo da fase estacionária, como utilizado por Sampedro et al. (2007), De Angelis et al. (2004), Selma et al. (2004) e Shearer et al. (2002).

As garrafas foram preenchidas com 350 mL do alimento modelo (CMC 0,3%), volume padrão na comercialização da embalagem, recravadas e esterilizadas a 121,1°C / 20 min. Foram então mantidas em banho-maria a 30°C até equilíbrio térmico, sendo então abertas em capela de fluxo laminar para adição do inóculo (1% do volume) e novamente recravadas. Como não se realizou exaustão do *headspace*, esse ficou preenchido com ar.

Após agitação, as garrafas foram inseridas no banho-maria de aquecimento a 60°C por 7 min, sendo então cuidadosamente transferidas para o banho-maria

de resfriamento a 30°C por 8 min, resultando em processo subletal. As garrafas processadas foram então agitadas para homogeneização interna e abertas em capela de fluxo laminar para retirada de amostra para contagem microbiana.

As amostras foram diluídas em água peptonada (0,1%, m/m, peptona de caseína, Merck, Alemanha), e então inoculadas em profundidade em agar MRS (Oxoid, Inglaterra) a 30°C durante 48 h, para posterior contagem. A análise foi feita com quatro repetições.

6.2.5. Modelos matemáticos

As simulações foram realizadas através de análise de CFD, utilizando-se o programa Ansys CFX 11.0 (Ansys Inc., EUA), baseado na análise de volumes finitos (FVA).

6.2.5.1. Geometria

Os modelos tridimensionais foram obtidos a partir da geometria real das embalagens, obtidas pela revolução de suas seções longitudinais, avaliadas em papel milimetrado (Figura 6.3, imagem da esquerda), como utilizado por Augusto et al. (2009), Augusto e Cristianini (2009), Augusto, Santana e Cristianini (2008), Santana (2007), Pinho e Cristianini (2005), e Cristianini e Massaguer (2002). A Figura 6.3 apresenta modelos da garrafa G2 utilizada. Quando metade da seção longitudinal obtida é rotacionada (metade superior da imagem da esquerda, pintada de azul escuro), obtém-se um corpo sólido, como os das imagens do centro e da direita (ângulos de rotação de 11,25° e 360°, respectivamente)

Devido à simetria axial das embalagens, avaliou-se a influência do ângulo de rotação no modelo, considerando-se para isso o modelo completo (obtido com rotação de 360°) e formado por 1/4, 1/8, 1/16 e 1/32 partes do mesmo (obtidos por rotação de, respectivamente, 90°, 45°, 22,5° e 11,25°). Modelos formados por menores ângulos de rotação são desejados por possuírem número menor de

volumes na malha, resultando em menor esforço computacional. A Figura 6.4. apresenta a vista superior (tampa metálica em primeiro plano) dos modelos formados à partir da rotação de $11,25^\circ$ e 360° .

Figura 6.3. Modelos da garrafa G2 utilizada. A imagem da esquerda apresenta a seção longitudinal obtida por avaliação em papel milimetrado, as do centro e da direita corpo obtido com ângulos de rotação de $11,25^\circ$ e 360° , respectivamente

Figura 6.4. Vista superior dos modelos formados à partir da rotação de $11,25^\circ$ e 360° da garrafa G2 utilizada

Embora simetria axial sugira a possibilidade de utilização de modelo bidimensional, tal consideração não fora avaliada devido a limitação imposta pelo

programa computacional utilizado, que se baseia na análise de volumes finitos (FVA) e não suporta malha bidimensional.

6.2.5.2. Formação da malha computacional

A malha foi gerada com refino nas bordas do fluido, região com maior gradiente de temperatura e velocidade (KUMAR, DILBER, 2007), como utilizado por diversos autores (KANNAN, SANDAKA, 2008; GHANI, FARID, 2006; VARMA, KANAN, 2006; VARMA, KANAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; GHANI et al., 2002a; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR et al., 1990; DATTA, TEIXEIRA, 1988; DATTA, TEIXEIRA, 1987)(Figura 6.5). A dimensão máxima dos elementos gerados foi de 2mm (VARMA, KANNAN, 2006), com refino segundo expansão geométrica de fator 1,3 (VARMA, KANNAN, 2006; VARMA, KANNAN, 2005) e dimensão máxima de 1mm.

A Tabela 6.1 apresenta o número de volumes finitos obtidos para as malhas da garrafa G2 em cada um dos ângulos de rotação testados (360°, 90°, 45°, 22,5° e 11,25°), semelhantes aos obtidos para G1.

Tabela 6.1. Número de volumes finitos das malhas obtidas para G2 à partir de ângulos de rotação de 360°, 90°, 45°, 22,5° e 11,25°

Ângulo de rotação – G2	360°	90°	45°	22,5°	11,25°
Número de volumes finitos	637.938	153.104	85.357	42.641	23.456

A comparação entre os modelos foi realizada à partir da diferença média de temperatura (*mean temperature difference*, MTD, Equação 6.04) entre os perfis térmicos, proposta por Wang, Tang e Cavalieri (2001) para comparação dos dados obtidos experimentalmente e através de modelos matemáticos; e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$, obtida da razão dos Fp do modelo e experimental (Equação 6.03)

$$MTD = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (T_{\text{mod}(i)} - T_{\text{exp}(i)})^2} \quad (\text{Equação. 6.04})$$

Onde N é o número total de medidas obtidas, T_{mod} é a temperatura obtida através do modelo matemático (CFD), e T_{exp} a temperatura obtida experimentalmente.

Figura 6.5. Malhas dos modelos das duas garrafas (G1 e G2) utilizadas na determinação do h do banho e avaliação da história térmica do aquecimento do alimento modelo; no detalhe pode-se observar o refino das extremidades do fluido; modelo com ângulo de rotação de 90°

6.2.5.3. Composição do modelo e propriedades físicas

Os modelos utilizados foram formados por três (produto, embalagem - paredes de vidro, e tampa metálica), ou quatro partes (*headspace* e demais citadas), em função da montagem experimental realizada.

Nos modelos utilizados na determinação do h de resfriamento e aquecimento do alimento modelo para comparação de história térmica, utilizou-se três partes, sendo o produto formado por água pura e suspensão de CMC 0,3%, respectivamente. No modelo utilizado na validação microbiológica, utilizou-se quatro partes, com o produto formado pela suspensão de CMC 0,3%.

Considerou-se as propriedades físicas do vidro (INCROPERA, DEWITT, 2003) e da tampa metálica (PINHO, CRISTIANINI, 2006 e 2005) médias na faixa de temperatura utilizada, como apresentado na Tabela 6.2.

Assim como utilizado por Augusto et al. (2009), Augusto e Cristianini (2009), Pinho e Cristianini (2006 e 2005) e Varga, Oliveira e Oliveira (2000), considerou-se o *headspace* como uma camada condutiva de ar saturado, com propriedades médias na faixa de temperatura utilizada (Tabela 6.2.).

Utilizou-se as propriedades físicas da água descritas por Denys, Pieters e Dewettinck (2003)(k e C_p função da temperatura, ρ médio), Lide e Frederikse (1996) e Sengers e Watson (1986)(μ função da temperatura) e Chen, Huang e Ghani (2005)(β função da temperatura) (Tabela 6.3).

A baixa concentração da suspensão de CMC utilizada como alimento modelo permite a consideração de propriedades térmicas iguais às da água pura, sendo necessária apenas a realização de sua caracterização reológica. Dessa forma, considerou-se o alimento modelo com k , ρ , C_p e β idênticos ao da água (Tabela 6.3) e com propriedades reológicas obtidas experimentalmente (Capítulo 5), considerando-se modelo Newtoniano (item 6.2.1.5) e pseudoplástico, conforme apresentado na Tabela 6.4.

Tabela 6.2. Propriedades físicas do vidro, tampa metálica e *headspace* utilizadas nos modelos

Material	Densidade (ρ) (kg.m^{-3})	Condutividade térmica (k) ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	Calor específico (Cp)($\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	Fonte
Vidro	2.449	1,4	750	Incropera e DeWitt (2003)
Tampa metálica	2.702	237	903	Pinho e Cristianini (2006 e 2005)
<i>Headspace</i>	0,361	0,023	1964,95	Pinho e Cristianini (2006 e 2005)

Tabela 6.3. Propriedades físicas da água utilizadas nos modelos

Propriedade	Valor	Fonte
Densidade (ρ) (kg.m^{-3})	998,2	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Condutividade térmica (k) ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) *	$-0,7316528 + 0,007321898 \cdot T - 9,492 \cdot 10^{-6} \cdot T^2$	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Calor específico (Cp)($\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$) *	$3,991225 \cdot 10^4 - 423,1844 \cdot T + 1,879953 \cdot T^2 - 0,00371639 \cdot T^3 + 2,761713 \cdot 10^{-6} \cdot T^4$	Denys, Pieters e Dewettinck (2003)
Viscosidade (μ)(Pa.s^{-1}) *	$1,68 \cdot 10^{-6} \cdot e^{15634,477/(R \cdot T)}$	Lide e Frederikse (1996) e Sengers e Watson (1986)
Coefficiente de dilatação térmica (β)(K^{-1}) **	$-4,16 \cdot 10^{-8} \cdot T^2 + 1,129 \cdot 10^{-5} \cdot T - 8,148 \cdot 10^{-6}$	Chen, Huang e Ghani (2005)

* T em K; ** T em °C; R = constante universal dos gases ideais

Tabela 6.4. Viscosidade e viscosidade aparente do alimento modelo (suspensão 0,3% de CMC) *

Propriedade	Valor **	Fonte
Viscosidade aparente (μ_a)(Pa.s ⁻¹)	$0,003 \cdot e^{14104,7/(R \cdot T)} \cdot \gamma^{n-1}$	Obtida experimentalmente (Capítulo 5) – modelo pseudoplástico
Viscosidade (μ)(Pa.s ⁻¹)	$0,00024 \cdot e^{13536,0/(R \cdot T)} \cdot \gamma$	Obtida experimentalmente (Capítulo 5) – modelo Newtoniano (ver item 6.3.1)

* considerando-se k, ρ , Cp e β idênticos ao da água (Tabela 6.3); ** T em K; R = constante universal dos gases ideais

6.2.5.4. Condições iniciais e de contorno

O *Número de Grashof* (Gr – Equação 6.05) relaciona o regime de escoamento do fluido quando em convecção natural (FARID, GHANI, 2004), como o *Número de Reynolds* o faz para convecção forçada. O Gr calculado para os processos em questão está na ordem de 10^5 - 10^6 , abaixo do valor crítico de 10^8 - 10^9 (KUMAR, BHATTACHARYA, 1991), indicando que o escoamento laminar.

$$Gr = \frac{(\text{forças}_{\text{empuxo}})(\text{forças}_{\text{inércia}})}{(\text{forças}_{\text{viscosas}})^2} = \frac{g \cdot \beta \cdot (T - T_{\infty}) \cdot x^3 \cdot \rho^2}{\mu^2}$$

Equação 6.05

Foram utilizadas as seguintes considerações e condições iniciais, freqüentemente utilizadas na literatura (KANNAN, SANDAKA, 2008; VARMA, KANNAN; 2006, GHANI, 2006; GHANI, FARID, 2006; CHEN, HUANG, GHANI, 2005; VARMA, KANNAN, 2005; FARID, GHANI, 2004; DENYS, PIETERS, DEWETTINK, 2004; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI, FARID, CHEN, 2002b;

GHANI, FARID, CHEN, 2002c; GHANI et al., 2001a; GHANI et al., 2001b; GHANI et al., 1999a; GHANI et al., 1999b; KUMAR, BHATTACHARYA, 1991; KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990):

- Temperatura inicial uniforme (obtida experimentalmente);
- Velocidades das correntes de convecção do fluido nos eixos x, y e z nulas em $t=0$;
- Velocidades das correntes de convecção do fluido nulas nas paredes da embalagem (*no slip condition*);
- Dissipação viscosa e geração interna de energia desprezíveis;
- A *Aproximação de Boussinesq* (relação entre a densidade do fluido e sua temperatura, Equação 2.24) é válida;
- Para os modelos de inativação microbiana, a difusão das células microbianas pelo alimento modelo é desprezível, sendo transportadas apenas pelas correntes de convecção natural formadas.

Como condição de contorno, considerou-se as temperaturas dos meios de aquecimento e/ou resfriamento, obtidas experimentalmente com dois termopares localizados próximos das garrafas, e os valores de $h_{\text{aquecimento}}$ e/ou $h_{\text{resfriamento}}$ previamente determinados.

A minimização do valor do raiz quadrada média do erro (*root mean square – RMS*) foi adotada como critério de convergência para as simulações, com valor máximo de 10^{-4} (VARMA, KANNAN, 2006). Utilizou-se intervalo de tempo (*timestep*) de 1,0 s nas simulações com água e 2,0 s nas simulações com CMC.

6.2.5.5. Cálculo de inativação microbiana

As reações químicas e bioquímicas (como inativação microbiana) envolvidas no tratamento térmico de alimentos possuem relação exponencial com a temperatura. Assim, mesmo pequenas diferenças de temperatura podem ser significativas ao longo do processo. Quando relacionadas à inativação microbiana,

resultando em cargas finais diferentes, elas podem ser críticas ao se considerar a natureza exponencial do crescimento microbiano (AUGUSTO et al., 2009; AUGUSTO, SANTANA e CRISTIANINI, 2008).

Dessa forma, destaca-se a importância da avaliação e comparação dos dados obtidos através dos modelos de CFD e experimentais não somente através de perfis térmicos, mas principalmente através da inativação microbiana, medida através do valor de esterilização médio da massa (F_m) ou redução decimal da contagem microbiana (γ) (Equações 6.06 e 6.07).

$$F_m = \gamma_{total} \cdot D_{Tref} = \left(\log \frac{C_{inicial}}{C_{final}} \right) \cdot D_{Tref} \quad \text{Equação 6.06}$$

O valor de γ foi medido no modelo individualmente para cada volume finito da malha ($\gamma_{(dV)}$), em cada *timestep* ($\gamma_{(dV,dt)}$). O γ de cada volume finito foi então somado durante todo o processo, sendo então somados os γ de todos os volumes finitos, como apresentado na Equação 6.07:

$$\gamma_{total} = \frac{1}{V} \int_{V_1}^{V_n} \left[\frac{1}{t} \int_{t_i}^{t_f} \gamma_{(dV,dt)} dt \right] \cdot dV \approx \frac{1}{V} \sum_{V_1}^{V_n} \left[\sum_{t_i}^{t_f} \gamma_{(dV,dt)} \right] \cdot dV \quad \text{Equação 6.07}$$

Sendo o $\gamma_{(dV)}$ calculado em cada *timestep* (dt) a partir da temperatura média do volume finito (T_{dV}) e cinética de inativação microbiana do *Lactobacillus*

plantarum (D_T e z) determinada no Capítulo 5, segundo a Equação 6.08 (derivada da Equações 2.08, 2.09 e 2.10, apresentadas no Capítulo 2):

$$\gamma_{dV} = \frac{dt}{D_{Tref} \cdot 10^{\frac{Tref - T_{dV}}{z}}} \quad \text{Equação 6.08}$$

6.3. Resultados e Discussões

6.3.1. Caracterização reológica do alimento modelo segundo modelo Newtoniano

À partir dos dados de escoamento obtidos no Capítulo 5 para o alimento modelo, forçou-se o ajuste dos mesmos segundo modelo Newtoniano, com variação da viscosidade descrita pela equação de Arrhenius (Equação 6.02). Utilizou-se para tal apenas os valores com taxa de deformação ($\dot{\gamma}$) inferiores a 10 s^{-1} . Os resultados foram analisados através de análise de variância (ANOVA) e Teste de Tukey ($p < 0,05$), utilizando-se o programa Statistica 5.5 (StatSoft, EUA). A Tabela 6.5 apresenta os valores de viscosidade obtidos a 25°C , 40°C , 60°C e 80°C , mostrando o bom ajuste das curvas obtidas, através dos valores de R^2 e a redução da viscosidade do sistema modelo com o aumento da temperatura. A Figura 6.6 apresenta a comparação entre os valores experimentais e obtidos através dos modelos Newtoniano e pseudoplástico, para a temperatura de 25°C . Observa-se a proximidade dos valores em taxas de deformação pequenas.

Tabela 6.5. Caracterização reológica da suspensões de CMC 0,3% utilizada, segundo modelo Newtoniano ($\tau = \mu\dot{\gamma}$)

T ($^\circ\text{C}$)	μ (Pa.s ⁿ)	R ²
25	0,056±0,000 ^a	0,996
40	0,043±0,002 ^b	0,996
60	0,031±0,001 ^c	0,999
80	0,024±0,003 ^d	0,940

* médias com as mesmas letras por coluna não apresentam diferença significativa ($p < 0,05$)

Figura 6.6. Comparação entre os valores experimentais e obtidos através dos modelos Newtoniano e pseudoplástico (25°C)

A Figura 6.7 apresenta a variação da viscosidade do sistema modelo em relação a temperatura, analisada segundo modelo Newtoniano. A partir da curva apresentada, determinou-se os parâmetros viscosidade de referência (μ_{ref}) e energia de ativação (E_a), constantes da equação de Arrhenius (Equação 6.02). Os valores obtidos foram, respectivamente, 13.536,0 J.mol⁻¹K⁻¹. e 0,00024 Pa.s.

Figura 6.7. Variação da viscosidade em relação a temperatura para a suspensão de CMC analisada segundo modelo Newtoniano

6.3.2. Avaliação do ângulo de rotação da área obtida na elaboração do modelo

A Figura 6.8 apresenta o número de volumes finitos (NVF) para os modelos obtidos à partir de ângulos de rotação de 360° , 90° , 45° , $22,5^\circ$ e $11,25^\circ$, assim como o tempo de processo (em horas) das simulações computacionais para a garrafa G2. Conforme esperado, observa-se claramente que o aumento do tamanho do modelo, gerado a partir de maior ângulo de revolução, resulta em maior número de volumes finitos e, conseqüentemente, maior tempo de processamento computacional. A simulação do modelo formado por 360° de rotação foi processada em 42,1h, contra 1,5h do modelo formado por $11,25^\circ$ de rotação (Processador AMD Athlon™ 64 3800+ (2.40 GHz, 512 KB), com memória RAM de 2 GB, 667 MHz).

Figura 6.8. Numero de volumes finitos (NVF) e tempo de processo das simulações computacionais para os modelos obtidos à partir de ângulos de rotação de 360° , 90° , 45° , $22,5^\circ$ e $11,25^\circ$ (G2)

A Figura 6.9 apresenta a história térmica experimental (média de quatro repetições) e dos modelos obtidos à partir de ângulos de rotação de 360° , 90° , 45° , $22,5^\circ$ e $11,25^\circ$ (G2, CMC com modelo pseudoplástico). Observa-se boa

correlação entre os dados, porém com desvio no começo do aquecimento. Essa diferença, também observada nos experimentos do Capítulo 3, pode ser atribuída às características aleatórias dos fluxos de fluido no início do aquecimento, como descrito por Ghani et al. (1999a), Datta e Teixeira (1988), Datta e Teixeira (1987), Brandon et al. (1984) e Brandon, Pelton e Staack (1982), assim como pela formação de *Células de Benard*. O desvio entre os valores também pode ser causado devido a presença do termopar durante os experimentos, resultando em desvios nas correntes do fluido (GHANI, 2006; GHANI e FARID, 2006; VARMA e KANNAN, 2006; GHANI, FARID, CHEN, 2002a; GHANI et al., 2001a; e KUMAR e BHATTACHARYA, 1991). Observa-se, no entanto, que tais desvios se relacionam a uma faixa de temperatura com letalidade desprezível, isto é, abaixo de 40°C.

Figura 6.9. História térmica experimental e dos modelos obtidos à partir de ângulos de rotação (θ) de 360°, 90°, 45°, 22,5° e 11,25° (G2, CMC com modelo pseudoplástico)

A Tabela 6.6 apresenta a diferença média de temperatura (MTD, Equação 6.04) e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ obtidas para G2 à partir de ângulos de rotação de 360°, 90°, 45°, 22,5° e 11,25° (processo de aquecimento e resfriamento, CMC com

modelo pseudoplástico). Ao se analisar os dados, observa-se a boa correlação entre os valores experimentais e obtidos através dos modelos de CFD. Wang, Tang e Cavalieri (2001) consideram bons valores de até 1,1°C. Tal resultado indica que a simetria axial da geometria possibilita a utilização de modelos menores, como o obtido à partir da rotação de 11,25°, para a análise do processo térmico do alimento modelo testado.

Tabela 6.6. Diferença média de temperatura (*mean temperature difference*, MTD) e razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ obtidas para G2 à partir de ângulos de rotação de 360°, 90°, 45°, 22,5° e 11,25° (processo de aquecimento e resfriamento, CMC com modelo pseudoplástico)

Ângulo de rotação – G2	360°	90°	45°	22,5°	11,25°
MTD (°C)	0,8	0,7	0,8	0,9	0,8
$F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$	1,0	1,0	1,0	1,1	1,0

Dessa forma, as análises realizadas à partir desse ponto foram realizadas com o modelo gerado à partir da rotação de 11,25°.

6.3.3. Avaliação do tratamento térmico de alimentos líquidos embalados

A Figura 6.10 apresenta os perfis térmicos do alimento modelo submetido ao aquecimento a 60°C / 7 min seguido de resfriamento a 30°C / 8 min para as garrafas G1 e G2. A Figura 6.11 apresenta as linhas de corrente (*streamlines*) de velocidade para o mesmo processo, para ambas as garrafas.

Figura 6.10. Perfis térmicos do alimento modelo (suspensão 0,3% de CMC) submetido ao aquecimento a $60^{\circ}\text{C}/7\text{min}$ seguido de resfriamento a $30^{\circ}\text{C}/8\text{min}$ para as garrafas G1 (imagens da direita) e G2 (imagens da esquerda)

Figura 6.11. Linhas de corrente (*streamlines*) de velocidade do alimento modelo (suspensão 0,3% de CMC) submetido ao aquecimento a $60^{\circ}\text{C}/7\text{min}$ seguido de resfriamento a $30^{\circ}\text{C}/8\text{min}$ para as garrafas G1 (imagens da direita) e G2 (imagens da esquerda)

Os perfis de temperatura e velocidade se mostraram adequados ao esperado segundo os dados descritos por Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008), Horn et al. (1997), Brandon et al. (1984), Engelman e Sani (1983), Brandon, Huling e Staack (1983) e Brandon, Pelton e Staack (1982), para aquecimento de água em garrafas. Entretanto, ao contrário do descrito por Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008), Ghani et al. (1999a), Datta e Teixeira (1988 e 1987), Brandon et al. (1984) e Brandon, Pelton e Staack (1982) para o aquecimento de água, não se observou as diversas correntes do fluido com distribuição e características aleatórias no início do processo (Figura 6.12). Tal diferença de comportamento pode ser atribuída à maior consistência do fluido analisado no presente trabalho, demonstrada pelo baixo *Número de Grashof* (Gr – Equação 6.05). Também por essa razão, observa-se que as velocidades das correntes de convecção envolvidas no aquecimento da suspensão de CMC são bem menores do que no aquecimento de água (AUGUSTO, PINHEIRO, CRISTIANINI, 2008).

Figura 6.12. Linhas de corrente (*streamlines*) de velocidade para aquecimento de água em G1 (esquerda) e G2 (direita) à 60°C: imagens com 20s e 30s de aquecimento, mostrando as correntes de fluido com características aleatórias (adaptado de Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008))

No início do processo, a camada de fluido em contato com o vidro absorve o calor transmitido e se aquece, diminuindo sua densidade. A diferença de densidade entre as porções do fluido resulta em uma força de empuxo, formando uma corrente ascendente de fluido (imagens de 30s e 60s) na extremidade das garrafas. Ao subir, a corrente de fluido se resfria, ficando mais densa, e então formando uma corrente descendente no centro da garrafa. Como o aquecimento da garrafa é realizado uniformemente pela sua base, topo e lateral, correntes aquecidas por essas regiões se encontram em determinados pontos, formando as *Células de Benard*, pequenas correntes circulares formadas devido ao encontro de duas ou mais correntes

Conforme o aquecimento continua, as correntes tendem a se estabilizar em dois principais fluxos, um maior, ascendente nas extremidades e descendente no centro da garrafa e um menor, uma *Célula de Benard* localizada na base e no eixo de simetria da garrafa, com sentido oposto ao primeiro (comportamento observado nas imagens de 180 s e 420 s). Esse comportamento é característico de fluidos aquecidos de forma uniforme em recipientes (GHANI et al., 1999a), sendo bem descrito por Chen (2006) e Chen, Huang e Ghani (2005). No caso da garrafa G2, observa-se ainda a formação de uma *Célula de Benard* na parte superior da garrafa, no começo do gargalo. Devido a brusca mudança de geometria nessa região, parte da corrente externa ascendente é desviada para baixo, enquanto outra parte, que sobe até o *headspace* continua sendo aquecida.

Quando a garrafa é submetida ao resfriamento (a partir de 420 s), a camada de fluido em contato com o vidro libera calor para o ambiente, ficando mais fria do que a camada do interior da garrafa. Com maior densidade, os fluxos no interior da garrafa são invertidos, ficando ascendente no interior e descendente nas extremidades (imagens à partir de 480s). A Figura 6.13 apresenta os vetores de velocidade do fluido em detalhe da garrafa G1 momentos antes do início do resfriamento (420 s) e após 30s (450 s), e as Figuras 6.14 e 6.150 apresentam para G2 os mesmos vetores, apresentando as regiões de *Célula de Benard*, nos mesmos intervalos de tempo.

Figura 6.13. Detalhe de G1 e vetores de velocidade do fluido momentos antes do início do resfriamento (420s) e após 30s (450s).

Figura 6.14. Detalhe de G2 e vetores de velocidade do fluido momentos antes do início do resfriamento (420s) e após 30s (450s).

Figura 6.15. Detalhe de G2 e vetores de velocidade do fluido momentos antes do início do resfriamento (420s) e após 30s (450s).

Conforme esperado, observou-se uma região de aquecimento mais lenta (RAML), em contraste com o ponto frio característico de aquecimentos de produtos condutivos, e com característica transiente. Durante o aquecimento, as correntes de convecção empurram a RAML para baixo, que, ao se estabilizar, representa uma região próxima a um toróide, situada entre 5% e 20% da altura do líquido (Figura 6.10, imagem de 420s), ao contrário da localização tradicionalmente considerada à um terço da altura da embalagem (33%) (KUMAR, BHATTACHARYA, BLAYLOCK, 1990). Esses resultados concordam com o obtido por diversos autores através de CFD, e explicados por Chen, Huang e Ghani (2005); ou experimentais, como em Zechman e Pflug (1989) e Brandon, Pelton e Staack (1982).

Após aquecimento, o resfriamento empurra a região mais quente, denominada região de resfriamento mais lento (RRML) para o topo (Figura 6.10, imagens de 480 s e 900 s). Em G1, a RRML aparenta um disco, localizada na superfície do fluido. Em G2, devido a corrente formada no início do gargalo (*Célula*

de Benard), a RRML aparenta um toróide localizada no estrangulamento da garrafa.

O acompanhamento e dimensionamento de tratamentos térmicos dependem de experimentos realizados nas condições de processo com termopares inseridos nas embalagens a serem avaliadas. Dessa forma, a escolha do local de permanência da junta do termopar, não deve ser aleatória. Em alimentos condutivos, é mantida no ponto frio do sistema. Em alimentos convectivos, como o aqui simulado, observa-se a existência não de um ponto frio, mas de uma RAML transiente. Torna-se necessário, portanto, a avaliação do perfil de inativação microbiana (γ) do processo, para escolha da região de menor valor (condição mais drástica).

A Figura 6.16 apresenta os perfis de inativação microbiana (γ) do processo, para as duas garrafas, no fim do aquecimento (420 s) e do resfriamento (900 s). As Figuras 6.17 e 6.18 apresentam detalhe das camadas do fluido próximas ao vidro para G1 e G2, respectivamente, no fim do processo. Observa-se que os perfis pouco se alteram ao longo do processo, e que a região de interesse, denominada de região de menor inativação microbiana (RMIM) se situa entre a base da embalagem e cerca de 20% da altura de líquido. Observa-se também que o gradiente final de inativação microbiana é bastante grande, para ambas garrafas. A inativação média final (Tabela 6.8) é decorrente da mistura de porções do líquido, sendo bastante influenciada pelas regiões de alta inativação microbiana da parte superior da embalagem. Essas regiões, além de concentrarem durante todo o processo a porção mais quente de fluido, também possuem afunilamento, com conseqüente maior relação área/volume e eficiência na transferência de calor.

Figura 6.16. Perfis de inativação microbiana (γ) do processo para G1 (imagens da direita) e G2 (imagens da esquerda) no fim do aquecimento (420s) e do resfriamento (900s).

Figura 6.17. Perfis de inativação microbiana (γ) do processo para G1 no fim do processo (900s): detalhe das camadas de fluido próximas ao vidro

Figura 6.18. Perfis de inativação microbiana (γ) do processo para G2 no fim do processo (900s): detalhe das camadas de fluido próximas ao vidro

6.3.4. Comparação entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentalmente

As Figuras 6.19 e 6.20 apresentam as histórias térmicas experimentais (média de quatro repetições) e dos modelos de CFD Newtoniano e pseudoplástico para G1 e G2, respectivamente. Observa-se que, à partir da análise das histórias térmicas, ambos modelos reológicos se mostraram bastante semelhantes, com aquecimento e resfriamento um pouco mais rápidos no modelo Newtoniano.

Observa-se também desvios maiores no modelo G1, devido a um aquecimento experimental mais lento do que o esperado (utilizando $h_{\text{aquecimento}}$ previamente medido). A diferença apontada no valor do h de aquecimento pode ser causada por alterações no fluxo de água de aquecimento dentro do banho-maria ou superestimativa do $h_{\text{aquecimento}}$.

Figura 6.19. História térmica experimental e dos modelos de CFD Newtoniano e pseudoplástico para G1

Figura 6.20. História térmica experimental e dos modelos de CFD Newtoniano e pseudoplástico para G2

Por maior cuidado que se tenha tido na padronização dos experimentos, é possível que pequenas alterações no posicionamento das garrafas de teste e de

carga dentro do banho-maria tenha acontecido entre os experimentos de determinação do $h_{\text{aquecimento}}$ e os experimentos finais aqui descritos. Como já mostrado no Capítulo 3, mesma pequenas alterações na geometria das garrafas resultaram em valores de h bastante diferentes, tanto no aquecimento quanto no resfriamento. Dessa forma, é esperado que eventuais alterações na disposição das garrafas dentro do banho-maria de aquecimento possa ter resultado em desvios entre o valor de $h_{\text{aquecimento}}$ medido e o resultante nos experimentos aqui apresentados.

As curvas para G2 apresentaram comportamento mais próximo, porém com desvio no começo do processo. Assim como observado anteriormente, atribui-se tais desvios às características aleatórias dos fluxos de fluido no início do aquecimento e presença do termopar durante os experimentos, resultando em desvios nas correntes do fluido. Observa-se, no entanto, que tais desvios se relacionam a uma faixa de temperatura com letalidade desprezível, isto é, abaixo de 40°C.

6.3.4.1. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais

Embora a CFD tem sido utilizada por diversos autores para avaliação de processos térmicos de alimentos embalados, poucos trabalhos tem realizado a validação do modelo utilizado com dados experimentais de forma apropriada.

A comparação quantitativa de perfis de temperatura obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD é realizada apenas nos trabalhos de Krishnamurthy et al. (2008), Dilay et al. (2006), Horn et al. (1997) e Brandon, Huling e Staack (1983). A comparação dos dados de inativação microbiana ou semelhante, obtidos experimentalmente e através de modelos de CFD, é realizada apenas nos trabalhos de Ghani, Farid e Chen (2002b) e Ghani, Farid e Chen (2002c) com aquecimento de sopas em bolsas autoclaváveis (*pouches*), através da inativação microbiana e destruição de ácido ascórbico, respectivamente.

Os trabalhos de Ghani (2006), Ghani e Farid (2006), Chen et al. (2005), Varma e Kannan (2005), Farid e Ghani (2004), Ghani, Farid e Chen (2002a), Ghani et al. (2001b), Ghani et al. (1999b), Ghani et al. (2001b), Kumar e Bhattacharya (1991), Kumar, Bhattacharya e Blaylock (1990), Datta e Teixeira (1988), Brandon et al. (1984) e Engelman e Sani (1983), com simulação do aquecimento de água e CMC em latas, garrafas e bolsas autoclaváveis (*pouches*), não realizam nenhum tipo de validação com dados experimentais.

Os trabalhos de Kannan e Sandaka (2008), Varma e Kannan (2006), Denys, Pieters e Dewettink (2005), Denys, Pieters e Dewettink (2004), Ghani et al. (2001a), Wang, Sakai e Hanzawa (2000), Ghani et al. (1999a), Datta e Teixeira (1987) e Brandon, Pelton e Staack (1982) fazem a comparação dos valores obtidos através do modelo apenas através da avaliação visual do perfil térmico de determinado ponto do alimento. Embora os autores considerem que os modelos obtidos descrevem bem as condições experimentais, a observação dos gráficos apresentados inferem diferenças de temperatura de cerca de 5°C para simulações de aquecimento de água e CMC em latas (KANNAN, SANDAKA, 2008; GHANI et al., 2001a; GHANI et al., 1999a) e cerca de 4°C para aquecimento de ovos (DENYS, PIETERS, DEWETTINCK, 2004).

Krishnamurthy et al. (2008) simularam o aquecimento por infravermelho de leite através de CFD. Segundo os autores, o modelo descreveu bem as curvas de aquecimento, embora tenham sido observadas diferenças entre os valores experimentais e do modelo de até 5,2°C, com diferença média relativa de 5,1%.

Dilay et al. (2006) simularam o aquecimento de água em garrafas, em processo semelhante à pasteurização de cervejas. Observaram diferenças entre os valores experimentais e do modelo de até 4°C na faixa de temperatura de 30°C a 40°C, e de até 2°C na faixa entre 50°C e 60°C.

Horn et al. (1997) simularam o processamento de água em garrafas, em processo semelhante à pasteurização de cervejas. Calcularam a diferença entre os valores experimentais e por modelo de CFD através do valor de esterilização (Equação 6.3, medidas em Unidades de Pasteurização) de um ponto, utilizando valores de coeficiente térmico (z) e temperatura de referência (T_{ref}) de 6,94°C e

60°C, respectivamente. Os modelos avaliados apresentaram valor de F_p até 20% inferiores aos obtidos experimentalmente.

De forma semelhante, os modelos de Brandon, Pelton e Staack (1983) para o processamento de água em garrafas apresentam valor de F_p até 10% inferiores aos obtidos experimentalmente. Os autores, no entanto, não apresentam o valor do coeficiente térmico (z) utilizado nos cálculos de F_p .

As Tabelas 6.7, 6.8 e 6.9 apresenta a avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais, segundo os parâmetros comparativos utilizados por Krishnamurthy et al. (2008), Dilay et al. (2006), Wang, Tang e Cavalieri (2001) e Horn et al. (1997). Observa-se primeiramente que os modelos que adotaram modelo reológico pseudoplástico se aproximam mais dos valores experimentais do que os com modelo Newtoniano, e que os modelos melhor descrevem o processo em G2 do que em G1.

Tabela 6.7. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais através de parâmetro comparativo utilizado por Wang, Tang e Cavalieri (2001) (MTD) *

	Modelo Reológico	MTD (°C)
G1	Pseudoplástico	1,0
	Newtoniano	1,5
G2	Pseudoplástico	0,6
	Newtoniano	0,7

* MTD = Diferença média de temperatura (*mean temperature difference*), Equação 6.04

Tabela 6.8. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais através de parâmetro comparativo utilizado por Krishnamurthy et al. (2008) e Dilay et al. (2006) ($\Delta T_{\text{máx}}$ (°C) e $\Delta T_{\text{relativo}}$ (%)) *

	Modelo Reológico	Processo inteiro	$\Delta T_{\text{máx}}$ (°C)		$\Delta T_{\text{relativo}}$ (%)	
			T>40°C	T>50°C	Máx	Med
G1	Pseudoplástico	2,4	1,8	1,3	6,9	1,9
	Newtoniano	3,4	2,4	2,0	10,3	2,8
G2	Pseudoplástico	2,9	1,4	0,4	9,0	1,2
	Newtoniano	4,0	2,2	1,1	12,2	2,0

* $\Delta T_{\text{máx}}$ = maior valor de $(T_{\text{modelo}} - T_{\text{experimental}})$, avaliado em todo o processo (TP) e na faixa de temperatura acima de 40°C (T>40°C); $\Delta T_{\text{relativo}} = 100 \cdot (T_{\text{modelo}} - T_{\text{experimental}}) / T_{\text{experimental}}$, avaliados o valor máximo (Max) e médio (Med)

Tabela 6.9. Avaliação quantitativa dos desvios entre os perfis térmicos obtidos pelos modelos e experimentais através de parâmetro comparativo utilizado por Horn et al. (1997) (Fp)*

	Modelo Reológico	$F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$	
		$T_{\text{ref}} = 55^{\circ}\text{C}$ z=8,9°C	$T_{\text{ref}} = 60^{\circ}\text{C}$ z=6,94°C
G1	Pseudoplástico	1,29	1,39
	Newtoniano	1,47	1,67
G2	Pseudoplástico	1,01	1,01
	Newtoniano	1,15	1,21

* $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$ segundo Equação 6.03, calculados com $T_{\text{ref}} = 55^{\circ}\text{C}$ z=8,9°C (dados obtidos no Capítulo 5) e $T_{\text{ref}} = 60^{\circ}\text{C}$ z=6,94°C (dados de Horn et al. (1997))

Os valores da diferença média de temperatura (MTD) apresentados para os modelos variaram de 0,6°C a 1,5°C. Wang, Tang e Cavalieri (2001) observaram valores de até 1,1°C no aquecimento de alimentos condutivos, considerando tal nível de desvio satisfatório. Os modelos pseudoplásticos aqui apresentados resultaram em MTD de 1,0°C para G1 e 0,6°C para G2, contra 1,5°C (G1) e 0,7°C (G2) dos modelos Newtonianos. Observa-se, portanto, que os modelos obtidos descrevem de forma satisfatória os processos experimentais, sendo que os modelos reológicos pseudoplásticos são mais adequados do que os Newtonianos.

Os desvios máximos obtidos entre os valores de temperatura experimentais e dos modelos ($T_{\text{modelo}} - T_{\text{experimental}}$) foram de 2,4°C a 4,0°C, próximos ou inferiores aos obtidos por Krishnamurthy et al. (2008) (até 5,2°C) e Dilay et al. (2006) (até 4,0°C) e nos valores inferidos dos trabalhos de Kannan e Sandaka (2008), Ghani et al. (2001a) e Ghani et al. (1999a) (cerca de 5°C) e Denys, Pieters e Dewettinck (2004) (cerca de 4°C). Tais desvios se mostraram menores nas temperaturas de maior letalidade, de 1,8°C a 2,4°C para temperaturas acima de 40°C e 0,4°C a 2,0°C para temperaturas acima de 50°C, valores próximos dos obtidos por Dilay et al. (2006).

Os desvios relativos médios obtidos entre os valores de temperatura experimentais e dos modelos (valor médio em cada *timestep* de $[100 \cdot (T_{\text{modelo}} - T_{\text{experimental}}) / T_{\text{experimental}}]$) foram de 1,2 a 2,8%, valores inferiores aos 5,1% obtidos por Krishnamurthy et al. (2008). Akterian e Fikiin (1994) observam que valores menores que 10% podem ser assumidos como adequados para requerimentos de engenharia.

Comparando-se os resultados obtidos em relação a razão $F_{\text{modelo}}/F_{\text{experimental}}$, segundo valores de z e temperatura de referência utilizadas por Horn et al. (1997) ($z = 6,94^\circ\text{C}$ e $T_{\text{ref}} = 60^\circ\text{C}$), observa-se desvio relativamente grande para G1 (1,39, modelo pseudoplástico; 1,67, modelo Newtoniano), e satisfatório para G2 (1,01, modelo pseudoplástico; 1,21, modelo Newtoniano), quando comparados aos valores obtidos pelos autores (até 0,80).

Ao se comparar essa razão em relação a cinética de inativação de *Lactobacillus plantarum* previamente determinada ($z = 8,9^\circ\text{C}$ e $T_{\text{ref}} = 55^\circ\text{C}$, Capítulo 5), tais valores se apresentam como 1,29 (modelo pseudoplástico) e 1,47

(modelo Newtoniano) para G1, e 1,01 (modelo pseudoplástico) e 1,15 (modelo Newtoniano) para G2.

Dessa forma, ao se realizar a comparação entre os valores experimentais e obtidos com os modelos de CFD através das diferenças médias de temperatura (MTD), dos desvios máximos de temperatura em diversas faixas, desvios médios relativos de temperatura e razão entre valores de esterilização calculados nos pontos medidos para os valores experimentais e dos modelos, e comparando-se tais resultados com os disponíveis na literatura, observa-se boa correlação dos modelos obtidos com os processos em questão, com melhores correlações para os modelos reológicos pseudoplásticos. A avaliação quantitativa dos resultados sugerem a possibilidade de utilização da CFD para avaliação de perfis térmicos em processos térmicos de alimentos convectivos embalados.

No entanto, tendo como principal objetivo a inativação microbiana, a utilização de CFD para modelagem de processos térmicos deve ser validada também através dessas análises. Dessa forma, procedeu-se com a validação microbiológica do modelo, utilizando para tal os modelos obtidos segundo modelo reológico pseudoplástico.

6.3.5. Validação microbiológica dos modelos obtidos

A Tabela 6.10 apresenta a avaliação quantitativa da inativação de *Lactobacillus plantarum* no alimento modelo experimentalmente e através de CFD. A Figura 6.21. apresenta o *Box Whisker Plot* para os mesmos dados. Observa-se claramente que os resultados obtidos pelos modelos de CFD superestimam em cerca de 70% o valor de γ obtido, de forma semelhante para as duas garrafas.

Observa-se ainda que os valores de γ obtidos para G1 são 32% e 33% maiores que G2, em relação à média experimental e valores do modelo, respectivamente. Tais dados sugerem que mesmo pequenas variações entre as geometrias de G1 e G2 resultam em inativações microbianas diferentes, indicando a possibilidade de melhoria nos processos, particularmente em tempo e consumo

de energia, através de seleção da geometria de embalagem. Enfatizam também a necessidade de avaliação do processo para cada geometria utilizada, além da necessidade de maiores estudos em relação a influência da geometria da embalagem em processos térmicos. Esses resultados também estão de acordo com o apresentado por Augusto, Pinheiro e Cristianini (2008) para aquecimento com água.

Tabela 6.10. Avaliação quantitativa da inativação de *Lactobacillus plantarum* no alimento modelo experimentalmente e através de CFD *

Garrafa	$\gamma_{\text{experimental}}$	γ_{modelo}	$\gamma_{\text{modelo}} / \gamma_{\text{experimental}}$
G1	4,3 ± 0,3	7,4	1,73
G2	3,2 ± 0,3	5,6	1,72

* CMC 0,3%, modelo reológico pseudoplástico; dados nos valores experimentais se relacionam a média ± desvio padrão (quatro repetições)

Figura 6.21. *Box Whisker Plot* para a redução decimal de *Lactobacillus plantarum* (γ) no alimento modelo para os dados experimentais (“E”) e obtidos através dos modelos (“M”) de CFD para G1 (G1E, G1M) e G2 (G2E, G2M)

A comparação dos dados de inativação microbiana obtida experimentalmente e através de modelos de CFD, é realizada apenas no trabalho de Ghani, Farid e Chen (2002b). Em um trabalho posterior (GHANI, FARID, CHEN, 2002c), os autores realizam a validação do modelo através de comparação entre valores de destruição de ácido ascórbico, observando variação média de 4,5% entre os valores experimentais e obtidos por CFD.

Ghani, Farid e Chen (2002b) utilizaram a CFD para simulação de esterilização de sopas em bolsas autoclaváveis (*pouches*). Simularam a inativação térmica de *Bacillus stearothermophilus*. No processo de esterilização a 121°C, observaram variação na redução decimal microbiana (γ) entre os valores experimentais e obtidos pelo modelo de até 23%.

A validação microbiológica em modelos matemáticos utilizados na avaliação de processos térmicos para alimentos condutivos foi realizada por Santana (2007), Pinho e Cristianini (2005) e Rodríguez et al. (1996).

Santana (2007) simulou a esterilização de alimento cárneo úmido para animais de estimação em bolsas autoclaváveis (*pouches*). Na validação do modelo, utilizando *Clostridium sporogenes*, observou desvios de até 25% no valor de Fm para processos a 110°C, e até 11% nos processos a 115°C.

Pinho e Cristianini (2005) simularam a esterilização de alimento sólido infantil em recipientes de vidro, realizando validação microbiológica com *Bacillus stearothermophilus*. Observaram desvios de até 11% no valor de Fm para processos a 110°C, e até 27% nos processos a 115°C.

Rodríguez et al. (1996) simularam o processo térmico de concentrados de tomate em lata, realizando a validação microbiológica com *Bacillus coagulans*. Observaram desvios de até 23% no valor de Fm, observando que latas menores resultavam em maior desvio entre os valores experimentais e obtidos através do modelo matemático.

Observa-se, portanto, que os desvios obtidos no presente trabalho entre valores experimentais e obtidos através de modelagem matemática são consideravelmente mais altos que os apresentados na literatura. A maior diferença observada pode ser compreendida ao se avaliar que o presente trabalho

apresenta um processo térmico onde o valor de tempo de redução decimal do microrganismo avaliado, na temperatura de processo ($D_{T_{\text{processo}}}$) é relativamente baixo, principalmente ao se comparar com o tempo total de aquecimento.

Para o microrganismo avaliado (*Lactobacillus plantarum*) e temperatura de processo (60°C), o $D_{T_{\text{processo}}}$ obtido é de 10s. O tempo total de aquecimento do presente processo, 720 s, equivale a 72 vezes o $D_{T_{\text{processo}}}$.

No trabalho de Ghani, Farid e Chen (2002b), com simulação do processo de esterilização a 121°C , o $D_{121^{\circ}\text{C}}$ apresentado para o microrganismo avaliado (*Bacillus stearothermophilus*) é de 4,0 min. Dessa forma, o período de aquecimento utilizado (25min) corresponde a apenas 6,3 vezes o $D_{T_{\text{processo}}}$. Nos trabalhos de Santana (2007) e Pinho e Cristianini (2005), com alimentos condutivos, o período de aquecimento corresponde a apenas 1,4 a 5,4 vezes o $D_{T_{\text{processo}}}$.

Observa-se assim que erros maiores são esperados ao se trabalhar com processos que representem maior letalidade ao microrganismo alvo estudado. Nesses casos, mesmo pequenos desvios entre as temperaturas obtidas pelos modelos e as experimentais podem representar grande diferença no valor final de inativação microbiana, demonstrando a dificuldade em se realizar simulações de CFD para processos de pasteurização.

De fato, dos trabalhos de CFD apresentados na literatura com simulação de tratamentos térmicos em alimentos embalados, apenas os trabalhos de Dilay et al. (2006), Horn et al. (1997), Brandon et al. (1984), Engelman e Sani (1983), Brandon et al., (1983) e Brandon et al., (1982), se referem a processos de pasteurização em embalagens. Nenhum desses trabalhos realiza a validação experimental através de medidas de inativação microbiana, sendo que os modelos apresentados no presente trabalho se enquadram nas validações apresentadas pelos autores através da história térmica de um ponto do produto (item 6.3.4.1).

Observa-se assim que, embora a CFD tem se mostrado uma ferramenta promissora na análise de diversos problemas de processamento de alimentos, sua utilização na avaliação de tratamentos térmicos deve ser vista com cautela, principalmente em processos como o aqui apresentado, em que as temperaturas de processo possuem grande efeito letal para o microrganismo avaliado (valor de

D_T na temperatura de processo pequeno em relação ao tempo de processo), onde mesmo pequenos desvios entre as temperaturas do modelo e experimentais resultam em considerável inativação microbiana.

6.4. Conclusões

Através de modelagem matemática por fluidodinâmica computacional (CFD), simulou-se o processo de pasteurização de um alimento líquido modelo em duas garrafas comerciais. Os perfis de temperatura e velocidade se mostraram semelhantes aos reportados na literatura, sendo descritas as características do processo. A análise dos perfis de temperatura obtidos experimentalmente e através do modelo indicaram boa correlação das simulações de CFD, sugerindo a possibilidade de utilização da CFD para avaliação de perfis térmicos em processos térmicos de alimentos embalados. A análise de validação microbiológica, no entanto, indicou grande desvio entre os valores experimentais e obtidos pelo modelo, atribuído a baixa resistência térmica do microrganismo alvo utilizado nas condições de processo. No caso avaliado, mesmo pequenos desvios entre as temperaturas experimentais e obtidas por CFD podem resultar em grande desvio na inativação microbiana final, sugerindo que a utilização de CFD na avaliação de tratamentos térmicos deve ser vista com cautela, principalmente em processos como o apresentado no presente trabalho. A inativação microbiana em G1 se mostrou 70% maior do que em G2 para o mesmo processo realizado, tanto experimentalmente quanto nas análises de CFD. As diferenças entre os resultados obtidos para ambas as garrafas enfatizam a necessidade de avaliação do processo para cada geometria utilizada, além da necessidade de maiores estudos em relação a influência da geometria da embalagem em processos térmicos. Os resultados obtidos comprovam a necessidade de validação dos modelos obtidos através de avaliação de perfil térmico e inativação microbiológica.

6.5. Referências

ABDELRAHIM, K. A.; RAMASWAMY, H. S. High temperature/pressure rheology of carboxymethyl cellulose (CMC). **Food Research International**, v.28, n.3, p. 285-290, 1995,

AKTERIAN, S. G.; FIKIIN, K.. Numerical simulation of unsteady heat conduction in arbitrary shaped canned foods during sterilization processes. **Journal of Food Engineering**, v. 21, p. 343-54, 1994.

AUGUSTO, P. E. D.; CRISTIANINI, M. Avaliação de erros na determinação de histórias térmicas de produtos processados termicamente com registradores internos de temperatura. **Brazilian Journal of Food Technology**, (aceito para publicação), 2009

AUGUSTO, P. E. D.; PINHEIRO, T. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de fluidodinâmica computacional (CFD) na avaliação do efeito da geometria e orientação de garrafas no tratamento térmico de bebidas. In...VII Brazilian Meeting on Chemistry of Food and Beverages (BMCFB). **Anais...**, 2008.

AUGUSTO, P. E. D.; PINHEIRO, T. F.; TRIBST, A. A. L.; CRISTIANINI, M. Evaluation of methodologies for mathematical modeling of packaged conductive foods heat process. **International Journal of Food Engineering**, (aceito para publicação), 2009

AUGUSTO, P. E. D.; SANTANA, F. F.; CRISTIANINI, M. Utilização de modelagem matemática para avaliação dos efeitos da temperatura de processo e das propriedades térmicas na esterilização de alimentos. **Brazilian Journal of Food Technology**, v.11, n.2, p.159-168, 2008.

BRANDON, H.; PELTON, P.; STAACK, G. State-of-the-art methodology for evaluation of pasteurizer heating and cooling processes. **MBAA Technical Quaterly**, v.19, n.1, p.34-40, 1982.

BRANDON, H.; HULING, J.; STAACK, G. Computer simulation of pasteurizer performance. **MBAA Technical Quaterly**, v.20, n.1, p.39-46, 1983.

BRANDON, H.; GARDNER, R.; HULING, J.; STAACK, G. Time-dependent modeling of in-package pasteurization. **MBAA Technical Quaterly**, v.21, n.4, p.153-159, 1984.

CHEN, X. D.; HUANG, H. J.; GHANI, A. G. A. Thermal sterilization of liquid foods in a sealed container – developing simple correlations to account for natural convection. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n.1, article 5, 2005.

CRISTIANINI, M.; MASSAGUER, P. R. Thermal process evaluation of retortable pouches filled with conduction heated food. **Journal of Food Process Engineering**, v.25, p.395-405, 2002.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerical modeling of natural convection heating in canned liquid foods. **Transactions of the ASAE**, v. 30, n. 5, p. 1542-51, 1987.

DATTA, A. K.; TEIXEIRA, A. A.. Numerically predicted transient temperature and velocity profiles during natural convection heating of canned liquid foods. **Journal of Food Science**, v. 53, n. 1, p. 191-5, 1988.

DE ANGELIS, M.; DI CAGNO, R.; HUET, C.; CRECCHIO, C.; FOX, P. F.; GOBBETTI, M. Heat shock response in *Lactobacillus plantarum*. **Applied and Environmental Microbiology**, v.70, n.3, p.1336-1346, 2004.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Combined CFD and experimental approach for determination of the surface heat transfer coefficient during thermal processing of eggs. **Journal of Food Science**, v. 68, n. 3, p. 943-51, 2003.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis of combined conductive and convective heat transfer in model eggs. **Journal of Food Engineering**, v. 63, p. 281-90, 2004.

DENYS, S.; PIETERS, J. G.; DEWETTINK, K.. Computational fluid dynamics analysis for process impact assessment during thermal pasteurization of intact eggs. **Journal of Food Protection**, v. 68, n.2, p. 366-374, 2005.

DILAY, E.; VARGAS, J. V. C.; AMICO, S. C.; ORDONEZ, J. C. Modeling, simulation and optimization of a beer pasteurization tunnel. **Journal of Food Engineering**, v.77, n.3, p.500-513, 2006.

ENGELMAN, M. S.; SANI, R. L.. Finite-element simulation of an in-package pasteurization process. **Numerical Heat Transfer**, v. 6, p. 41-54, 1983.

FARID, M.; GHANI, A. G. A. A new computational technique for the estimation of sterilization time in canned food. **Chemical Engineering and Processing**, v.43, n.4, p.523-531, 2004.

FRANCHI, M.A.; SERRA, G.E.; SVILOSEN, J.; CRISTIANINI, M. Thermal death kinetics of bacterial contaminants during cane sugar and alcohol production. **International Sugar Journal**, v.105, n.1259, p. 527-530, 2003.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of natural convection heating of canned food by computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 41, p. 55-64, 1999a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. An investigation of deactivation of bacteria in a canned liquid food during sterilization using computational fluid dynamics (CFD). **Journal of Food Engineering**, v. 42, p. 207-14, 1999b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Thermal sterilization of canned food in a 3-D pouch using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 48, p. 147-56, 2001a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.; RICHARDS, P.. Numerical simulation of biochemical changes in a viscous liquid canned food during sterilization using computational fluid dynamics. **Food Australia**, v. 53, n. 1-2, p. 48-53, 2001b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Numerical simulation of transient temperature and velocity profiles in a horizontal can during sterilization using computational fluid dynamics. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 77-83, 2002a.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal inactivation of *Bacillus stearothermophilus* in food pouches. **Journal of Food Engineering**, v. 51, p. 221-8, 2002b.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.; CHEN, X. D.. Theoretical and experimental investigation of the thermal destruction of vitamin C in food pouches. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 129-43, 2002c.

GHANI, A. G. A.. A computer simulation of heating and cooling liquid food during sterilization process using computational fluid dynamics. **Association for Computing Machinery New Zealand Bulletin**, v. 2, n. 3. Disponível em <http://www.acm.org/chapters/acm_nz/bulletin/vol2/issue3/articles/v2i3id01.pdf>, acesso em 19/01/2007, 2006.

GHANI, A. G. A.; FARID, M. M.. Using the computational fluid dynamics to analyze the thermal sterilization of solid-liquid food mixture in cans. **Innovative Food Science & Emerging Technologies**, v. 7, p. 55-61, 2006.

HANZANA, T.; WANG, Q. H.; SUZUKI, M.; SAKAI, N.. Numerical analysis of slowest heating or cooling point in a canned food in oil. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 31, n. 3, p. 451-5, 1998.

HORN, C. S.; FRANKE, M.; BLAKEMORE, B.; STANNEK, W. Modeling and simulation of pasteurization and staling effects during tunnel pasteurization of bottled beer. **Food and Bioproducts Processing**, v.75, n.1, p.23-33, 1997.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. Rio de Janeiro: LTC, 2003.

KANNAN, A.; SANDAKA P. C. G. Heat transfer analysis of canned food sterilization in a still retort. **Journal of Food Engineering**, v. 88, n.2, p.213-228; 2008.

KRISHNAMURTHY, K.; JUN, S.; IRUDAYARAJ, J.; DEMIRCI, A. Efficacy of infrared heat treatment for inactivation of *Staphylococcus aureus* in milk. **Journal of Food Process Engineering**, v.31, n.6, p.798-816, 2008.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.; BLAYLOCK, J.. Numerical simulation of natural convection heating of canned thick viscous liquid food products. **Journal of Food Science**, v. 55, n. 5, p. 1403-1411, 1420, 1990.

KUMAR, A.; BHATTACHARYA, M.. Transient temperature and velocity profiles in a canned non-Newtonian liquid food during sterilization in a still-cook retort.

International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 34, n. 4/5, p. 1083-96, 1991.

KUMAR, A.; DILBER, I. Fluid flow and its modeling using computational fluid dynamics. In... SABLANI, S. S.; DATTA, A. K.; SHAFIURRAHMAN, M. (Ed.) **Handbook of food bioprocess modeling techniques**. Boca Raton: CRC Press, 2007.

LIDE, D. R.; FREDERIKSE, H. P. R. **CRC handbook of chemistry and physics**. Boca Raton: CRC Press, 76th ed., 1996.

MARTINS, R. C. Simple finite volumes and finite elements procedures for food quality and safety simulations. **Journal of Food Engineering**, v.73, n.4, p.327-338, 2006.

NORTON, T.; SUN, D. W. Computational fluid dynamics (CFD) – an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: a review. **Trends in Food Science and Technology**, v. 17, p. 600-20, 2006.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M. Three-Dimensional Mathematical Modeling of Microbiological Destruction of *Bacillus stearothermophilus* in conductive baby food packed in glass container. **International Journal of Food Engineering**, v.1, n. 2, p. 1-8, 2005.

PINHO, C.; CRISTIANINI, M. Método de otimização para determinação do coeficiente convectivo de transferência de calor em alimentos esterilizados em embalagem de vidro. **Brazilian Journal of Food Technology**, v. 9, n. 3, p. 157-63, 2006.

PORNCHALOEMPONG, P.; BALABAN, M. O.; TEIXEIRA, A. A.; CHAU, K. V.. Numerical simulation of conduction heating in conically shaped bodies. **Journal of Food Process Engineering**, v. 25, p. 539-55, 2003.

RODRÍGUEZ, R. D. P.; MARTÍNEZ, A.; RODRIGO, M.; SATÓN, J. Numerical method for prediction of final microbial load in inoculated cylindrical cans of tomato concentrated in a pilot plant. **International Journal of Food Science and Technology**, v.32, n.6, p.489-496, 1996.

SAMPEDRO, F.; RIVAS, A.; RODRIGO, D.; MARTÍNEZ, A.; RODRIGO, M. Pulsed electric fields inactivation of *Lactobacillus plantarum* in an Orange juice-milk based beverage: effect of process parameters. **Journal of Food Engineering**, v.80, n.3, p.937-938, 2007.

SANTANA, F. F. **Modelamento Matemático de Alimentos com Particulados pelo Método dos Elementos Finitos**. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Alimentos), Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), 2007.

SCOTT, G.; RICHARDSON, P.. The application of computational fluid dynamics in the food industry. **Trends in Food Science and Technology**, v. 8, n. April, p. 119-24, 1997.

SELMA, M. V.; SLMERÓN, M. C.; VALERO, M.; FERNÁNDEZ, P. S. Control of *Lactobacillus plantarum* and *Escherichia coli* by pulsed electric fields in MRS broth, nutrient broth and Orange-carrot juice. **Food Microbiology**, v.21, n.5, p.519-525, 2004.

SENGERS, J. V.; WATSON, J. T. R. Improved international formulations for the viscosity and thermal conductivity of water substance. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, v.15, n.4, p.1291-1314, 1986.

SHEARER, A. E. H.; MAZZOTTA, A. S.; CHUYATE, R.; GOMBAS, D. E. Heat resistance of juice spoilage microorganisms. **Journal of Food Protection**, v.65, n.8, p.1271-1275, 2002.

VARGA, S.; OLIVEIRA, J. C.; OLIVEIRA, F. A. R. Influence of the variability of processing factors on the F-value distribution in batch retorts. **Journal of Food Engineering**, v.44, n.3, p.155-161, 2000.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. Enhanced food sterilization through inclination of the container walls and geometry modifications. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 3753-62, 2005.

VARMA, M. N.; KANNAN, A.. CFD studies on natural convective heating of canned food in conical and cylindrical containers. **Journal of Food Engineering**, v. 77, p. 1024-23, 2006.

WANG, Q. Z.; SAKAI, N.; HANZAWA, T.. Numerical analysis of heat transfer of canned liquid foods containing fibers or particles during sterilization. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 33, n.5, p. 703-8, 2000.

WANG, S.; TANG, J.; CAVALIERI, R. P. Modeling fruit internal heating rates for hot air and hot water treatments. **Postharvest Biology and Technology**, v.22, n.3, p.257-270, 2001.

XIA, B.; SUN, D. W.. Applications of computational fluid dynamics (CFD) in the food industry: a review. **Computers and Eletronics in Agriculture**, v. 34, p. 5-24, 2002.

Conclusões Gerais

Conclusões Gerais

O presente trabalho avaliou diversas considerações em relação ao modelamento matemático da transferência de calor durante o tratamento térmico de alimentos líquidos embalados, especialmente relacionados às metodologias de determinação das condições de contorno e validações dos modelos de fluidodinâmica computacional (CFD).

Com base nos resultados obtidos, conclui-se que:

Mesmo pequenas diferenças entre geometrias de embalagens podem resultar em considerável diferença de coeficientes convectivos de transferência de calor (h) em sistemas de imersão em água. Tal fato fica evidenciado pelos resultados obtidos para os sistemas de aquecimento e resfriamento (Capítulo 3) de duas garrafas comerciais em banhos-maria, denominadas G1 ($2.150\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ para o aquecimento e $1.125\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$, para o resfriamento) e G2 ($1.450\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ para o aquecimento e $675\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ para o resfriamento).

A metodologia que utiliza produto condutivo para determinação do h através da resolução de um problema inverso de transferência de calor (*inverse heat transfer problem*) não se mostrou eficiente para produtos de baixa condutividade térmica (k , como o gel de agar utilizado) em sistemas de alto h (Capítulo 3). Nesse caso, avaliado através do número de *Biot*, a resistência térmica interna é proporcionalmente maior do que a resistência térmica da interface fluido-sólido, de forma que os perfis de temperatura obtidos pelo modelo tendem a se estabilizar à partir de determinado valor de h , comprometendo a determinação desse coeficiente. A metodologia utilizando água, embora mais demorada e com modelagem mais complicada, se mostrou mais eficiente, conseguindo determinar o h tanto do aquecimento como do resfriamento (Capítulo 3) de duas garrafas em sistema de imersão.

A avaliação da metodologia que considera h_{locais} ao longo da altura das garrafas não se mostrou relevante (Capítulo 3).

As metodologias que utilizam perfis de temperatura como condição de contorno para simulações de processos térmicos por CFD superestimam o fluxo

de calor trocado com o produto, podendo comprometer a segurança e conservação do mesmo (Capítulo 4). A metodologia que considera o fluxo de calor decorrente das condições de contorno h e perfil térmico do meio de aquecimento (T_∞) apresentaram boa concordância com os perfis térmicos experimentais, mostrando-se adequados à modelagem de processos térmicos de alimentos (Capítulos 4 e 6).

A suspensão de carboxi-metil-celulose (CMC, 0,3%, m/m,) utilizada no presente trabalho (Capítulo 5) pode ser utilizada como alimento modelo para estudos de transferência de calor em sucos de frutas. Sua caracterização reológica e avaliação da resistência térmica de um microrganismo alvo de processos de pasteurização nesse sistema (*Lactobacillus plantarum*) contribuem para estudos de processos térmicos de alimentos, devido à escassez desses dados na literatura.

Os perfis de temperatura e velocidade obtidos nas simulações de CFD do processo térmico do alimento modelo utilizado (Capítulo 6) se mostraram semelhantes aos reportados na literatura, sendo descritas as características do processo.

A análise dos perfis de temperatura obtidos experimentalmente e através do modelo indicaram boa correlação das simulações de CFD (Capítulo 6), sugerindo a possibilidade de utilização da CFD para avaliação de perfis térmicos em processos térmicos de alimentos embalados. A avaliação dos modelos formados por 1/1, 1/4, 1/8, 1/16 e 1/32 da geometria das embalagens, indicou que a simetria axial das garrafas possibilita a utilização de modelos menores, poupando esforço computacional.

A consideração de modelo reológico Newtoniano para o fluido pseudoplástico avaliado (suspensão de CMC 0,3%) resultou em maior desvio entre os resultados obtidos experimentalmente e através das simulações de CFD (Capítulo 6), quando comparados com a adoção formal da Lei da Potência.

A análise de validação microbiológica indicou grande desvio entre os valores experimentais e obtidos pelo modelo, atribuído a baixa resistência térmica do microrganismo alvo utilizado nas condições de processo (Capítulo 6). Devido a baixa resistência térmica do microrganismo avaliado, mesmo pequenos desvios

entre as temperaturas experimentais e obtidas por CFD podem resultar em grande desvio na inativação microbiana final, sugerindo que a utilização de CFD na avaliação de tratamentos térmicos deve ser vista com cautela, principalmente em processos como o apresentado no presente trabalho.

Os resultados obtidos comprovam a necessidade de validação dos modelos obtidos através de avaliação de perfil térmico e inativação microbiológica.

Sugestões para trabalhos futuros

Primeiramente sugere-se maior análise e exploração do efeito das geometrias e orientações de embalagens nas características de processos térmicos (efeito no coeficiente convectivo de transferência de calor – h ; e inativação microbiana), para fluidos com diferentes consistências e diferentes sistemas de transferência de calor (imersão, aspensão).

A obtenção e caracterização de alimentos modelos são extremamente desejáveis para estudos de tratamentos térmicos. Observa-se novamente a necessidade de determinação de resistências térmicas de microrganismos, enzimas e nutrientes nesses modelos.

Como principal sugestão, destaca-se a necessidade de realização de número maior de testes de validação microbiológica e de destruição de nutrientes de modelos de CFD, comparando-se microrganismos/nutrientes com baixa e alta resistência térmica nos processos avaliados.