

## Modelagem matemática aplicada à migração de substâncias em embalagens plásticas de alimentos

**Gilmar de Oliveira Veloso**

**Vanessa Schuh\***

Instituto Federal Catarinense Câmpus Concórdia, IFC – Câmpus Concórdia/SC  
89700-000, Concórdia, SC

E-mail: gilmar.veloso@ifc-concordia.edu.br

E.mail: vanessa\_pzo@hotmail.com

### RESUMO

Este trabalho resolve a equação de difusão de massa utilizando o método de Crank-Nicolson. O objetivo deste trabalho é aplicar a equação de difusão de massa em problemas de embalagens plásticas de alimentos para a determinação do perfil de concentração das substâncias migrantes em embalagens ativas a fim de compreender o processo de difusão de componentes.

O controle do processo de migração de componentes químicos presentes nas embalagens tem despertado interesse de diversos setores a fim de evitar a contaminação química. A migração é usualmente mensurada através de importantes técnicas experimentais, normalmente caras e trabalhosas.

A modelagem matemática e simulação numérica têm por objetivo principal, como ferramenta para o desenvolvimento dos processos em embalagens ativas, prever comportamentos dinâmico e estacionário do processo difusivo.

Com o intuito de contribuir com este importante tema, é apresentado um modelo matemático e aplicativo para estudar o comportamento do processo de difusão em embalagens plásticas. O modelo transiente e unidimensional na variável espacial é baseado na equação de difusão de massa com coeficiente de difusão, nesta etapa do projeto, constante, dada como:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}$$

sujeita a condição inicial  $C(x, 0) = C_0$

e condições de contorno:  $\frac{\partial C_A}{\partial x}(0, t) = 0$  e  $\frac{\partial C_A}{\partial x}(l, t) = 0$

onde  $C_A$  é a concentração da substância migrante [adimensional],  $D_{AB}$  é o coeficiente de difusão do migrante A para o meio simulante B,  $t$  é a variável temporal [s] e  $x$  é a variável espacial [m]

A equação de difusão foi discretizada pelo método de diferenças finitas, centrada na variável temporal, com uma malha de espaçamento constante na variável espacial. O método numérico utilizado é o método implícito de Crank-Nicolson e o sistema de equações tridiagonal gerado é resolvido pelo algoritmo de Thomas. O aplicativo foi desenvolvido em linguagem de programação Python. Como resultado, espera-se obter o perfil das concentrações de substâncias migrantes das embalagens em relação ao tempo e em relação a espessura da embalagem plástica.

**Palavra-chave:** Migração, Embalagem plástica, Simulação numérica, Diferenças finitas, Crank-Nicolson.

## **Referências**

- [1] A. Bejan, “Transferência de calor”, Editora Edgard Blücher Ltda, pp. 540, São Paulo, 1996.
- [2] M. C. C. Cunha, “Métodos Numéricos”, Editora UNICAMP, 2edição, Campinas, SP, 2003.
- [3] P. Suppakul, K. Sonneveld, S. W. Bigger, J. Miltz, Diffusion of linalool and methylchavicol from polyethylene-based antimicrobial packaging films, LWT, vol. 44, pp. 1888-1893, (2011).