

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E CIÊNCIA DE MATERIAIS

MARCO ANTÔNIO VASILIEV DA SILVA JÚNIOR

"Modelagem e simulação da secagem convectiva de materiais alimentícios via método de elementos finitos"

Pirassununga

2023

Marco Antônio Vasiliev da Silva Júnior

"Modelagem e simulação da secagem convectiva de materiais alimentícios via método de elementos finitos"

VERSÃO CORRIGIDA

Tese apresentada à Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências do Programa de Pós-Graduação de Engenharia e Ciências dos Materiais.

Área de Concentração: Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais Voltados à Agroindústria

Orientador: Prof. Dr. Gustavo Cesar Dacanal

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação, FZEA/USP, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Т

ſ

S586m	Silva Júnior, Marco Antônio Vasiliev da Modelagem e Simulação da secagem convectiva de materiais alimentícios via método de elementos
	finitos / Marco Antônio Vasiliev da Silva Júnior ; orientador Gutavo César Dacanal Pirassununga, 2023.
	143 f.
	Tese (Doutorado - Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência de Materiais) Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo.
	1. Secagem. 2. Encolhimento Volumétrico . 3. Modelagem e Simulação. 4. Análise de Textura. 5. Método de Elementos Finito. I. Dacanal, Gutavo César , orient. II. Título.

Permitida a cópia total ou parcial deste documento, desde que citada a fonte - o autor

Nome: Marco Antônio Vasiliev da Silva Júnior

Título: "Modelagem e simulação da secagem convectiva de materiais alimentícios via método de elementos finitos"

Data da Aprovação: 02 / 03 / 2023

Tese apresentada à Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências do Programa de Pós-Graduação de Engenharia e Ciências dos Materiais.

Área de Concentração: Desenvolvimento, Caracterização e Aplicação de Materiais Voltados à Agroindústria

Banca Examinadora: **Prof. Dr. Gustavo César Dacanal** Instituição: <u>Universidade de São Paulo - FZEA</u> Presidente da Banca Examinadora

Prof. Dr. Jefferson Luiz Gomes Correa

Instituição: Universidade Federal de Lavras, DCA - UFLA

Prof. Dr. João Cláudio Thoméo

Instituição: UNESP - Campus de São José do Rio Preto

Prof.^a Dr.^a Louise Emy Kurozawa

Instituição: Universidade Estadual de Campinas

Prof. Dr. Rogers Ribeiro

Instituição: Universidade de São Paulo - FZEA

PROJETO DE TESE DE DOUTORADO

Título: "Modelagem e simulação da secagem convectiva de materiais alimentícios via método de elementos finitos"

Agencia de fomento: Bolsa de estudos fornecida ao aluno pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

AGRADECIMENTOS

Primeiramente à Deus, por ter permitido que tivesse saúde durante os tempos de pandemia que tivemos durante a realização do doutorado e pela determinação para não desanimar durante a realização do trabalho.

Aos meus pais, Marco e Nadir, que me incentivaram nos momentos difíceis e sempre me apoiarem incondicionalmente para a realização dos meus sonhos e objetivos.

Às minhas irmãs e seus maridos que sempre se preocuparam comigo mesmo de longe e sempre acreditaram no meu potencial.

Aos meus queridos sobrinhos, Silvio, Letícia, Isabela e Felipe, por compartilharem o tempo de vocês comigo.

À minha amada namorada Beatriz, pela paciência quase que infinita, pela compreensão de todos os momentos e fases que passei durante a realização desse trabalho e por dividir comigo todos os momentos (os bons e os ruins) que passei até chegar nesse momento.

Ao meu Orientador e Professor, Prof. Dr. Gustavo Cesar Dacanal pelas correções, ensinamentos os quais me permitiram apresentar um melhor desempenho para a realização do meu doutorado e pelas lições pessoais e profissionais em todos os anos de convívio.

A todas as pessoas com quem convivi ao longo desses anos de mestrado e doutorado, que me incentivaram e que certamente tiveram impacto na minha formação profissional.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

"It's the questions we can't answer that teach us the most. They teach us how to think. If you give a man an answer, all he gains is a little fact. But give him a question and he'll look for his own answers."

Patrick Rothfuss, The Wise Man's Fear

RESUMO

SILVA JUNIOR, M. A. V. Modelagem e simulação da secagem convectiva de materiais alimentícios via método de elementos finitos, 2023, 142f, Tese (Doutorado)
– Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2023.

A secagem convectiva de materiais alimentícios permite a remoção de umidade por meio de fenômenos de transferência de calor e massa. Embora a secagem seja amplamente utilizada na indústria alimentícia, o desenvolvimento de pesquisas na área de modelagem e simulação resulta em produtos secos com qualidade padronizada. Adicionalmente, a elaboração de modelos matemáticos proporciona maior entendimento dos fenômenos físicos envolvidos e otimização das dos parâmetros operacionais quanto a economia de energia e rendimento de processo. Durante a secagem, o principal fenômeno é a remoção da umidade do sólido, mas outras transformações também são observadas, tais como: volume e forma da geometria inicial, e resistência mecânica do material. Além da aplicação em frutas, vegetais e ingredientes alimentícios, a secagem convectiva também é utilizada na desidratação de géis, filmes biodegradáveis, e produção de microcápsulas a partir de polímeros naturais. Em especial, os hidrogéis ou alimentos com elevado teor de umidade, sofrem grade redução de volume com a perda de umidade. O encolhimento volumétrico também é afetado pelas condições operacionais de temperatura, velocidade e umidade do material, as quais propiciam o empacotamento da matriz solida e alteração de propriedades mecânicas do sólido. Neste contexto, a elaboração de modelos matemáticos via métodos numéricos, permite descrever os fenômenos físicos acoplados, e predizer as condições operacionais otimizadas a uma determinada função objetivo. Este trabalho teve como objetivo a elaboração de modelos matemáticos que permitem descrever a secagem convectiva de alimentos e materiais com

elevado conteúdo de umidade, via método de elementos finitos (FEM), a fim de correlacionar a umidade do sólido, encolhimento volumétrico e propriedades mecânicas. Em um primeiro estudo, o modelo FEM acoplado a parâmetros mecânicos, obtidos a partir de ensaios de textura, permitiu simular os perfis de umidade e encolhimento de hidrogéis cilíndricos de amido-alginato, durante a secagem convectiva a 60 °C e 0,5 m/s. O maior encolhimento foi observado para modelo Textura-FEM, em hidrogéis com elevado conteúdo de umidade inicial. Este fenômeno pode ser explicado pela redução do modulo de elasticidade destes materiais nos instantes iniciais da secagem, e que proporcionou maior deformação do sólido. Em contrapartida, os hidrogéis com menor conteúdo de umidade inicial tiveram similares encolhimentos preditos, tanto para o modelo FEM, como para o modelo acoplado Textura-FEM. Em um segundo estudo, fatias de batata cortadas em cilindro, cubo, paralelepípedo e prisma foram submetidas a secagem convectiva, a 40-80 °C e 0,5 m/s. O modelo FEM, gerado em malha tridimensional e regime transiente, permitiu descrever os perfis de umidade e encolhimento com precisão, e então comparar o desempenho da secagem em relação às diversas geometrias. Adicionalmente, o modelo linear-Fick foi utilizado para obtenção dos valores de umidade critica. As fatias de batata apresentaram perfis de umidade versus tempo similares entre as geometrias iniciais. As fatias cilíndricas apresentaram maior encolhimento predito, seguido pelos cubos, prismas e paralelepípedos. A umidade critica das batatas esteve entre 1,79 e 2,43 kg \cdot kg⁻¹ db, sendo a umidade inicial esteve entre 4,60 e 5,87 kg·kg⁻¹ db. A elaboração de modelos numéricos que permitiu descrever adequadamente os fenômenos multifísicos existentes na secagem convectiva, tais como a perda de umidade, encolhimento volumétrico e propriedades mecânicas.

Palavras-chave: Secagem, Encolhimento, Modelagem e simulação, Analise de Textura, Método de elementos finitos.

ABSTRACT

SILVA JUNIOR, M. A. V. Modeling and simulation of convective drying of food materials via finite element method, 2023, 142f, Ph.D. thesis – Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2023.

The convective drying of food materials allows the removal of moisture through heat and mass transfer phenomena. Although drying is widely used in the food industry, the development of research in the area of modelling and simulation results in dry products with standardized quality. Additionally, the development of mathematical models provides greater understanding of the phenomena involved and the optimization of operational parameters with regard to energy savings and process yield. During drying, the main phenomena is the removal of moisture from the solid, but other transformations are also observed, such as: solid volume and shape of the initial geometry and mechanical resistance of the material. In addition to the application in fruits, vegetables and food ingredients, convective drying is also used in the dehydration of gels, biodegradable films, and production of microcapsules from natural polymers. In particular, hydrogels or foods with high moisture content suffer grid volume reduction with moisture loss. Volumetric shrinkage is also affected by the operating conditions of temperature, velocity, and moisture of the material, which provide the packaging of the solid matrix and alteration of mechanical properties of the solid. In this context, the elaboration of mathematical models via numerical methods allows describing the coupled physical phenomena, and predicting the operational conditions optimized to a given objective function. This work aimed to develop mathematical models that allow for the description of the convective drying of foods and materials with high moisture content, via the finite element method, in order to correlate solid moisture, volumetric shrinkage, and mechanical properties. In a first study, the FEM model coupled with mechanical

parameters, obtained from texture tests, allowed simulating the moisture and shrinkage profiles of cylindrical starch-alginate hydrogels during convective drying at 60 °C and 0.5 m/s. The greatest shrinkage was observed for texture-fem model, in hydrogels with high initial moisture content. This phenomenon can be explained by the reduction of the modulus of elasticity of these materials in the initial moments of drying, and which provided greater deformation of the solid. On the other hand, the hydrogels with lower initial moisture content had similar predicted shrinkage, both for the FEM model and for the Texture-FEM coupled model. In a second study, pieces of potato cut into cylinder, cube, parallelepiped and prism were subjected to convective drying at 40-80 °C and 0.5 m/s. The FEM model, built as three-dimensional mesh and transient regime, allowed to describe the moisture and shrinkage profiles accurately, and then compare the drying performance in relation to the various geometries. Additionally, the linear-Fick model was used to obtain critical moisture values. Potato pieces presented similar moisture versus time profiles. The cylindrical piece showed greater predict shrinkage, followed by cubes, prisms and parallelepiped. The critical moisture of the potatoes was between 1.79 and 2.43 kg·kg⁻¹ db, giving the initial moisture of between 4.60 and 5.87 kg·kg⁻¹ db. The development of numerical models that allowed to describe the multiphysics phenomena of convective drying, such as moisture loss, volumetric shrinkage and mechanical properties.

Keywords: Drying, Shrinkage, Modeling and simulation, Texture Analysis, Finite element method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Representação conceitual do processo de secagem em um material sólido.21				
Figura 2.2. Classificação dos materiais úmidos24				
Figura 2.3. Curvas de secagem mostrando os períodos de secagem para um sólido. (a)				
Umidade vs tempo; (b) Taxa de secagem vs tempo; (c) Taxa de secagem vs teor de				
umidade27				
Figura 2.4. Ilustração das representações: (a) Euleriano-Euleriano b) Euleriano-				
Lagrangiano36				
Figura 2.5. Esquema principal de uma análise CFD				
Figura 2.6. Diferentes tipos de água dentro dos materiais alimentares47				
Figura 2.7. Efeito da temperatura de transição vítrea em materiais submetidos a secagem.				
Figura 2.8. Principais maneiras de aplicar a carga para determinar o comportamento				
mecânico. (a) Tração; (b) Compressão; (c) Cisalhamento; (d) Torção51				
Figura 2.9. Gráfico mostrando a deformação elástica linear para ciclos de carga e				
descarga53				
Figura 2.10. Gráfico com exemplo mostrando o comportamento de deformação elástica				
não linear54				
Figura 2.11. Curvas de tensão e deformação dos testes de compressão dos dois tipos de				
amidos testados no trabalho e o ajuste adequado ao modelo hiperelásticos de Ogden.				
Figura 2.12. Comportamento mecânico dos géis de ágar sob compressão uniaxial e o uso				
do modelo hiperelástico de Ogden para descrever o comportamento57				
Figure 3.1. Scheme of the boundary conditions applied in case studies 1 and 275				
Figure 3.2. Shrinkage of polyhedral potatoes obtained via FEM model in case study 2.				
Figure 3.3. Experimental and predict moisture profiles obtained from models in case				
studies 1 and 2				
Figure 3.4. Experimental and predict drying rate profiles obtained from case studies 1				
and 2				
Figure 3.5. Shrinkage and specific area in relation to moisture ratio				
Figure 4.1. Preparation of gels in cylindrical geometry101				
Figure 4.2. Photograph of the TA XT plus texturometer				

Figure 4.3. Example of the sample used in uniaxial compression tests104
Figure 4.4. Scheme of the geometry used in the simulation of drying in a three-
dimensional FEM model106
Figure 4.5. Shrinkage of sample RC50 during convective drying
Figure 4.6. Gels in the texturometer submitted to uniaxial compression experiments.112
Figure 4.7. Uniaxial compression tests for collected starch-alginate samples114
Figure 4.8. Dimensionless relationship between elastic modulus and moisture loss rate
data and evaluation of the hardening coefficient
Figure 4.9. COMSOL simulation with experimental data extracted from texture test.120
Figure 4.10. Drying rate profiles obtained from the first order derivative121
Figure 4.11. Shrinkage simulated by study 1 and study 2123
Figure 4.12. Evaluation of shrinkage, moisture content and drying air flow profiles from
Texture-FEM model for RC50 samples124
Figura APÊNDICE A.1. Ilustração dos passos i, ii e iii do procedimento para formulação dos géis de amido de milho mais alginato de sódio
Figura APÊNDICE A.2. Ilustração dos passos iv, vi e viii do procedimento para
formulação dos géis de amido de milho mais alginato de sódio131
Figura APÊNDICE A.3. Ilustração dos passos ix e x do procedimento para formulação
dos géis de amido de milho mais alginato de sódio131
Figura APÊNDICE B.1. Qualidade de malha de elementos triangulares135
Figura APÊNDICE B.2. Discretização do corpo de prova cilíndrico no COMSOL
Multiphysics135
Figura APÊNDICE B.3. Ilustração para a construção da malha utilizando o refinamento
NORMAL no COMSOL Multiphysics136
Figura APÊNDICE B.4. Configuração da ferramenta de otimização para o
MESHBUILDER
Figura APÊNDICE B.5. Ilustração para a construção da malha utilizando o refinamento
NORMAL otimizado pelo MESHBUILDER no COMSOL Multiphysics138
Figura APÊNDICE B.6. Incremento da função objetivo de qualidade da malha, pelo
algoritmo "MESHBUILDER"138
Figura APÊNDICE C.1. Ensaios de compressão para os cilindros de batata após
secagem a 0, 60, 120 e 180 min140
Figura APÊNDICE D.1. Ensaios de compressão uniaxial para as amostras de amido-
alginato coletadas em intervalos de secagem de 0 a 5,75 horas142

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1. Códigos CFD comerciais comumente usados e seus recursos importantes.38
Tabela 2.2. Parâmetros do ajuste do Modelo de Ogden dos dois tipos de amidos testados
nos testes de compressão uniaxial56
Tabela 2.3. Parâmetros do ajuste do Modelo de Ogden das diferentes concentrações dos
Géis de Ágar58
Table 3.1. Summary of mathematical models for convective drying in case studies 1 and
270
Table 3.2. Common parameters of potato pieces
Table 3.3. Fixed parameters of convective drying
Table 3.4. Air and water properties related to temperatures at temperatures of 40, 60 and
80 °C
Table 3.5. Drying temperature, moisture content and partition coefficients. 81
Table 3.6. Results of time and critical moisture, effective diffusivity and statistical
parameters for case study 182
Table 3.7. Results of effective diffusivity for case study 2 and statistical parameters84
Table 4.1. Concentrations of corn starch and alginate suspensions and starch fractions
after the ionic gelation and drying step101
Table 4.2. Sample size and parameters applied to convective drying of starch-alginate
gels at a temperature of 60 °C110
Table 4.3. Uniaxial compression tests of gels at different moisture contents, produced
during convective drying115
Table 4.4. Shrink correction parameter used for the simulation of the second case study
called Texture-FEM model
Tabela APÊNDICE B.1. Coeficientes de construção da malha numérica no COMSOL
Multiphysics v5.2
Tabela APÊNDICE C.1. Coeficientes de Ogden obtidos para as fatias de batata durante
a secagem convectiva e 60 °C140
Tabela APÊNDICE D.1. Ensaios de compressão uniaxial de géis em diferentes
conteúdos de umidade, produzidos durante a secagem convectiva142

SUMÁRIO

AGRAD	DECIMENTOS	4		
EPÍGR A	AFE	5		
RESUM		6		
ABSTRACT				
	DE FIGURAS Ne tabei as	10 12		
SUMÁR	DE TABELAS	<u>14</u>		
1 CA	PITULO I: INTRODUCÃO GERAL	16		
1.1 Ap	resentação da tese	17		
Referên	cias	18		
2 CA	.PÍTULO II: FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	19		
2.1 Int	rodução	19		
2.2. Sec	aaem	20		
2.2 50	Fundamentos de secagem	20 20		
2.2.1	Conteúdo de umidade do sólido	20		
2.2.2	Mecanismos de transporte de umidade	25		
2.2.3	Cinética de Secagem	27		
23 Ma	delos matemáticos anlicados a secarem de réis e alimentos	29		
2.3.1	Modelos matemáticos aplicados a secagem	31		
2.3.2	Secagem e fluidodinâmica computacional (CFD)	32		
2.3.3	Equações governantes do CFD	33		
2.3.4	Métodos de discretização das equações diferenciais governantes de			
fluxo, calor	e transferência de massa	35		
2.3.5	Formulações matemáticas usadas no CFD	35		
2.3.6	Análise utilizando o CFD	39		
2.4 Sec	agem e encolhimento	41		
2.4.1	Secagem de géis e alimentos	41		
2.4.2	Encolhimento durante a secagem	42		
2.4.3	Características dos materiais quanto às propriedades mecânicas	44		
2.4.4	Mecanismo do Encolhimento	45		
2.4.5	Fatores que afetam o encolhimento do material durante a secagem.	46		
2.4.6	Definindo as propriedades mecânicas: Conceitos de Tensão e			
Deformação		50		
2.4.7	Deformação de sólidos hookianos	52		
2.4.8	Deformação de sólidos não-hookianos	53		
2.5 Te	xtura de géis e alimentos	58		
Referên	cias	60		

3 POTA	3 .TO	CH PO	APTER IV: MODELING OF CONVECTIVE DRYING OF LYHEDRONS	64
3	3.1	Int	roduction	65
3	3.2	Ma	terial and methods	66
	3.2	2.1	Material	66
3.2.2		2.2	Preparation of pieces of raw potato	66
	3.2	2.3	Convective drying trials	67
	3.2	2.4	Measurement of volumetric deformation and shrinkage	68
3	3.3	Ma	thematical modeling of drying kinetics	68
	3.3	3.1	Case study 1: Coupling constant drying rate period and diffusion	onal mass
trans	sfer			70
	3.3	3.2	Case study 2: Finite-elements computational modeling	72
	3.3	3.3	Statistical measurements	74
3	3.4	Res	sults and discussion	
_	3.4	4.1	Characterization of potato pieces in different geometries	
	3.4	1.2	Operational conditions of convective drying	77
	3.4	1.3	Convective drying experiments with shrinkage	
	3.4.4		Modeling and simulation of convective drying of potato pieces	
	3.4	4.5	Volumetric shrinkage of potatoes	
3	3.5	Co	nclusion	
Ν	Nom	enc	lature	92
F	Refe	reno	7es	
4	1	СН	APTER III: MATHEMATICAL MODELING OF HYDRO	GELS
VIA F	ΈM	MF	THOD AND TEXTURE ANALYSIS	97
4	4.1	Int	roduction	
4	1.2	Ma	terial and methods	100
	4.2	2.1	Material	100
	4.2	2.2	Preparation of starch-alginate suspensions and ionic gelling	100
	4.2	2.3	Convective drying of hydrogels	102
	4.2	2.4	Texture Analysis	103
	4.2	2.5	Evaluation of mechanical coefficients	104
	4.2	2.6	Mathematical modeling of convective drying via FEM method	105
	4.2	2.7	Evaluation of Shrinkage of hydrogels during drying	108
4	1.3	Res	sults and discussion	110
	4.3	3.1	Drying experiments of starch-alginate hydrogels	110
	4.3	3.2	Texture Analysis	112
	4.3	3.3	Evaluation of stiffening coefficient $(\beta - 1)$	117

ation of convective drying of cornstarch-alginate

1 CAPITULO I: INTRODUÇÃO GERAL

A secagem é descrita como uma operação unitária de remoção de umidade pela transferência simultânea de calor e massa entre o sólido úmido e o ar de secagem afim de produzir um produto sólido. A secagem é um método utilizado na preservação de alimentos, amplamente aplicado em diversos setores da indústria: tais como, farmacêutica, biotecnologia, cerâmicas, madeiras, produtos têxteis e polímeros (CASTRO; MAYORGA; MORENO, 2018; CRAPISTE; ROTSTEIN, 1997).

Na indústria alimentícia, a remoção do conteúdo de umidade acarreta em maior vida útil do produto, pois diminui a atividade de água e inibe o crescimento microbiano. Adicionalmente, há diminuição dos custos de transporte, armazenamento e custos com embalagens, devido à redução no peso e volume do produto final. Outro objetivo importante da secagem e que é utilizado pelos outros setores da indústria é atingir uma qualidade ótima dos produtos sem alterar as propriedades desejadas das matérias iniciais porque durante o processo de secagem, as matérias-primas podem sofrer alterações físicas, químicas e biológicas e essas quais podem afetar ou alterar alguns atributos naturais dessa matéria-prima.

Dentro da grande diversidade de tipos de secadores oferecidos no mercado (condução, convecção ou radiação), mais de 85% dos secadores são do tipo convectivo (MUJUMDAR, 2014). A secagem convectiva consiste na remoção do conteúdo de água de um sólido ou semi-sólido, mas a fim de produzir um produto com boa qualidade são necessários entender os mecanismos envolvidos em processos multifísicos, tais como a transferência de calor e massa, deformação da geometria, e resistência mecânica. (ACHCHAQ et al., 2016; MAYOR; SERENO, 2004). Devido ao grande número de variáveis nesta operação, a modelagem matemática pode ser utilizada como uma ferramenta para predizer tais variáveis e otimizar o processo com uma quantidade reduzida de experimentos. Um modelo matemático significa

descrever um processo através de uma equação diferencial parcial o qual pode ser resolvido por métodos numéricos (CASTRO; MAYORGA; MORENO, 2018).

A modelagem matemática permite fornecer previsões dos processos, extrair detalhes e obter novas ideias sobre o processo e o COMSOL *Multiphysics* é um *software* de modelagem e simulação que utiliza o método dos elementos finitos (FEM) para a resolução de problemas por exemplo na área de secagem. Nesse contexto, esta pesquisa teve como objetivo estudar os fatores de encolhimento e propriedades mecânicas com o conteúdo de umidade e dessa maneira formular um modelo matemático via COMSOL, capaz de predizer os fenômenos de transferência de calor e massa, resistência do material e modificação do volume de maneira acoplada.

1.1 Apresentação da tese

A tese de doutorado foi estruturada em quatro capítulos, como segue:

O capítulo 1 apresenta a introdução geral, objetivo e justificativas da pesquisa.

O capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica e embasamento científico, perante a bibliografia, que compõe os capítulos da tese.

O capítulo 3 apresenta os estudos de modelagem matemática e simulação da secagem convectiva para hidrogéis de amido-alginato.

O capítulo 4 apresenta os estudos de modelagem matemática e simulação da secagem convectiva de pedaços de batata cortados em diferentes geometrias.

Os Apêndices apresentam alguns estudos complementares sobre a modelagem matemática e simulação da secagem em material alimentício, além de ensaios preliminares que foram delineados durante a tese.

Referências

- ACHCHAQ, F. et al. Temperature and moisture effects on the failure mode of highly shrinkable raw catalyst supports. **Procedia Structural Integrity**, v. 2, p. 2283–2290, 2016. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.prostr.2016.06.286>.
- CASTRO, A. M.; MAYORGA, E. Y.; MORENO, F. L. Mathematical modelling of convective drying of fruits: A review. Journal of Food Engineering, v. 223, p. 152– 167, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2017.12.012>.
- CRAPISTE, G. H.; ROTSTEIN, E. Design and Performance Evaluation of Dryers. In: VALENTAS, K. J.; ROTSTEIN, E.; SINGH, R. P. (Ed.). Handbook of Food Engineering Practice. Boca Raton: CRC Press, 1997. 1p. 132–173.
- MAYOR, L.; SERENO, A. M. Modelling shrinkage during convective drying of food materials: a review. **Journal of Food Engineering**, v. 61, n. 3, p. 373–386, 2004. Disponível em: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0260877403001444>.

MUJUMDAR, A. S. Handbook of Industrial Drying. 4. ed. Boca Raton: CRC Press, 2014.

2 CAPÍTULO II: FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Introdução

O processo de secagem converte um sólido, semissólido, ou matéria prima líquida em um produto sólido por evaporação do líquido em uma fase de vapor através da aplicação de calor. É uma operação essencial em diversos setores industriais como setores farmacêuticos, de polímeros, cerâmicos, alimentícios entre outros.

Na indústria farmacêutica é uma operação de extrema importância porque a qualidade do produto final não pode ser comprometida então qualquer deterioração como decomposição térmica, oxidação no produto deve ser evitada. Na produção de polímeros é umas das principais operações de recuperação de polímero antes de ser enviado para as fábricas para seu uso. Na produção de cerâmicas a secagem é muito importante para projetar com precisão a moldagem e evitar fendas e deformações indesejáveis (MUJUMDAR, 2014). Em particular, a desidratação de alimentos e ingredientes alimentícios permite a redução da atividade de água e aumento da vida de prateleira, devido inibição do desenvolvimento de microrganismos e dessa maneira alcançando a qualidade desejada do produto. (TAMARIT-PINO et al., 2020).

Devido a grande variedade de utilização que o processo de secagem tem, é impossível que um único projeto possa ser aplicado para todas as mais diversas utilizações que essa operação tem. Neste aspecto é necessário voltar aos fundamentos da transferência de massa e calor, juntamente com o monitoramento de propriedades físico-químicas dos materiais, como a atividade de água, umidade de equilíbrio para o desenvolvimento de processos e do produto final.

Apesar de o processo de secagem ser extensamente estudado ao longo dos anos, existe ainda uma falta de estudos dedicados aos aspectos termo-hidro-mecânicos da secagem dos materiais. As deformações desses materiais como o encolhimento dos materiais, as tensões induzidas pela secagem, são temas promissores e que carecem de estudos nessa área.

Portanto o objetivo deste capítulo foi apresentar os fundamentos da secagem e fundamentos das deformações que ocorrem durante a secagem com livros e trabalhos científicos e contextualizar esta pesquisa em contraste a outros estudos encontrados na literatura.

2.2 Secagem

2.2.1 Fundamentos de secagem

A secagem é um processo de separação devido a transferência de energia na forma de calor e de massa destinado a remover um solvente na qual é geralmente água de um sólido, líquido ou um semi-sólido e é uma tecnologia industrial de grande importância prática em indústrias como a química, de polímeros, farmacêutica, de biotecnologia, papel e celulose, agricultura, processamento de alimentos, processamento de minerais e madeiras e de preparação de combustíveis (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

A remoção do conteúdo de umidade através da transferência simultânea de calor e massa entre um sólido úmido e o ar de secagem é chamado de secagem convectiva. Através de uma corrente de ar quente, a energia (calor) necessária é conduzida a matriz de secagem. O calor é transferido para a superfície do sólido através da convecção e logo em seguida é transferido para o interior do sólido por difusão ou convecção, dependendo da estrutura do sólido e devido a esse fluxo estabelecido há o aumento da temperatura do produto e evaporação da água. O conteúdo de umidade é transportado do interior do produto por mecanismos como pode-se citar a difusão e da superfície do produto para o ar na forma de vapor de água por convecção (CASTRO; MAYORGA; MORENO, 2018). Na Figura 2.1 podemos ver uma representação conceitual do que ocorre durante o processo de secagem.



Figura 2.1. Representação conceitual do processo de secagem em um material sólido.

Fonte: (SABAREZ, 2015).

Conforme observado anteriormente o processo de secagem necessita de calor para a vaporização do líquido e o calor pode ser fornecido por convecção (secadores diretos), por condução (secadores de contato ou indiretos), radiação, colocando o material úmido em um campo eletromagnético de micro-ondas. Mais de 85% dos secadores industriais são do tipo convectivo, com ar quente ou gases de combustão direta como meio de secagem (SABAREZ, 2015; APRAJEETA; GOPIRAJAH; ANANDHARAMAKRISHNAN, 2015; MUJUMDAR, 2014).

A secagem dos mais variados tipos de matérias-primas pode ter como objetivo o fácil manuseio do produto final; um aumento do tempo de preservação do produto devido a diminuição da atividade de água; maior facilidade no armazenamento pois o produto tem uma redução do tamanho inicial; redução com o custo de transporte e logística pois diminui o peso dos produtos finais e a obtenção da qualidade desejada do produto pois em muitos processos, condições de secagem inadequada pode causar danos irreversíveis à qualidade do produto, e, portanto, um produto sem valor comercial.

De acordo com Mujumdar (2014), Dinçer e Zamfirescu (2016) a secagem possui características únicas e a qual tornam ela, uma área promissora para pesquisas. Em pesquisas na área de engenharia foi estudado recentemente a interação entre os danos induzidos pela carga no concreto e suas deformações de tempo não elásticas, retração de secagem através de uma simulação 3D de elementos finitos em mesoescala (OŽBOLT; GAMBARELLI; ZADRAN, 2022). Um extenso estudo de revisão foi realizado sobre a modelagem matemática do processo de secagem em produtos alimentícios a fim de otimizar processos (CASTRO; MAYORGA; MORENO, 2018). As pesquisas sobre a secagem se aplicam a áreas multidisciplinares, devido a particularidade da matéria prima e finalidade de aplicação.

Para compreender os processos de secagem é necessário o entendimento e aplicação da termodinâmica, transferência de calor, massa, ciências dos materiais, cinética química. Alguns processos específicos que ocorrem durante a secagem devem ser considerados na análise, como o encolhimento, alteração da textura, formações de tensões de secagem, alteração de porosidade e fratura, transição vítrea e para esses processos ainda existe uma grande possibilidade de estudos para as mais diversas áreas (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

Portanto estudar o processo de secagem se torna importante para atingir o grande objetivo nesse setor tecnológico, o qual é tornar os processos de secagem mais eficientes, econômicos e sustentáveis. Para isso é necessário que métodos de otimização sejam aplicados a esses processos.

2.2.2 Conteúdo de umidade do sólido

Normalmente os materiais usados nos processos de secagem são chamados de materiais úmidos e dependendo do estado que a água se encontra dentro desses materiais, estes podem adquirir diferentes propriedades físicas, estruturais, mecânicas, químicas, bioquímicas. Embora todas essas propriedades possam influenciar significativamente o processo de secagem e determinar a seleção da técnica e tecnologia de secagem, as mais importantes na prática são as propriedades estruturais-mecânicas, o tipo de umidade nos sólidos e a ligação material-umidade (MUJUMDAR, 2014).

Os materiais úmidos são classificados em três categorias com base em seu comportamento com relação à secagem (Figura 2.2):

- *i. materiais coloidais;*
- *ii. materiais capilares-porosos;*
- *iii. materiais coloidais-capilares-porosos.*



Figura 2.2. Classificação dos materiais úmidos.

Fonte: Adaptado de (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

Os materiais coloidais mudam de tamanho, mas preservam suas propriedades elásticas durante a secagem (por exemplo, gelatina, ágar). Os materiais capilares porosos, se tornam frágeis, encolhem ligeiramente e podem ser facilmente moídos após a secagem (por exemplo, areia, carvão vegetal, café). Os materiais coloidais-capilares-porosos têm as propriedades dos dois tipos acima. As paredes dos capilares são elásticas, e incham durante a secagem (por exemplo, alimentos, madeira, papel, couro). Estes materiais são capilares porosos no que diz respeito à sua estrutura e coloidais no que diz respeito às suas propriedades (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

Existe uma classificação alternativa de materiais secos, que se baseia nos estados de umidade nos sólidos:

- i. materiais não higroscópicos;
- *ii. materiais parcialmente higroscópicos;*
- iii. materiais higroscópicos.

Os materiais não higroscópicos não contêm umidade ligada. Estes materiais incluem corpos não porosos ou porosos com raios porosos maiores que 10⁻⁷ m. Materiais parcialmente higroscópicos incluem corpos com macroporosos que, embora também tenham umidade ligada, exercem uma pressão de vapor que é apenas ligeiramente menor do que a exercida por uma superfície de água livre. Os materiais higroscópicos podem conter umidade ligada. Estes materiais cobrem principalmente corpos com microporosos nos quais o líquido exerce uma pressão de vapor que a do líquido puro à temperatura determinada (MUJUMDAR, 2014).

Há vários tipos de umidade em materiais úmidos. A umidade da superfície é um líquido que se forma como um filme externo sobre o material devido aos efeitos de tensão superficial. A umidade não ligada, livre ou capilar é a umidade não ligada em um material higroscópico em excesso do teor de umidade de equilíbrio correspondente à umidade de saturação. Toda a umidade em um material não higroscópico é água não ligada. A umidade ligada, higroscópica ou dissolvida é o líquido que exerce uma pressão de vapor menor do que o do líquido puro à temperatura determinada. O líquido pode ficar preso por retenção em pequenos capilares, por solução em paredes de células ou fibras, por solução homogênea em todo o sólido e por adsorção química ou física em superfícies sólidas (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

2.2.3 Mecanismos de transporte de umidade

Para que ocorra o processo de secagem a umidade presente no material a ser seco precisa migrar até a superfície e existem vários mecanismos pelos quais isso pode ocorrer como estão listados abaixo (SABAREZ, 2015; MUJUMDAR, 2014; GENSKOW et al., 2008):

i. Difusão de umidade através de sólidos:

Esse tipo de mecanismo é um processo molecular causado pela movimentação aleatória de cada molécula. As moléculas tem a tendência de difundir de uma região de maior umidade para a região de menor umidade a fim de reduzir o gradiente de umidade até igualar a concentração de umidade.

Difusão líquida, se o sólido úmido estiver a uma temperatura abaixo do ponto de ebulição do líquido; Difusão de vapor, se o líquido vaporizar dentro do material; Difusão de Knudsen, se a secagem ocorrer em temperaturas e pressões muito baixas, por exemplo, na liofilização; Diferenças de pressão hidrostática, quando as taxas de vaporização interna excedem a taxa de transporte de vapor através do sólido para os arredores

ii. Convecção da umidade em um líquido ou pasta.

Nesse mecanismo se uma solução líquida ou uma pasta estiver sendo seca até ficar sólido, então o movimento de convecção de umidade dentro do material traz o material mais úmido para superfície.

iii. Evaporação da umidade dentro do sólido e o transporte do gás para fora do sólido por difusão ou convecção.

É possível ocorrer evaporação dentro do material se ele estiver fervente ou poroso e o vapor formado então deve sair por difusão ou convecção respectivamente

iv. Fluxo capilar em meio poroso.

Nesse mecanismo ocorre a redução de pressão do líquido quando ele entra em poros de dimensão pequena e então devido a tensão superficial faz com que o líquido flua em meios porosos por capilaridade.

v. Combinações dos mecanismos previamente citados.

Os mecanismos de secagem podem ser descritos por modelos multifísicos acoplados.

2.2.4 Cinética de Secagem

Em um processo de secagem, o teor de umidade é geralmente determinado com base no material seco. A curva de secagem e como ela se modifica durante a secagem é a informação mais básica e importante que pode-se determinar da secagem e ela pode ser afetada pelo tipo de material, pela espessura do material, propriedade do material e condições de secagem (como temperatura, velocidade do ar, umidade relativa do ar ambiente) (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

Dados experimentais de uma operação de secagem são comumente representados como uma curva de secagem (Conteúdo de umidade vs tempo) ou taxa de secagem (*Nw*) a qual representa a derivada do gráfico de teor de umidade (MUJUMDAR, 2014). A Figura 2.3 representa a curva de secagem e taxa de secagem por área e como são normalmente obtidos no processo de secagem.

Figura 2.3. Curvas de secagem mostrando os períodos de secagem para um sólido. (a) Umidade vs tempo; (b) Taxa de secagem vs tempo; (c) Taxa de secagem vs teor de umidade.



Fonte: (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

As características das curvas de secagem são chamadas de períodos de secagem e são divididos, mas deve-se salientar que nem todos esses períodos de secagem ocorrem diferentes processos de secagem. Na Figura 2.3.a é possível observar o primeiro período do processo (dado pela curva A-B) que é o estágio de aquecimento de um sólido durante o qual as condições da superfície sólida entram em equilíbrio com o ar de secagem. Durante essa etapa, o sólido úmido pode levar mais umidade ao invés de iniciar a secagem, dependendo das condições de secagem, mas eventualmente, a superfície atinge condições para que a umidade difunda para fora do produto. Essa etapa é governada por processos de transição de transferência de calor, o qual em função do número de Biot, pode ser difusiva ou convectiva (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016).

A curva B-C é o segundo período de secagem e mostra uma redução do teor de umidade que é praticamente linear no tempo e é conhecido como período de taxa constante pois nessa fase, a área da superfície do sólido saturada de água diminui gradualmente. O ponto C, onde é o período de taxa constante termina, é conhecimento como ponto crítico de umidade.

Durante o período da curva B-C a superfície do sólido se encontra molhada o suficiente manter a temperatura da superfície na temperatura de bulbo úmido e assim todo o calor transferido do ar de secagem é utilizado para evaporação da água na superfície, mas na grande parte dos produtos alimentícios esse período de taxa constante não é encontrado. Em alguns alimentos esse período pode ser mascarado e é chamado de período de taxa pseudo-constante que é quando ocorre o decréscimo constante na curva de secagem, mas não devido a evaporação da água e sim por causa do encolhimento do produto e isso ocorre porque o tempo para alcançar a temperatura de bulbo úmido é grande, ou a superfície do sólido não se encontra totalmente molhada ou quantidade de água que migra para a superfície do sólido é limitada, ou seja a superfície não se encontra totalmente molhada, e então o produto encolhe juntamente com a perda de água (CRAPISTE; ROTSTEIN, 1997).

Quando toda a umidade saturada da superfície do sólido é completamente retirada, temos o período da curva C-D o qual é conhecido como período de taxa de queda. A partir do ponto crítico de umidade o teor de água na superfície do sólido diminui e a temperatura aumenta acima da temperatura de bulbo úmido e começam a desenvolver perfis de temperatura e umidade no interior da matéria e a transferência de massa aumenta. Quando a temperatura do produto se aproxima da temperatura de bulbo seco é observado um segundo período de taxa de queda e o teor de umidade atinge a umidade de equilíbrio. O mecanismo que rege a taxa que a umidade é transferida internamente é a difusão (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016; CRAPISTE; ROTSTEIN, 1997).

2.3 Modelos matemáticos aplicados a secagem de géis e alimentos

O encolhimento de frutas e vegetais durante a secagem convectiva, o encolhimento de produtos cárneos durante o cozimento, a expansão da massa durante a fermentação, a expansão na extrusão e sopro a fim de produzir cereais matinais, o inchaço durante a imersão de legumes são alguns exemplos de processos envolvendo biomateriais que promovem mudanças significativas de volume e grandes deformações nos produtos. Em alguns casos, esses fenômenos podem ser positivos, mas em outros casos, podem representar mudanças indesejadas, mas de qualquer forma para uma ampla variedade de processos e condições operacionais, mudanças significativas são partes dos processos (PURLIS; CEVOLI; FABBRI, 2021).

Então um grande desafio surge do fato de que muitos materiais alimentícios com propriedades físicas ou químicas muito diversas precisam ser secos em diferentes escalas de produção e com especificações de qualidade do produto muito diferentes. Portanto entender melhor os mecanismos que promovem essas grandes mudanças nas matérias-primas é de extrema importância, mas devido a grande gama de processos existentes, materiais alimentícios utilizados, condições operacionais variáveis, é evidente a necessidade de elaboração continua de novos modelos (SABAREZ, 2015).

Neste sentido, a modelagem e simulação numérica podem desempenhar um papel importante, fornecendo estruturas adequadas e ferramentas quantitativas para uma análise sistemática e robusta (PURLIS; CEVOLI; FABBRI, 2021). A fluidodinâmica computacional (CFD) é um método numérico poderoso e avançado para resolver equações diferenciais parciais (PDEs) governantes de massa, momento e conservação de energia em fluxo de fluido e problemas de transferência de calor e massa e tem recebido mais atenção na indústria alimentícia nos últimos anos (MALEKJANI; JAFARI, 2018).

O uso da modelagem e simulação por computador estão se tornando importantes pois com tais técnicas avançadas é possível otimizar processos, economizar energia, modificar sistemas atuais, o desenvolvimento de novos equipamentos e se utilizar uma modelagem apropriada é possível acompanhar parâmetros importantes de processo como por exemplo teor de umidade, formação de trincas, formação de tensões internas, encolhimento (MALEKJANI; JAFARI, 2018; SABAREZ, 2015).

A modelagem da secagem envolve o estudo multidisciplinar, como fenômenos de transporte, ciência de materiais e propriedades físicas e químicas de fluidos e sólidos. A descrição matemática de fenômenos multifísicos necessita constante aperfeiçoamento, a fim de proporcionar melhor compreender o processo e otimizar as condições operacionais, de forma a otimizar a eficiência de produção e qualidade de produto.

2.3.1 Modelos matemáticos aplicados a secagem

É possível utilizar duas abordagens diferentes a fim de modelar os processos de secagem. A primeira é a modelagem baseada em princípios da física e matemática, e a segunda modelagem é baseada em uma abordagem empírica (RAMACHANDRAN et al., 2018).

A modelagem a qual é baseada nos princípios da física e matemática necessita de informações sobre as propriedades do fluido de secagem e do material solido, a fim de estabelecer as condições de contorno relacionadas aos fenômenos de transporte de calor e massa (RAMACHANDRAN et al., 2018).

A segunda abordagem são os modelos de secagem empíricos ou semiempíricos ou modelos de secagem baseados em experimentos e são utilizados na grande parte dos estudos pois são comparativamente mais fáceis de calcular e mais fáceis de interpretar e são capazes de fornecer uma relação direta entre o teor médio de umidade e o tempo de secagem mas mesmo esses modelos não são capazes de definir os princípios físicos subjacentes da secagem como o mecanismo de transferência de massa (RAMACHANDRAN et al., 2018).

Esses modelos formam a base para quase todos os modelos de secagem atualmente existentes. O desenvolvimento de um modelo empírico simples requer um experimento no qual os parâmetros de entrada específicos (temperatura, umidade relativa e velocidade do ar) são variados. O conjunto de dados experimentais é então usado para derivar uma relação matemática entre as variáveis e o tempo de secagem ou teor de umidade do material. Tais modelos consideram apenas condições médias de umidade e temperatura (RAMACHANDRAN et al., 2018). Embora o equacionamento seja simples, estes modelos não foram capazes de descrever adequadamente a secagem. Portanto, faz-se necessário considerar modelos matemáticos mais robustos para a cinética de secagem a fim de detalhar mais o processo de secagem.

2.3.2 Secagem e fluidodinâmica computacional (CFD)

Como foi visto, a demanda por estudos detalhados dos fenômenos físicos envolvidos nas diferentes técnicas de secagem ainda existe. Adicionar diferentes fenômenos como evaporação interna, difusão e encolhimentos, propriedades mecânicas, aumenta a complexidade na resolução do problema, além da necessidade de maior recurso computacional (RAMACHANDRAN et al., 2018).

Os modelos de secagem que aplicam CFD possuem certas vantagens quando comparados aos modelos empíricos. O calor e o fluxo de massa podem ser quantificados, a sensibilidade a mudanças nas condições de operação pode ser detectada sem problemas de repetibilidade que acontecem nos métodos experimentais, é possível extrapolar as condições de operação como por exemplo a temperatura de um secador, pois a segurança não é um problema, as simulações podem ser feitas em escala real do secador, o que pode não ser viável com a modelagem empírica, os modelos baseados em CFD têm a capacidade de fornecer uma visão mais profunda do processo de secagem com a configuração 3D, o que não é possível com experimentos de secagem, os modelos CFD são uma ferramenta poderosa para um projeto de secador com uma melhor compreensão do processo de secagem em comparação com a experimentação. No entanto, experimentos são essenciais para desenvolver modelos matemáticos que descrevam fenômenos físicos de transferência de calor e massa e para validar resultados de CFD (RAMACHANDRAN et al., 2018; MALEKJANI; JAFARI, 2018).

2.3.3 Equações governantes do CFD

Para desenvolver um modelo CFD é necessário uma definição precisa das variáveis, uma seleção das equações matemáticas e métodos numéricos, limites, condições iniciais, condições de contorno e correlações empíricas aplicáveis capazes de descrever o processo. Essas equações relacionam a taxa de mudança das propriedades de fluxo desejadas em relação às forças externas e são descritas abaixo (RAMACHANDRAN et al., 2018; MALEKJANI; JAFARI, 2018):

A lei da conservação da massa (equação da continuidade), que afirma que os fluxos de massa que entram e saem em um sistema devem se conservar. Este fluxo é governado pela força motriz dos gradientes de concentração. A equação da continuidade é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \bar{\mu} = 0 \tag{1}$$

Onde ρ e *t* são a densidade (kg/m³) e o tempo (s).

Fisicamente, $\nabla \cdot \bar{\mu}$ é a taxa temporal de variação do volume do elemento de fluido em movimento por unidade de volume, que representa a divergência de velocidade. A barra acima de μ é uma notação para a quantidade vetorial. Equações de modelo conceitual simplificadas são derivadas com a suposição de fluxo incompressível. Para um fluido incompressível para o qual a densidade é constante, a equação acima pode ser simplificada como

$$\nabla \cdot \bar{\mu} = 0 \tag{2}$$

A segunda lei do movimento de Newton (Lei da conservação do momento), que afirma que a soma das forças externas que atuam sobre uma partícula de fluido é igual à sua taxa de variação do momento linear. A equação de Euler para o movimento do fluido (assumindo que o fluido é incompressível) é dada por:

$$\frac{\partial(\rho\mu_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mu_i\bar{\mu}) = -\nabla p + \rho g \tag{3}$$

Onde $\bar{\mu}$ é o vetor velocidade em todas as direções (x, y, z). Essa formulação para o movimento do fluido foi posteriormente modificada pela introdução do transporte viscoso na equação. A equação resultante, que forma a base para CFD é denominado como a equação de Navier-Stokes para fluidos newtonianos e é dada por:

$$\frac{\partial(\rho\mu_i)}{\partial t} + \nabla(\rho\mu_i\bar{\mu}) = -\nabla p + \mu\nabla^2\bar{\mu} + pg_i \tag{4}$$

Onde o primeiro termo depois da igualdade se refere à força de superfície, o segundo termo depois da igualdade é a troca de momento dependente molecular (difusão) e o terceiro termo depois da igualdade é a força de massa (força gravitacional).

A primeira lei da termodinâmica (Lei da conservação de energia), que afirma que a taxa de mudança de energia de uma partícula de fluido é igual à adição de calor e ao trabalho realizado na partícula. Esse fluxo de energia é governado pela força motriz dos gradientes de temperatura. A equação do balanço de energia é dada por:

$$\rho C_p \frac{\partial T_f}{\partial t} + \rho C_p u_i \nabla T_f = \lambda \nabla^2 T_f + S_t$$
(5)

Onde i = 1, 2 e 3 denotando todas as direções (x, y, z) e o primeiro termo depois da igualdade se refere ao fluxo de calor (difusão) e o segundo termo depois da igualdade se refere ao termo fonte para adição de calor (transferência de energia mecânica em calor). Para fluidos incompressíveis, o trabalho de pressão é zero.
2.3.4 Métodos de discretização das equações diferenciais governantes de fluxo, calor e transferência de massa

Existem várias técnicas apropriadas para modelar o fluido contínuo e a escolha dessa técnica pode influenciar na resolução dos problemas de escoamento, a interpretação da solução e a análise dos dados numéricos. As diferentes técnicas tem diferentes abordagens que obtêm as mesmas soluções em altas resoluções de *mesh*, mas têm diferentes aplicações e as técnicas mais importantes são (RAMACHANDRAN et al., 2018; MALEKJANI; JAFARI, 2018):

- *i. Método de diferenças finitas (FDM)*
- ii. Método dos elementos finitos (FEM)
- *iii. Método dos volumes finitos (FVM)*

O FDM é a técnica de discretização mais simples de implementar e usado geralmente na resolução de problemas preliminares de fluxo e no desenvolvimento de modelos matemáticos, mas tem aplicação limitada em problemas de engenharia em tempo real devido às complexidades geométricas típicas dos sistemas usados na indústria. Esse método de diferenças finitas, o domínio geralmente é discretizado usando grades estruturadas e cada nó da grade é atribuído a uma equação algébrica. O FEM e o FVM empregam estruturas de malha sofisticadas e técnicas computacionais para lidar apropriadamente com uma geometria arbitrária com precisão muito boa (RAMACHANDRAN et al., 2018).

2.3.5 Formulações matemáticas usadas no CFD

As equações governantes são representadas por diferentes formulações matemáticas, como o modelo Euleriano-Euleriano ou de modelo de dois fluidos / duas fases (contínuo interpenetrante) e o modelo Euleriano-Lagrangiano ou modelo de partículas discretas. As equações utilizadas no estudo do fluxo do fluido, ou seja, a equação de continuidade, as

equações de momento e a equação de balanço de energia são derivadas da teoria de transporte de Reynolds (RAMACHANDRAN et al., 2018; MALEKJANI; JAFARI, 2018).

As formulações Euleriano-Lagrangiano são geralmente usadas para sistemas densos e as partículas individuais podem ser rastreadas no domínio do fluxo. É caro e demorado e são necessários computadores avançados de alta velocidade para resolver esta formulação. As formulações Euleriano-Euleriano são usadas para sistemas densos e diluídos e não pode prever o comportamento local das partículas (MALEKJANI; JAFARI, 2018). Na Figura 2.4 é possível ver as representações das duas formulações.



Figura 2.4. Ilustração das representações: (a) Euleriano-Euleriano b) Euleriano-Lagrangiano.

Fonte: (MALEKJANI; JAFARI, 2018).

A forma programável dessas formulações matemáticas para as equações governantes é lançada no domínio computacional discretizando todo o domínio por elemento finito, volume finito ou diferença finita. Para conseguir isso, todo o domínio do problema é dividido em células, nas quais o balanço de massa é calculado sobre cada célula. A maioria dos códigos CFD no mercado, como ANSYS, OPENFOAM, COMSOL, STAR CCM, FLOW 3D e PHEONICS, é capaz de usar formulações Eulerianas e Lagrangianas (RAMACHANDRAN et al., 2018; MALEKJANI; JAFARI, 2018). Alguns dos códigos CFD comumente usados são mostrados na Tabela 2.1.

Cálla -	Fornecedor	Solver	Condição de	
Codigo			Contorno Térmico	Recursos / Capacidades
				Recursos integrados de geometria,
CFX e FLUENT	ANSYS, Inc. www.ANSYS.com	FVM	Temperatura, fluxo, convecção, radiação, fonte de calor	malha, pré e pós-processamento.
				Modelos de mudança de fase
				baseados em calor latente e
				entalpia disponíveis e compatíveis
				com CAD.
COMSOL multiphysics	COMSOL www.comsol.com	FEM, FVM, e PTM	Temperatura, fluxo, convecção, radiação, aquecimento eletromagnético	Recursos integrados de geometria,
				malha, pré e pós-processamento.
				Compatível com CAD e recurso
				de link ao vivo para MATLAB e
				Excel.
				Recursos integrados de geometria,
Star-CCM	CD-adapco Group	FVM	Temperatura, fluxo, convecção, radiação	malha, pré e pós-processamento.
Star-CD	www.cd-adapco.com			Modelo de mudança de fase de
CD-adapco				entalpia disponível e compatível
				com CAD.
OpenFOAM			Convecção,	Geometria incorporada, malha,
(Código	OpenFOAM CFD	FVM e	temperatura, fluxo,	recursos de pré e pós-
(Coulgo Aberto)	OpenFOAM.org	FEM	radiação, fonte de	processamento e compatibilidade
			calor	com CAD.
				Mesh embutido, recursos de pré e
PHOENICS				pós-processamento. Modelos de
	CHAM Ltd.	FEM e	Temperatura, fluxo,	mudança de fase baseados em
	www.cham.co.uk	FVM	convecção, radiação	calor latente e entalpia
				disponíveis e compatíveis com
				CAD.

Tabela 2.1. Códigos CFD comerciais comumente usados e seus recursos importantes.

Fonte: Adaptado de (RAMACHANDRAN et al., 2018).

2.3.6 Análise utilizando o CFD

Resolver as equações diferencias parciais era um problema para os modelos empíricos no passado, pois essas PDEs tinham que passar por processo de simplificação para serem resolvidas manualmente. As abordagens mais modernas com a utilização do CFD superaram esse problema e uma maior detalhamento do processo foi possível.

Para definir um modelo que melhor represente o processo existem várias etapas a serem seguidas. Primeiro as equações de fenômenos de transporte devem ser estabelecidas e essas equações governam a maneira pela qual a transferência de massa e calor se comporta. A equação geral é definida por meio de um sistema de equações diferenciais parciais (PDE) sob diferentes condições de contorno e condições iniciais. A segunda parte é estabelecer as premissas do modelo como por exemplo, a dimensão, propriedades do material, encolhimento, propriedades mecânicas, acoplamento dos fenômenos, entre outros. Quando as condições iniciais e de contorno são determinadas com base na interação do sólido com o ar e definidos os parâmetros da matéria prima o qual dependem das suposições então as equações diferenciais parciais parciais parciais podem ser resolvidas através de métodos numéricos ou métodos analíticos (CASTRO; MAYORGA; MORENO, 2018).

Um procedimento geral de construção de um modelo CFD confiável é apresentado a seguir e um esquema principal da análise CFD é observada na Figura 2.5 (MALEKJANI; JAFARI, 2018).

- *i.* Definir o problema físico;
- ii. Definir as condições iniciais e de contorno;
- iii. Escolher entre as estruturas de referência Euleriano-Euleriano (EE) ou
 Euleriano-Lagrangiano (EL) em sistemas multifásicos;

- iv. Considerar ou não a equação governante de conservação chamada equação de Navier-Stokes;
- *v.* Implementação de equações de transporte adicionais (turbulência, fluxo granular, sedimentação sólida);
- vi. Selecionando entre dimensões 2D ou 3D. Reduzir a dimensão (se possível) pode reduzir a complexidade do modelo;
- vii. Divisão do domínio computacional em células chamadas "mesh";
- viii. Discretização das equações diferenciais parciais usando o método elemento finito (FE) ou método de diferença finita (FD) ou método volume finito (FV);
 - *ix.* Resolvendo as equações algébricas resultantes para cada mesh por meio do solver de equações lineares;
 - *x.* Verificando a qualidade da malha e a independência da malha dos resultados;
- xi. Verificando os erros residuais existentes entre iterações consecutivas e se for alto, é necessário modificar a entrada do modelo ou refinamento da malha até atingir a convergência.



Figura 2.5. Esquema principal de uma análise CFD.

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

2.4 Secagem e encolhimento

2.4.1 Secagem de géis e alimentos

O processo de secagem tornou-se um assunto organizado de investigação por volta de 1980 e durante a evolução científica da secagem, muitas dificuldades têm sido superadas e mesmo hoje devido ao objetivo de trazer produtos com qualidades especificas exigidos pelo mercado que o processo de secagem ainda tem grande campo de estudo. Para cumprir esse grande objetivo deve ser alcançada uma perfeita compreensão e, eventualmente, algum controle dos fenômenos internos que regem sobre o processo e sobre a qualidade final do produto (ROQUES; ZAGROUBA; AMARAL SOBRAL, 1994; SABAREZ, 2015).

A secagem ocorre quando o vapor de água é removido de sua superfície para o espaço ao redor, resultando em uma forma relativamente seca do material e essa remoção de umidade dos

sólidos é parte integrante do processamento de alimentos. Quase todo produto alimentar é seco pelo menos uma vez em um ponto de seu preparo e as mudanças que ocorrem durante o processamento dos alimentos afetam a eficiência da produção. Portanto ter um conhecimento adequado das reações e mudanças estruturais durante a secagem é necessário para aumentar a qualidade e eficiência do produto mas, é difícil estudar as possíveis mudanças químicas e físicas em alimentos reais por causa de suas complexas estruturas (MUJUMDAR, 2014; PURLIS; CEVOLI; FABBRI, 2021).

O uso de géis como sistemas alimentares modelo já são utilizados à algum tempo a fim de simplificar os produtos alimentícios pois podem ser preparadas na composição, estrutura e de forma controlada e informações importantes podem ser retiradas durante o processo de secagem desses géis (GÖĞÜŞ; LAMB, 1998). Além dessa função, os hidrogéis são materiais com propriedades atraentes e aplicação crescente portanto entender seu comportamento durante a secagem e as mudanças físicas que ocorrem se torna igualmente atrativo para se estudar (ADAMSKI; PAKOWSKI; KAMIŃSKA, 2014; DI GIUSEPPE et al., 2017).

2.4.2 Encolhimento durante a secagem

A operação de secagem tem como objetivo a produzir um produto com uma qualidade ótima sem que se altere as propriedades desejadas das matérias inicias e durante a secagem, os campos não uniformes de temperatura e teor de umidade induzem tensões térmicas e de retração no interior do material úmido. Como os materiais de secagem são tão diversos, podemos esperar vários mecanismos de interação entre a saída água e os sólidos, e dessa maneira as matériasprimas podem sofrer alterações físicas, químicas os quais podem afetar ou alterar indesejavelmente alguns atributos iniciais (DINÇER; ZAMFIRESCU, 2016). Uma das mudanças físicas de maior importância durante a desidratação de um produto é a redução de seu volume externo conhecido como encolhimento e essa mudança depende de muitos fatores, incluindo características do material, microestrutura, propriedades mecânicas e condições do processo. A perda de água e aquecimento causa tensões na estrutura celular dos alimentos, levando a mudanças de forma e diminuição de dimensão e aumento da rigidez (MAHIUDDIN et al., 2018; MAYOR; SERENO, 2004).

Em secagem que as matérias-primas tem um alto grau de umidade, o encolhimento raramente é insignificante, e é aconselhável levar em consideração ao prever perfis de umidade no material submetido à desidratação (PURLIS; CEVOLI; FABBRI, 2021; MAHIUDDIN et al., 2018; APRAJEETA; GOPIRAJAH; ANANDHARAMAKRISHNAN, 2015). Um modelo qual considera o encolhimento ajusta-se melhor aos dados experimentais durante a secagem do que um modelo sem encolhimento (PACHECO-AGUIRRE et al., 2015; APRAJEETA; GOPIRAJAH; ANANDHARAMAKRISHNAN, 2015).

Na literatura existem muitos trabalhos para investigar o encolhimento do material mas parte desses estudos é baseado em extensa análise experimental e esses estudos experimentais tem pouca aplicabilidade pois eles são conduzidos sob condições de produto e processo altamente específica. A modelagem matemática pode fornecer uma melhor visão sobre as causas do encolhimento com calor contínuo e transferência de massa durante a secagem. Como consequência, muitos modelos matemáticos foram desenvolvidos para a contração de materiais (MAHIUDDIN et al., 2018).

Um estudo apresentou uma revisão bem extensa de modelos sobre fenômeno do encolhimento e tinha objetivo de descrever melhor física do mecanismo de encolhimento e apresentar os modelos propostos para descrever esse mecanismo do encolhimento em materiais alimenticios submetidos a secagem. Vários modelos apresentados nesta revisão foram comparados com dados experimentais de secagem e os desvios relativos médios obtidos entre os valores experimentais e previstos de encolhimento encontrados foram, na maioria dos casos, inferiores a 10%. Para alguns materiais, os modelos que negligenciam a mudança das propriedades mecânicas tenderam a mostrar desvios maiores (MAYOR; SERENO, 2004).

Na maioria dos métodos de secagem é produzida uma retração significativa dos materiais portanto, é necessário entender melhor os mecanismos fundamentais destes fenômenos no contexto da engenharia, ou seja, desenvolver conhecimentos científicos e ferramentas úteis para descrever e prever as relações entre as condições de processamento e o comportamento dos materiais alimentícios (PURLIS; CEVOLI; FABBRI, 2021; MAHIUDDIN et al., 2018). Estudos relacionados a mudança do volume e grandes deformações implicam diretamente na qualidade dos produtos e, portanto, são de grande relevância para estudo.

2.4.3 Características dos materiais quanto às propriedades mecânicas

Devido as estruturas complexas que os materiais alimentícios podem ter é difícil formular um modelo que descreve o encolhimento de maneira mais realista. Para desenvolver um modelo baseado nessas mudanças físicas é necessário entender as características dos materiais e a escolha apropriada desses modelos é importante para o desenvolvimento de um modelo que descreva o encolhimento de maneira apropriada e realista. Os quatro diferentes modelos os quais podem ser aplicados para caracterizar os materiais e prever o encolhimento durante a secagem estão descritos a seguir (MAHIUDDIN et al., 2018).

i. Material elástico linear e material hiperelástico:

O comportamento elástico de um material depende principalmente da natureza das propriedades de tensão-deformação dos materiais. Com base nessas propriedades, os materiais elásticos podem ser categorizados como elásticos lineares, onde a lei constitutiva de Hook pode ser utilizada para modelar a contração do material ou como elásticos não lineares (ou hiperelásticos), onde a lei constitutiva Neo-Hookeana pode ser utilizada para modelar a contração do material. De acordo com a lei constitutiva de Hook, a tensão-deformação devem permanecer proporcionais até um certo limite de 10% para ser considerado elástico linear e para muito materiais alimentícios esse limite não é definido (MAHIUDDIN et al., 2018).

ii. Material elastoplástico:

Um material é considerado elastoplástico quando apresenta propriedades elásticas e plásticas ao mesmo tempo, ou seja, um plástico semelhante à borracha. Supõe-se que o material apresenta propriedades elastoplásticas em uma pequena região de tensão, entre o limite elástico e a resistência a ruptura (MAHIUDDIN et al., 2018).

iii. Material viscoelástico:

Um material é considerado viscoelástico quando exibem características elásticas e viscosas quando sofrem deformação. A propriedade de tensão-deformação desses tipos de materiais depende do tempo (MAHIUDDIN et al., 2018).

2.4.4 Mecanismo do Encolhimento

Durante o processo de secagem, acontece um estresse microestrutural induzido pelo gradiente de umidade e temperatura dentro do produto e essa tensão microestrutural que leva à deformação do material, conhecida como encolhimento. Na maior parte dos produtos alimentícios, existem duas causas principais do encolhimento do material. A primeira causa é que o tecido alimentar é incapaz de manter seu arranjo estrutural quando o espaço ocupado pela água é constantemente esvaziado e preenchido com ar e a segunda causa é o colapso da estrutura externa da pele do material, que leva ao encolhimento (MAHIUDDIN et al., 2018; KHAN et al., 2016).

De maneira intracelular, a forma da célula é mantida intacta devido à pressão de turgor no interior das células dos alimentos, que empurram a parede celular para manter a rigidez da parede celular. Se durante a secagem, a pressão de turgor falhar então ocorrerá mudanças na resistência compressiva do tecido, na deformação crítica e também no estresse crítico o que leva ao colapso celular. Portanto, o encolhimento do material não depende apenas do teor de umidade que sai, mas depende também da rigidez da parede celular e da pressão de turgor da água intracelular (MAHIUDDIN et al., 2018).

2.4.5 Fatores que afetam o encolhimento do material durante a secagem

Devido à natureza diversa dos materiais alimentícios, existem muitos fatores que podem afetar a magnitude do encolhimento do material durante a secagem. Alguns desses fatores será mostrado a seguir:

i. A estrutura celular do material a ser seco:

As matérias-primas alimentares são compostas principalmente por uma matriz sólida com uma quantidade significativa de água líquida na célula em diferentes níveis. Existe água em diferentes ambientes celulares, como a região intracelular (dentro das células), região intercelular (entre as células) e o ambiente da parede celular (água nos microcapilares). A migração da água livre (água intercelular) tem pouco efeito na contração do material porém o transporte da água intracelular e da parede celular afeta fortemente o encolhimento do material durante o processo das matérias primas (MAHIUDDIN et al., 2018; JOARDDER et al., 2015).



Figura 2.6. Diferentes tipos de água dentro dos materiais alimentares.

Fonte: Adaptado de (JOARDDER; KUMAR; KARIM, 2018).

ii. Efeito da temperatura do ar de secagem:

A temperatura do ar de secagem tem um papel importante a fim de aumentar a taxa de secagem o que por sua vez afeta o encolhimento do material. A secagem em baixas temperaturas, a umidade é transportada em um padrão plano, portanto, as tensões dentro do alimento são mínimas, consequentemente, o encolhimento do material é uniforme e pronunciado. Por outro lado, no processo de secagem em altas temperaturas, a superfície das amostras seca muito rapidamente, fazendo com que a superfície fique rígida (endurecimento da casca), o que não permite que o material encolha significativamente. (MAHIUDDIN et al., 2018; HALDER; DATTA; SPANSWICK, 2011).

iii. Efeito da velocidade do ar de secagem

A velocidade do ar de secagem é outro fator com grande importância e que afeta o encolhimento do material durante o processo de secagem. O encolhimento de frutas e vegetais diminui com o aumento da velocidade do ar de secagem (KHRAISHEH; MCMINN; MAGEE, 2004; RATTI, 1994). Isso pode ser explicado pois durante a secagem com transferência de

energia controlada externamente, a transferência de massa ocorre tanto por difusão interna quanto por convecção externa e em baixas velocidade do ar, a resistência da superfície prevalece e, portanto os perfis de umidade na amostra são relativamente planos o que resulta em baixas tensões internas e consequentemente o material alimentício encolhe uniformemente em baixas velocidades (MAHIUDDIN et al., 2018).

iv. Efeito da umidade relativa do ar

Em alguns casos, a umidade relativa do ar pode influenciar o encolhimento do material como por exemplo, quando a umidade relativa do ar é baixa, o número adimensional de Biot aumenta o que limita a contração do material (RATTI, 1994). O endurecimento da casca do material afeta o quanto um material pode encolher em baixa umidade relativa do ar (MAHIUDDIN et al., 2018).

v. Efeito da temperatura de transição vítrea

A temperatura de transição vítrea é um fator que pode influenciar o encolhimento do material e ela é conhecida como temperatura de mobilidade sólida. A temperatura de transição vítrea (T_g) em um alimento é entendido como o estado termodinâmico instável no qual a forma amorfa da água, ligada à matriz sólida do alimento, transita entre os estados de borracha e vítreo (MAHIUDDIN et al., 2018; SAPPATI; NAYAK; VAN WALSUM, 2017). A teoria da transição vítrea pode explicar como a T_g pode influenciar o encolhimento do material. No estado emborrachado, o material alimentício tem alta mobilidade dentro da matriz sólida e no estado vítreo por outro lado, o material alimentício tem baixa mobilidade devido à alta viscosidade (JOARDDER; KUMAR; KARIM, 2018; SAPPATI; NAYAK; VAN WALSUM, 2017).

A taxa de encolhimento de um material no estado emborrachado é maior, pois o movimento molecular é maior do que no estado vítreo. A temperatura de transição vítrea varia

em função dos tipos de componentes do material e do teor de umidade do alimento e então à medida que a secagem ocorre, a T_g aumenta com a redução do teor de umidade. Com isso a taxa de encolhimento no estado vítreo é menor devido à alta viscosidade do material (MAHIUDDIN et al., 2018; SAPPATI; NAYAK; VAN WALSUM, 2017). Na Figura 2.7 é possível observar o efeito da temperatura de transição vítrea em materiais submetidos a secagem. Onde T é a temperatura da secagem e T_s é a temperatura da amostra e T_g é a temperatura de transição vítrea.



Figura 2.7. Efeito da temperatura de transição vítrea em materiais submetidos a secagem.

Fonte: (JOARDDER; KUMAR; KARIM, 2018).

vi. Efeito das propriedades mecânicas

A porosidade e a densidade são propriedades físicas que influenciam significativamente o encolhimento do material (MAHIUDDIN et al., 2018; RAMOS; BRANDÃO; SILVA, 2003). Os modelos constitutivos existentes para modelar as propriedades mecânicas dependem do módulo de elasticidade e da razão de Poisson e o valor dessas duas propriedades mudam significativamente ao longo da secagem o que consequentemente leva a uma mudando na contração do material. O aumento do módulo de elasticidade com a diminuição do teor de umidade depende da temperatura (MAHIUDDIN et al., 2018).

Durante a secagem, o material torna-se emborrachado com vários graus de maciez em temperaturas mais altas e com o aumento do módulo de elasticidade, o módulo de cisalhamento do material aumenta, o que leva a um aumento da tensão da tração principal no interior do material (GULATI; DATTA, 2015).

2.4.6 Definindo as propriedades mecânicas: Conceitos de Tensão e Deformação

O comportamento mecânico de um material é a relação entra a deformação devido a uma carga ou força aplicada. As principais propriedades mecânicas são a rigidez, resistência, dureza e ductilidade. Essas propriedades mecânicas dos sólidos são determinadas através de procedimento experimental cuidadosamente projetado a fim de replicar o mais próximo das condições reais (CALLISTER; RETHWISCH, 2012).

Com um simples teste de tensão-deformação é possível determinar o comportamento mecânico de materiais. Existem quatro principais maneiras pela qual a carga poder ser aplicada a fim de observar o comportamento mecânico que são: compressão, tração, cisalhamento e de torção (Figura 2.8).

Figura 2.8. Principais maneiras de aplicar a carga para determinar o comportamento mecânico. (a) Tração; (b) Compressão; (c) Cisalhamento; (d) Torção.



Fonte: (CALLISTER; RETHWISCH, 2012).

O teste de compressão uniaxial é um dos testes de tensão-deformação mais simples e possível determinar e verificar várias propriedades mecânicas com esse teste. A tensão de engenharia é determinada de acordo com Eq. 6 (CALLISTER; RETHWISCH, 2012).

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \tag{6}$$

Em que *F* é carga instantânea aplicada perpendicular a secção transversal da amostra em unidades de Newton (N) e A_0 é a área transversal original antes de qualquer carga ser aplicada em unidade de metros quadrados m². A deformação de engenharia é determinada de acordo com a Eq. 7 (CALLISTER; RETHWISCH, 2012).

$$\varepsilon = \frac{l_i - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \tag{7}$$

Em que l_0 é o comprimento original antes de qualquer carga ser aplicada e l_i é o comprimento instantâneo. A quantidade $l_i - l_0$ é definido como o elongamento ou alteração da deformação em algum instante de tempo (Δl). A deformação é adimensional, ou seja, sem

unidades, mas muitas vezes é usada como forma de porcentagem (%) multiplicando a Eq. 7 por 100 (CALLISTER; RETHWISCH, 2012).

2.4.7 Deformação de sólidos hookianos

O grau que um sólido se deforma depende da magnitude da tensão imposta. Para alguns materiais a tensão é diretamente proporcional a deformação dada pela lei de Hooke para deformação elástica Eq. 8.

$$\sigma = E\varepsilon \tag{8}$$

A constante de proporcionalidade da lei de Hooke é o módulo de elasticidade ou módulo de Young, em unidade de Pascal (Pa). É chamado de deformação elástica quando a tensão e a deformação são proporcionais e resulta em um gráfico de tensão por deformação linear (Figura 2.9). A inclinação da reta corresponde ao módulo de elasticidade (*E*) e o módulo é definido como sendo a rigidez do material ou resistência do material a deformação elástica, portanto quando maior o módulo de *Young*, maior a rigidez do material.

Figura 2.9. Gráfico mostrando a deformação elástica linear para ciclos de carga e descarga.



Fonte: (CALLISTER; RETHWISCH, 2012).

2.4.8 Deformação de sólidos não-hookianos

A lei de Hooke é válida para níveis de deformação de até 10% e pode nem sempre ser verdadeira para materiais alimentícios, pois eles sofrem mudanças significativas de volume, resultando em deformações bem acima da faixa de Hooke (MAHIUDDIN et al., 2018; GULATI; DATTA, 2015). Materiais como por exemplo, o concreto, ferro fundido, biopolímeros e géis que a parte elástica da curva de tensão-deformação não é linear (Figura 2.10) e dessa maneira não é possível determinar a rigidez do material dessa como descrito (CALLISTER; RETHWISCH, 2012).

Figura 2.10. Gráfico com exemplo mostrando o comportamento de deformação elástica não linear.



As leis constitutivas de sólidos hiperelásticos são utilizados para modelar materiais os quais respondem elasticamente quando sujeitos a deformações muitos grandes. Essas grandes deformações são responsáveis pelo comportamento do material não linear e pelas grandes alterações de forma (MOERMAN; FEREIDOONNEZHAD; MCGARRY, 2020; BOWER, 2010). Os géis de biopolímeros são materiais macios que suportam grandes deformações e apresentam endurecimento por deformação, assemelhando-se ao comportamento hiperelástico dos elastômeros (CZERNER et al., 2016). Os tecidos biológicos em geral durante alguns processamentos sofrem grandes deformações e os modelos elásticos não lineares (hiperelásticos) descrevem o fenômenos com maior precisão quando em comparação com a teoria da elasticidade linear (WEX et al., 2015).

A abordagem hiperelástica considera a existência da função de energia de deformação, uma função escalar por unidade de volume de referência, que relaciona o deslocamento do tecido com seus valores de tensão correspondentes. As formas mais populares usadas para modelar as funções de energia de deformação as quais caracterizam o comportamento mecânico dos tecidos biológicos são os modelos Neo-Hookeanos, Mooney-Rivlin, Ogden, Yeoh, Fung-Demiray, Verona-Westmann, Arruda-Boyce, Gente entre outros modelos (WEX et al., 2015).

Na literatura temos estudos que utilizam a teoria de sólidos hiperelásticos para descrever o comportamento de géis, biopolímeros e hidrogéis. Como o estudo que investigou dois tipos de amido quanto as propriedades para altas deformações e fratura através de experimentos de compressão uniaxial, dobra de entalhe de borda única e corte de arame e essa pesquisa revelou que os géis de amido exibem um comportamento de tensão-deformação independente da taxa e devido esse comportamento de tensão independente da taxa foi utilizado uma relação constitutiva elástica não linear baseada em Ogden para modelar os géis de amido e uma condição sem fricção foi assumida na interface de contato do fio com o amido em gel e o comportamento dos géis de amido foi possível de se descrever através do modelo de Ogden (GAMONPILAS; CHARALAMBIDES; WILLIAMS, 2009).

Figura 2.11. Curvas de tensão e deformação dos testes de compressão dos dois tipos de amidos testados no trabalho e o ajuste adequado ao modelo hiperelásticos de Ogden.



Fonte: (YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012).

Modelo de Ogden	2-43 (15%)	2-34 (20%)	2-12 (15%)	2-12 (20%)
μ (kPa)	21,88	55,29	2,15	4,67
α(-)	-5,10	-4,43	-6,56	-3,73

Tabela 2.2. Parâmetros do ajuste do Modelo de Ogden dos dois tipos de amidos testados nos testes de compressão uniaxial.

Fonte: (GAMONPILAS; CHARALAMBIDES; WILLIAMS, 2009).

O modelo mecânico não linear de Ogden (Eq. 9) é definido como (YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012; GAMONPILAS; CHARALAMBIDES; WILLIAMS, 2009):

$$\sigma = \frac{2\mu}{\alpha} (\lambda^{\alpha} - \lambda^{-\frac{1}{2}\alpha}) \tag{9}$$

Em que σ é tensão real, λ é a razão de alongamento que é dado por $\lambda = \exp(\varepsilon)$, ε é deformação real, μ é o módulo de cisalhamento inicial e α é a constante de Ogden.

O módulo de elasticidade ou módulo de Young (E) pode ser calculado de acordo com a Eq. 10 (GAMONPILAS; CHARALAMBIDES; WILLIAMS, 2009).

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\varepsilon} = E = 3.\,\mu\tag{10}$$

Em outro estudo o qual estabeleceu e validou um modelo reológico para poder ser utilizado na caracterização de propriedades viscoelásticas de géis de alimentos (gel ágar) durante a compressão sob pequenas e grandes deformações. Foram utilizados dois modelos diferentes (modelo de Burgers e o modelo viscoelástico linear generalizado modificado (GLVE) para tentar descrever o comportamento dos géis na região viscoelástica linear e não linear, respectivamente. No entanto, o modelo GLVE modificado parece não capturar o comportamento de endurecimento por estresse dos géis de ágar durante a compressão e então o modelo de Ogden foi então usado e descreveu com sucesso o comportamento de tensãodeformação de géis de ágar em diferentes taxas de deformação (YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012). A Figura 2.12 mostra as curvas de tensão-deformação dos géis de ágar com diferentes concentrações submetidos a compressão e mostra como o modelo de Ogden modela com grande acurácia o comportamento dos géis quando sofrem grandes deformações. Os parâmetros do modelo de Ogden utilizados para o ajuste podem ser visualizados na Tabela 2.3.

Figura 2.12. Comportamento mecânico dos géis de ágar sob compressão uniaxial e o uso do modelo hiperelástico de Ogden para descrever o comportamento.



Fonte: (YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012).

Concentração do Gel de Ágar	0.4%	0.8%	1%
μ (Pa)	1700	4100	6000
α	6,2	8,0	11,3

Tabela 2.3. Parâmetros do ajuste do Modelo de Ogden das diferentes concentrações dos Géis de Ágar.

Fonte: (YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012).

2.5 Textura de géis e alimentos

A textura dos alimentos é considerada um parâmetro fundamental de qualidade no desenvolvimento e aceitação de novos produtos. Existem várias técnicas de processamento de alimentos que tem como objetivo melhorar as propriedades de texturas e sensorial dos produtos. Então a medição das propriedade mecânicas e reológicas dos alimentos é muito importante a fim de melhor compreender a relação dessas propriedades com a textura dos alimentos (CHEN; OPARA, 2013; YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012).

Dentre as características de textura, a dureza ou firmeza é um parâmetro importante de frutas e hortaliças a qual é frequentemente utilizada para determinar o frescor. A crocância é uma característica chave de alimentos quebradiços e crocantes. Produtos gelatinizados, parâmetros como elasticidade, coesão e adesividade são propriedades significativas para avaliação da textura. Os parâmetros de qualidade de textura dos alimentos podem ser avaliados através de análises sensoriais ou instrumentais descritivas. As análises sensoriais levam muito tempo e tem um alto custo por isso testes mecânicos vem sendo utilizados para correlacionar as percepções sensoriais da textura dos alimentos (CHEN; OPARA, 2013).

Porém a textura é uma propriedade difícil de definir e pode ser considerado um reflexo externo das características micro e macroestruturais de um produto alimentício o que influencia diretamente suas características percebidas sensorialmente (RAMOS; BRANDÃO; SILVA, 2003). Então é um desafio obter correlações entre as propriedades sensoriais e reológicas de materiais sólidos e semissólidos e géis de biopolímeros são sistemas modelo comumente utilizados para melhor compreender a textura dos alimentos (YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012).

Durante o processo de secagem convectiva as propriedades mecânicas dos alimentos mudam substancialmente e demonstraram ter um forte efeito no transporte interno de umidade (MAHIUDDIN et al., 2018; PERRÉ; MAY, 2001; RATTI, 1994). A secagem de géis é um processo que vem sendo estudado mas poucos modelos abordam do ponto de vista mecânico por causa da complexa natureza do material que possui uma relação de tensão-deformação não linear e dependência das propriedades mecânicas com a saída do conteúdo de umidade (ADAMSKI; PAKOWSKI; KAMIŃSKA, 2014).

Nesse contexto, entendendo que a textura de um material é um parâmetro importante de qualidade e que durante a secagem as propriedades mecânicas as quais definem a textura dos produtos se modificam, então estudar e entender a correlação que as propriedades mecânicas tem com a saída do conteúdo de umidade durante a secagem é de extrema importância.

Referências

- ADAMSKI, R.; PAKOWSKI, Z.; KAMIŃSKA, A. The Mechanism of Moisture Transport in a Gel Cylinder. **Drying Technology**, v. 32, n. 11, p. 1266–1268, 2014.
- APRAJEETA, J.; GOPIRAJAH, R.; ANANDHARAMAKRISHNAN, C. Shrinkage and porosity effects on heat and mass transfer during potato drying. Journal of Food Engineering, v. 144, p. 119–128, 2015. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2014.08.004>.
- BOWER, A. F. Hyperelasticity: Time-Independent Behavior of Rubbers and Foams Subjected to Large Strains. In: BOWER, A. F. (Ed.). Applied Mechanics of Solids. New York: CRC Press, 2010. p. 93–103.
- CALLISTER, W. D. J.; RETHWISCH, D. G. Mechanical Properties of Metals. In: Materials science and engineering: An introduction (8th edition). 8. ed. [s.l.] John Wiley & Sons Inc., 2012. p. 1000.
- CASTRO, A. M.; MAYORGA, E. Y.; MORENO, F. L. Mathematical modelling of convective drying of fruits: A review. Journal of Food Engineering, v. 223, p. 152– 167, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2017.12.012>.
- CHEN, L.; OPARA, U. L. Approaches to analysis and modeling texture in fresh and processed foods A review. Journal of Food Engineering. Elsevier, 1 dez. 2013.
- CRAPISTE, G. H.; ROTSTEIN, E. Design and Performance Evaluation of Dryers. In: VALENTAS, K. J.; ROTSTEIN, E.; SINGH, R. P. (Ed.). Handbook of Food Engineering Practice. Boca Raton: CRC Press, 1997. 1p. 132–173.
- CZERNER, M. et al. Deformation and fracture behavior of physical gelatin gel systems. **Food Hydrocolloids**, v. 60, p. 299–307, 2016. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.foodhyd.2016.04.007>.
- DI GIUSEPPE, M. et al. Mechanical behaviour of alginate-gelatin hydrogels for 3D bioprinting. 2017. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2017.12.018>. Acesso em: 7 mar. 2022.
- DINÇER, I.; ZAMFIRESCU, C. Drying Phenomena: Theory and Applications. 1. ed. Canada: John Wiley & Sons, Ltd., 2016.
- GAMONPILAS, C.; CHARALAMBIDES, M. N.; WILLIAMS, J. G. Determination of large deformation and fracture behaviour of starch gels from conventional and wire cutting experiments. Journal of Materials Science, v. 44, n. 18, p. 4976–4986, 2009.
- GENSKOW, L. R. et al. Psychrometry, Evaporative Cooling, and Solids Drying. In: MOYERS, C. G.; BALDWIN, G. W. (Ed.). **Perry's Chemical Engineers' Handbook**. 8° ed. Nova York: McGraw-Hill, 2008. p. 12-1-12–109.

- GÖĞÜŞ, F.; LAMB, J. Choice of Model Gel Systems for the Food Dehydration Studies. **Drying Technology**, v. 16, n. 1–2, p. 297–309, 1998. Disponível em: http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/07373939808917405>.
- GULATI, T.; DATTA, A. K. Mechanistic understanding of case-hardening and texture development during drying of food materials. Journal of Food Engineering, v. 166, p. 119–138, 2015.
- HALDER, A.; DATTA, A. K.; SPANSWICK, R. M. Water transport in cellular tissues during thermal processing. AIChE Journal, v. 57, n. 9, p. 2574–2588, set. 2011.
- JOARDDER, M. U. H. et al. Effect of cell wall properties on porosity and shrinkage of dried apple. International Journal of Food Properties, v. 18, n. 10, p. 2327–2337, 2015. Disponível em: https://www.tandfonline.com/action/journalInformation?journalCode=ljfp20>. Acesso em: 22 dez. 2022.
- JOARDDER, M. U. H.; KUMAR, C.; KARIM, M. A. Prediction of porosity of food materials during drying: Current challenges and directions. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, v. 58, n. 17, p. 2896–2907, 22 nov. 2018. Disponível em: https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10408398.2017.1345852>. Acesso em: 3 fev. 2022.
- KHAN, M. I. H. et al. Investigation of bound and free water in plant-based food material using NMR T2 relaxometry. Innovative Food Science and Emerging Technologies, v. 38, p. 252–261, 1 dez. 2016.
- KHRAISHEH, M. A. M.; MCMINN, W. A. M.; MAGEE, T. R. A. Quality and structural changes in starchy foods during microwave and convective drying. Food Research International, v. 37, n. 5, p. 497–503, 1 jun. 2004.
- MAHIUDDIN, M. et al. Shrinkage of Food Materials During Drying: Current Status and Challenges. **Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety**, v. 17, n. 5, p. 1113–1126, 2018.
- MALEKJANI, N.; JAFARI, S. M. Simulation of food drying processes by Computational Fluid Dynamics (CFD); recent advances and approaches. Trends in Food Science and Technology, v. 78, n. June, p. 206–223, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.tifs.2018.06.006>.
- MAYOR, L.; SERENO, A. M. Modelling shrinkage during convective drying of food materials: a review. **Journal of Food Engineering**, v. 61, n. 3, p. 373–386, fev. 2004. Disponível em: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0260877403001444>.
- MOERMAN, K. M.; FEREIDOONNEZHAD, B.; MCGARRY, J. P. Novel hyperelastic models for large volumetric deformations. **International Journal of Solids and Structures**, v. 193–194, p. 474–491, 1 jun. 2020.

MUJUMDAR, A. S. Handbook of Industrial Drying. 4. ed. Boca Raton: CRC Press, 2014.

- NAFO, W.; AL-MAYAH, A. Characterization of PVA hydrogels' hyperelastic properties by uniaxial tension and cavity expansion tests. International Journal of Non-Linear Mechanics, v. 124, p. 103515, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2020.103515>. Acesso em: 21 fev. 2022.
- OŽBOLT, J.; GAMBARELLI, S.; ZADRAN, S. Coupled hygro-mechanical meso-scale analysis of long-term creep and shrinkage of concrete cylinder. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2022.114332>. Acesso em: 7 jul. 2022.
- PACHECO-AGUIRRE, F. M. et al. Drying modeling in products undergoing simultaneous size reduction and shape change: Appraisal of deformation effect on water diffusivity. **Journal of Food Engineering**, v. 164, p. 30–39, 1 nov. 2015.
- PERRÉ, P.; MAY, B. K. A numerical drying model that accounts for the coupling between transfers and solid mechanics. Case of highly deformable products. Drying Technology, v. 19, n. 8, p. 1629–1643, 2001.
- PURLIS, E.; CEVOLI, C.; FABBRI, A. Modelling Volume Change and Deformation in Food Products/Processes: An Overview. Foods 2021, Vol. 10, Page 778, v. 10, n. 4, p. 778, 5 abr. 2021. Disponível em: https://www.mdpi.com/2304-8158/10/4/778/htm. Acesso em: 19 jul. 2022.
- RAMACHANDRAN, R. P. et al. Computational Fluid Dynamics in Drying Process Modelling - A Technical Review. Food and Bioprocess Technology. Springer, , 18 dez. 2018. Disponível em: https://link-springercom.ez67.periodicos.capes.gov.br/article/10.1007/s11947-017-2040-y>. Acesso em: 18 dez. 2022.
- RAMOS, I. N.; BRANDÃO, T. R. S.; SILVA, C. L. M. Structural changes during air drying of fruits and vegetables. Food Science and Technology International, v. 9, n. 3, p. 201–206, 2003.
- RATTI, C. Shrinkage during drying of foodstuffs. In: **Journal of Food Engineering**. [s.l: s.n.]23p. 91–105.
- ROQUES, M. A.; ZAGROUBA, F.; AMARAL SOBRAL, P. Do. Modelisation principles for drying of gels. **Drying Technology**, v. 12, n. 6, p. 1245–1262, 1994.
- SABAREZ, H. T. Modelling of drying processes for food materials. [s.l.] Elsevier Ltd., 2015.
- SAPPATI, P. K.; NAYAK, B.; VAN WALSUM, G. P. Effect of glass transition on the shrinkage of sugar kelp (Saccharina latissima) during hot air convective drying. Journal of Food Engineering, v. 210, p. 50–61, 1 out. 2017.

- TAMARIT-PINO, Y. et al. Shelf-life prediction and quality changes in dried Chilean sea cucumber (Athyonidium chilensis) during accelerated storage. Journal of Food Processing and Preservation, v. 44, n. 9, set. 2020.
- WEX, C. et al. Isotropic incompressible hyperelastic models for modelling the mechanical behaviour of biological tissues: A review. **Biomedizinische Technik**.1 dez. 2015. Disponível em: https://www-degruytercom.ez67.periodicos.capes.gov.br/document/doi/10.1515/bmt-2014-0146/html. Acesso em: 24 dez. 2022.
- YU, J.; SANTOS, P. H. S.; CAMPANELLA, O. H. A Study to characterize the mechanical behavior of semisolid viscoelastic systems under compression chewing case study of agar gel. **Journal of Texture Studies**, 2012.

3 CHAPTER IV: MODELING OF CONVECTIVE DRYING OF POTATO POLYHEDRONS

ABSTRACT

This work aimed to develop numerical models to predict the moisture and deformation of potatoes pieces, during convective drying at an air temperature of 40-80 ° C and 0.5 m/s. Several geometries (cylindrical, cube, parallelepiped and prism) were evaluated in the current work. Two models predicted the drying profiles as case studies. The first model coupled the linear constant drying rate to the analytical solution Fick law in spherical coordinates, resulting in mass diffusion coefficients from 4.2 to 15.5 10^{-10} m²·s⁻¹. The critical drying time ranged from 1640 to 5085 s, while the critical moisture ranged from 1.8 to 2.4 kg·kg⁻¹. The FEM model coupled mass transfer and shrinkage of three-dimensional polyhedrons, with mass diffusivity ranging from 1.4 to $6.5 \cdot 10^{-10}$ m²·s⁻¹. Both models fit well the drying of potatoes, with R² higher than 0.97. The FEM model simulated the shrinkage of potatoes by evaluating the three-dimensional molar flux of water and the deformation of the mesh on geometry boundaries. The presence of shrinkage changed the drying rate profiles and helped to better explain the pseudoconstant rate period. The developed model described accordingly the drying of food materials with a high shrinkage ratio.

Keywords: Convective drying; potato geometries; shrinkage; finite elements method

3.1 Introduction

Drying is a unitary operation that is used to remove moisture and reduce water activity, extending the shelf life of food (MUJUMDAR; LAW, 2010). The removal of water by hot and dry air occurs by heat and mass transfer phenomena in a given hot air flow.

In the solid domain, heat is introduced on the surface of the food and the loss of moisture is due to mass diffusion or convection, according to the structure of the food (CASTRO; MAYORGA; MORENO, 2018).

Mathematical models can described the multiphysics phenomena and then provide better design, monitoring and energy saving of drying systems (MALEKJANI; JAFARI, 2018). The finite element method has been used to predict drying phenomena including shrinkage, using a reduced number of experimental assays (SILVA JÚNIOR et al., 2019). However, numerical simulations require experimental validation and effective mass diffusivity values are usually obtained from the nonlinear regression of the drying model to the experimental data.

The literature has reported several applications of the numerical method of finite elements in studies of convective drying of food materials (SABAREZ, 2012; PERUSSELLO et al., 2014; ZHU et al., 2021) . In the food industry, solids taken to drying can present various types of shape, such as flakes, granules, slices or polyhedral shapes (ALBOSHARIB et al., 2021). Studies evaluating the effects of shape and size on drying profiles have been reported in the literature (BOUTELBA et al., 2018; DEFRAEYE, 2017; CURCIO et al., 2016; AVERSA et al., 2012; SENADEERA et al., 2003; MULET et al., 2000).

The coupling of the Arbitrary Lagrange–Eulerian (ALE) method is used to describe geometry deformation, resulting in better prediction of drying profiles (AJANI et al., 2017). The shrinkage of the solid can modify the rate of moisture loss, and the drying rate normally increases with increasing surface area. In contrast, modeling studies concerning the expansion effect of the material, derived from the formation of internal pores, still require greater application (GULATI; UKIDWE; DATTA, 2018; RAKESH; DATTA, 2011)

The advances in computational modeling through the finite element method is increasing in food engineering, and the application of multiphysics models that coupled volumetric deformation and momentum, heat, and mass transfer is essential for the improvement of processes in the food industry. This work investigated the effects of polyhedral shapes on potatoes drying profiles, combining momentum and mass transfer with shrinkage effects. The developed FEM model adequately simulated three-dimensional and time-dependent conditions and is an innovative contribution to the description of the convective drying of food products.

3.2 Material and methods

3.2.1 Material

Potatoes (*Solanum tuberosum* L.) collected from a local market (Pirassununga, State of São Paulo, Brazil), with moisture of $5.21 \pm 0.59 \text{ g} \cdot \text{g}^{-1} \text{ d.b.}$, were used as raw samples. Distilled water or absolute ethanol (Dynamics, Brazil) was used as pycnometer liquid.

3.2.2 Preparation of pieces of raw potato

The potatoes were cut into geometries of cylinder (CL), cube (CB), rectangular parallelepiped (PL) and triangular prism (PM). The potato peels were removed and the raw samples manually prepared with a knife and a caliper rule. The heights and size of edges of the potato pieces has been standardized, resulting in a mass of sample (m_i , g) nearest to 1.2 g. In Table 3.2 presented below it is possible to see the dimensions of the different geometries.

The volume (V_i , cm³) and surface area (A_i , cm²) were computed using basic geometry formulas for each polyhedron. The specific surface area (S_i , cm²/g) was the ratio between the surface area and the mass of sample. The equivalent spherical diameter (d_i , cm) corresponds to the size of a sphere with identical volume of a potato piece.

3.2.3 Convective drying trials

Convective drying of potato pieces was performed in a drying tunnel with a 10 cm square cross section and 1 m length. The equipment and operational conditions were similar to the previous study concerning the drying of gel slabs (SILVA JÚNIOR et al., 2019). A total of six potato pieces were placed at the tunnel dryer center and their weight was measured each 1-minute intervals by a precision balance. Data sheet were collected via communication port interface and MATLAB R2015a software. The air temperature was set at 40, 60 and 80 °C, while the flowing air velocity was kept at 0.5 m/s. The duration of convective drying ranged from 240 to 480 minutes, according to air temperature and reach of moisture equilibrium. Finished the convective drying, the dried samples were stored in desiccator containing silica. An additional drying step at 105 ± 5 °C and under 24 hours evaluated the dry weight and equilibrium concentration of samples (AOAC, 2005).

The pieces of potato had distinct shapes, according to the height and edges size of polyhedrons. The drying trials were labeled in accordance to solid shape: cylinder (CL), cube (CB); parallelepiped (PL) and prism (PM). The temperature of drying air was also joined to the polyhedron label, e.g. CL40.

From known values m_T of mass sample and m_d of mass of solids in samples on dry basis, moisture content X on dry basis was then evaluated as:

$$X = \frac{m_T - m_d}{m_d} \tag{11}$$

Where as moisture ratio XR was determined according to:

$$XR = \frac{X - X^{eq}}{X^0 - X^{eq}} \tag{12}$$

in which X^{eq} is the equilibrium moisture on dry basis, X^0 is the initial moisture on dry basis and *X* is the moisture on dry basis at time *t*.

3.2.4 Measurement of volumetric deformation and shrinkage

The volume of the samples was obtained by a pycnometer. The total volume of six pieces of samples were added into a 100 ml volumetric flask. The raw-wet samples used water (998 kg/m³) as pycnometer liquid, while dried samples used ethanol (789 kg/m³).

Shrinkage (V/V_0) was calculated from the ratio between volume of dry samples (V) and the volume of the initial wet sample (V_0) , for each geometry. Shrinkage was determined by experimental tests (V_f^{EXP}/V_0) and also by simulation via FEM model (V_f^{FEM}/V_0) .

3.3 Mathematical modeling of drying kinetics

This work considered two case studies to the mathematical modeling of drying kinetics. The Case study 1 assumed the constant drying rate period combined with analytical model of Fick's Second Law for spheres, being equivalent spherical diameters, and concerns the physics of one-dimensional mass transfer by diffusion in non-deformed materials. The Case study 2 investigated the pseudo-constant drying rate with solid shrinkage due to moisture loss by mass diffusion, adapted from a previous work (SILVA JÚNIOR et al., 2019). The finite element method (FEM) via COMSOL Multiphysics software numerically solved the coupled partial differential equations involving mass transfer, fluid flow and geometry shrinkage (ALE method). FEM methods in Case 2 were applied to three-dimensional shrink polyhedrons and which are not possible to solve analytically.

The potatoes were cut into cylinder (CL), cube (CB), rectangular parallelepiped (PL) and triangular prism (PM), with assumption of mass transfer over the three-dimensional solid surface. The drying models also assumed negligible heat transfer, constant properties of drying air and constant concentration of dry solids (RUIZ-LÓPEZ et al., 2012; CURCIO; AVERSA, 2014). Table 3.1 contain a summary of mathematical models and statements considered on case studies 1 and 2.

Description	Case 1	Case 2
Mass transfer	Linear model coupling the one-dimensional transient diffusion in spherical coordinates	Three-dimensional transient diffusion and convection in cartesian coordinates
Mathematical model	Constant drying rate period combined with Fick's Second Law	FEM model with coupling of Fick's Second Law, external air flow and solid shrinkage
Solid geometry	Sphere with equivalent volume of a polyhedron	Cylinder, cube, parallelepiped and prism
Moving boundary shrinkage model	$d_i = d_0$	$\frac{\partial e}{\partial t} = \frac{J_n M_w}{\rho_w}$
Initial moisture within solid domain	$c_2(r,0) = c_2^0$	$c_2(e,0) = c_2^0$
Boundaryconcentrationconstraint ($t > 0$)	$c_2(R,t) = c_2^{eq}$	$K_p = \frac{c_1^{sat}}{c_2^{eq}}$
Concentration axis symmetry	$\frac{\partial c_2}{\partial r} = 0$, at $r = 0$	n.a.
Water concentration in inlet air	n.a.	$c_1(t) = c_1^0$
Inlet air velocity	n.a.	$v = v_1$

Table 3.1. Summary of mathematical models for convective drying in case studies 1 and 2.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

3.3.1 Case study 1: Coupling constant drying rate period and diffusional mass transfer

Case study 1 assumed the constant drying rate period at beginning of convective drying and the diffusional mass transfer as a second step of drying profiles. The spherical equivalent diameters were evaluated for each polyhedron shape: cylinder (CL), cube (CB); parallelepiped (PL) and prism (PM).
The period of constant drying rate was adjusted by a linear model and the coefficient of the constant drying rate (N_c, s^{-1}) was then determined by Eq. (13), for $t \le t_{crit}$. Thus, the period of linear decrease in concentration ranged from 0 s a t_{crit} .

$$XR = A - N_c \cdot t \tag{13}$$

Diffusional mass transfer was adopted in extended periods of drying ($t > t_{crit}$). By considering constant effective diffusion coefficient D_{eff} , one-dimensional transient diffusion in Spherical coordinates becomes:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{eff} \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) \tag{14}$$

in which c = c(r,t) is water concentration (mol.m⁻³) at any position r (m) in equivalent sphere and time t (s).

Uniform moisture X^0 was initially assumed throughout potato piece, i.e. $X(r,0) = X^0$.

At the beginning of drying, the water concentration on solid surface was kept constant, $X(R_s,t) = X^{eq}$ (i.e. non-null Dirichlet boundary condition). At the sphere origin, the symmetry of moisture profile is assumed: $\partial X/\partial r = 0$ at r = 0 (i.e. null Neumann condition).

In this case study, solid dimension was assumed to remain constant at its initial volume, without computation of the shrinkage effect. Accordingly, the total amount *XR* of moisture that migrated from potato piece to drying air was determined by the analytical solution of Fick's Second Law in spherical coordinates (CRANK, 1975):

$$XR = \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} exp\left(-\frac{n^2 \pi^2 D_{eff} t}{R_s^2}\right)$$
(15)

3.3.2 Case study 2: Finite-elements computational modeling

FEM model applied in Case study 2 coupled three-dimensional fluid flow, mass transfer physics and geometry shrinkage in COMSOL Multiphysics 5.2. The model was adapted from a previous study concerning the modeling of drying of gel slabs (SILVA JÚNIOR et al., 2019). The current FEM model is suitable for more realistic problems and computed the solid shrinkage in three-dimensions polyhedrons.

The molar concentration of water in the drying air domain (c_1 , mol.m⁻³) was evaluated by the convective moisture transfer:

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} - D_{air} \nabla^2 c_1 + \nu \cdot \nabla c_1 = 0 \tag{16}$$

in which v is air flow velocity, and D_{air} is effective water diffusivity in drying air, estimated via Chapman-Enskog theory and Lennard-Jones potential parameters (CUSSLER, 2009). Mass conservation of the inlet and outlet flowing air domain was denoted by:

$$\rho_1(\nabla \cdot v) = 0 \tag{17}$$

Viscous effects of air drying around the potato polyhedrons considered the threedimensional transient model and incompressible flow, and were computed from Navier-Stokes equations:

$$\rho_1 \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_1 (v \cdot \nabla) v = \nabla \cdot \left[-P + \mu (\nabla v + (\nabla v)') \right] + F$$
(18)

in which *P* is the pressure term, and *F* is the gravity force.

The molar concentration of water in the potato domain (c_2 , mol.m⁻³) was obtained by diffusive mass transfer:

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} - D_{eff} \nabla^2 c_2 = 0 \tag{19}$$

in which D_2 is the effective water diffusivity in the solid potatoes.

Case study 2 considered the solid matrix as being isotropic and evaluated the initial and boundary conditions as detailed by Silva Júnior et al. (2019).

The molar concentration of water in inlet drying air (c_1^0 , mol.m⁻³) was obtained from ideal gas law, considering the partial pressure of water (P_w , Pa), drying air temperature (T, K), and the ideal gas constant ($R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$):

$$c_1^0 = \frac{P_W}{RT} \tag{20}$$

For the solid domain, the molar concentration of water in wet potatoes (c_2^0 , mol.m⁻³) were obtained from relationship between the wet solid density (ρ_2 , kg.m⁻³), molecular weight of water ($M_w = 18.01528 \cdot 10^{-3}$ kg.mol⁻¹), and the initial moisture in dry-basis (X^0 , kg.kg⁻¹):

$$c_2^0 = \frac{\rho_2}{M_w} \frac{X^0}{(1+X^0)} \tag{21}$$

Partition coefficients K_p determined the water concentration at air-solid boundary, and were obtained by the ratio between water vapor concentration in air (c_1^{sat} , mol.m⁻³) and equilibrium concentration on sample surface (c_2^{eq} , mol.m⁻³):

$$K_p = \frac{c_1^{sat}}{c_2^{eq}} \tag{22}$$

Solid deformation was estimated from moisture loss over drying surfaces, and the shrinkage of potatoes were simulated by Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method (SUN et al., 2011; AJANI et al., 2017; SILVA JÚNIOR et al., 2019). The moving boundary velocity

 $(\overrightarrow{v_n}, \text{ m.s}^{-1})$ was evaluated from relationship between the normal molar diffusion flux $(J_n, \text{mol.m}^{-2}.\text{s}^{-1})$, density of water $(\rho_w, \text{kg.m}^{-3})$, and molecular weight of water $(M_w, \text{kg.mol}^{-1})$:

$$\overrightarrow{v_n} = -\frac{\partial e}{\partial t} = -\frac{J_n M_w}{\rho_w} \tag{23}$$

3.3.3 Statistical measurements

These models were applied to experimental data considering the boundary conditions listed in Table 3.1. Specifically, effective mass diffusivity D_{eff} (m²·s⁻¹) was obtained by nonlinear fitting of diffusion models against experimental drying kinetics, i.e. D_{eff} resulted from the smallest deviation between experimental and simulated data. While Mathematica Wolfram v.12 software performed least-squares regression through Levenberg-Marquadt method, COMSOL Multiphysics v5.2 software used BOBYQA optimization method.

Coefficient of determination (R²) and mean square error (RMSE) were used as goodness of fit parameter, namely:

$$R^{2} = 1 - \left(\frac{\sum_{i}^{N} (O_{i} - P_{i})^{2}}{\sum_{i}^{N} (O_{i} - \overline{P_{i}})^{2}}\right)$$
(24)

$$RMSE = \left(\sum_{i}^{N} \frac{(O_{i} - P_{i})^{2}}{N}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(25)

in which P_i and O_i refer to experimentally observed and numerically simulated values, respectively, and N is the number of observations in the data set. Best-fit was assumed when RMSE was minimized and R² was maximized.

3.4 Results and discussion

3.4.1 Characterization of potato pieces in different geometries

Figure 3.1 shows the pieces of raw potato cut into cylinder, cube, parallelepiped and prism geometries. The pieces were submitted convective drying and produced dry and shrinking samples. Figure 3.1 also illustrates the geometric shapes and boundary conditions applied in case studies 1 and 2 of the mathematical modeling.

Trial / Shape	Cylinder	Cube	Parallelepiped	Prism
Raw potato (V _i) "Experimental"				
Dry potato (V _f) "Experimental"				
Case 1 ($V_i = V_f$) "Linear-diffusional model		(Equivalent	spherical diameter)	-di
Case 2 (V _i) vair," "FEM model"	fair ex h		ex ey h	
Case 2 (V _f) "FEM model"				

Figure 3.1. Scheme of the boundary conditions applied in case studies 1 and 2.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

The drying study aimed to evaluate the influence of geometric shape on drying kinetics. The samples were cut, maintaining the mass and similar dimensions. Table 3.2 presents the parameters obtained in the preparation stage of raw potato pieces, such as the dimensions of the polyhedron (h, e_x , e_y e e_z), mass (m_i) and volume (V_i) of the sample, equivalent spherical diameter (d_i), specific area (S_i) and solid density (ρ_i). The average density of dry potato (ρ_f) is also displayed. These results correspond to the mean and standard deviation, obtained from the preparation of the samples, in six replicates for each experiment.

Parameter	CL	СВ	PL	PM
<i>h</i> , Height (cm)	1.26 ± 0.07	1.10 ± 0.05	0.73 ± 0.05	1.45 ± 0.14
e_x , Diameter or Edge (cm)	1.04 ± 0.02	1.06 ± 0.05	1.62 ± 0.09	1.33 ± 0.14
e_y , Edge (cm)	n.d.	1.02 ± 0.04	0.99 ± 0.07	1.21 ± 0.10
e_z , Edge (cm)	n.d.	n.d.	n.d.	1.20 ± 0.10
m_i , Wet sample mass (g)	1.23 ± 0.03	1.26 ± 0.01	1.21 ± 0.04	1.22 ± 0.01
V_i , Initial volume (cm ³)	1.07 ± 0.10	1.18 ± 0.12	1.16 ± 0.11	0.96 ± 0.12
d_i , Equivalent diameter (cm)	1.27 ± 0.04	1.31 ± 0.05	1.30 ± 0.04	1.22 ± 0.05
S_i , Specific area (cm ² /g)	4.75 ±0.14	5.32 ±0.03	5.80 ±0.31	5.53 ±0.06
$ \rho_i $, Solid density of wet potatoes (g·cm ⁻³)	1.052 ± 0.013	1.061 ± 0.010	1.060 ± 0.014	1.066 ± 0.010
$ \rho_f $, Solid density of dry potatoes (g·cm ⁻³)	1.189 ± 0.076	1.103 ± 0.039	1.225 ± 0.045	1.212 ± 0.099

Table 3.2. Common parameters of potato pieces.

n.d.: Not determined.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

As expected, there was no significant difference in relation to the density of the samples, since they were the same raw material and initial composition. The density of raw potatoes (ρ_i) varied from 1.052 to 1.066 g.cm⁻³, while the density of dry potatoes (ρ_f) was among 1.103 to 1.225 g.cm⁻³. These results are consistent with another study found in the literature, in which potato density increased with drying, starting from 1.055 g.cm⁻³ to 1.273 g.cm⁻³ (APRAJEETA; GOPIRAJAH; ANANDHARAMAKRISHNAN, 2015). With drying, an increase in density was observed, which may be related to simultaneous mass loss due to water removal and shrinkage of the solid.

The mass of the moist pieces (m_i) remained between 1.21 and 1.26 g, and produced solids with equivalent spherical diameter (d_i) between 1.22 and 1.31 cm.

The specific area (S_i) presented lower value for cylindrical samples (4.75 ±0.14 cm²/g), evidencing greater measurement for these geometries, since the mass and dimensions between all pieces were similar.

3.4.2 Operational conditions of convective drying

Table 3.3 shows the parameters that remained fixed in the drying experiments, and also used in numerical simulations. The temperature and relative humidity of the room temperature were monitored, and the air velocity was maintained at 0.5 m·s⁻¹ in all drying experiments.

Parameters	Value
v_1 , Inlet air velocity (m.s ⁻¹)	0.50 ±0.05
T_{room} , Room air temperature (°C)	25 ±2
<i>RH_{room}</i> , Room air relative humidity (-)	50% ±3%
<i>Y</i> , Dryer tunnel height (m)	0.10
Z, Length of dryer tunnel (m)	1.0
M_w , Water molar mass (kg.mol ⁻¹)	0.018015
<i>R</i> , Ideal gas constant (J.mol ⁻¹ K ⁻¹)	8.3145

Table 3.3. Fixed parameters of convective drying.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

The drying experiments used air at 40, 60 and 80 °C and in Table 3.4 shows the thermophysical useful in FEM model. Some properties of air and water vapor such as liquid water density and water vapor saturation pressure have been found in the literature (BORGNAKKE; SONNTAG, 2013). The diffusion coefficients of water vapor in the air (D_{air}) were estimated using the *Chapman-Enskog theory* and *potential Lennard-Jones parameters* (CUSSLER, 2009). All parameters and properties listed here were used in the drying models to simulate drying profiles.

Parameters	Drying conditions		
<i>T</i> , Drying temperature (°C)	40	60	80
ρ_1 , Air density (kg/m ³)	1.127	1.060	0.9996
<i>RH</i> , Relative humidity of inlet air (-)	21.5%	7.9%	3.3%
D_{air} , Diffusivity of water in air (cm ² .s ⁻¹)	0.275	0.309	0.3445
ρ_w , Density of water (kg.m ⁻³)	992.20	983.20	971.80
<i>P^{sat}</i> , Water vapor saturation pressure (Pa)	7377	19944	47562

Source: (OWN AUTHORSHIP).

Table 3.4. Air and water properties related to temperatures at temperatures of 40, 60 and 80 °C.

3.4.3 Convective drying experiments with shrinkage

Figure 3.1 presents the dried potato pieces acquired at the end of the drying of each polyhedron. The images depict shrinkage, in which it is possible to observe the decrease in sample volume and surface deformation. During drying, the deformation was variable in a sample, i.e., the dry samples presented deviations in relation to their final shape.

Table 3.5 presents values of initial moisture content on dry basis (X^0) and equilibrium on dry basis (X^{eq}) for dried potato samples at different temperatures of 40, 60 and 80 °C and also presents the values of water vapor concentration in the air domain (c_1^{sat}) and the equilibrium concentration of the sample surface (c_2^{eq}), used to calculate the partition coefficient (K_p).

Regarding the values of X_0 , no statistically significant difference as expected because all samples were the same material and this parameter was between 4.78 and 5.87 kg/kg d.b. The values of initial moisture content found in this study are in accordance with values found in the literature as in Hassini et al. (2007) that reported initial moisture content values between 4.0 to 4.5 kg/kg d.b. and in Khan et al. (2017) that found initial moisture value of 6.8 kg/kg d.b. This variation in the measured values and the values found in the literature is due to the fact that potatoes have different commercial varieties and this may explain the variation of the initial moisture values.

In relation to the values of X_f , it was possible to observe that at the temperature of 40 °C the final moisture is higher in relation to the other temperatures, which can show that in this drying temperature the equilibrium moisture was not reached or that not enough time was left for the equilibrium moisture to be reached. In the literature, it was reported that the final moisture of the potato on a dry basis varies from 0.19 to 0.24 kg/kg d.b. (APRAJEETA; GOPIRAJAH; ANANDHARAMAKRISHNAN, 2015), and which are in accordance with the values found in this work, for drying at 40 °C. However, the potato pieces did not reach the final equilibrium moisture.

The molar concentration of water in the solid (c_2^0) had approximate values at 50000 mol.m⁻³, which indicates that the initial moisture remained similar among all samples. The increase in drying temperature resulted in a decrease in the equilibrium concentration (c_2^{eq}) .

The values of partition coefficient (K_p) were obtained from the ratio between the values of molar concentration of water in the air (c_1^{sat}) and equilibrium concentration on the surface of the solid (c_2^{eq}) . The values were between 1.98 and 29.5, and indicate higher drying capacity for high temperature operating conditions (80 °C).

Sample	Т	<i>X</i> ⁰	X ^{eq}	<i>c</i> ⁰ ₂	c_2^{eq}	c_1^{sat}	K _p
	(°C)	(kg/kg)	(kg/kg)	(mol/m ³)	(mol/m ³)	(mol/m ³)	(10 ⁻⁴)
CL	40	5.87 ±0.78	0.32 ±0.11	49988	14285	2.83	1.98
CL	60	5.66 ± 0.18	0.16 ± 0.02	49152	8276.8	7.2	8.70
CL	80	4.78 ±0.24	0.14 ± 0.05	48633	5497.2	16.2	29.5
CB	40	5.20 ±0.20	0.20 ± 0.01	49051	10470	2.83	2.71
CB	60	5.35 ±0.12	0.20 ± 0.03	49548	9945.2	7.2	7.24
CB	80	4.60 ±0.15	0.19 ± 0.12	48836	9173.6	16.2	17.7
PL	40	5.77 ±1.02	0.34 ± 0.03	50484	15122	2.83	1.87
PL	60	5.25 ±0.17	0.19 ± 0.02	49728	9634.9	7.2	7.47
PL	80	5.22 ±0.51	0.18 ± 0.01	48730	8974.3	16.2	18.1
PM	40	5.27 ±0.33	0.28 ± 0.01	49332	13111	2.83	2.16
PM	60	4.98±0.49	0.23 ±0.08	49597	10528	7.2	6.84
PM	80	5.34 ±0.82	0.13 ±0.01	49890	5563.9	16.2	29.1

Table 3.5. Drying temperature, moisture content and partition coefficients.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

Erro! Fonte de referência não encontrada. illustrates the drying kinetic profiles for cylinder, cube, parallelepiped and prism polyhedra at temperatures of 40, 60 and 80 °C. As expected, shorter drying periods were obtained at high temperatures. With drying at 40 °C, it was observed that after 27000 s (7.5h) the moisture reached the equilibrium. At 60 °C, the equilibrium condition in all samples was observed after 16000 s (4.5h), while at 80 °C this condition was reached from 11000 s (3h).

The potato cut in distinct geometries did not influence the drying kinetics, evidenced by the similar drying profiles. This result is in accordance with the literature, showing that only thickness (solid volume) and compaction could increase or reduce the drying time (DEFRAEYE, 2017).

3.4.4 Modeling and simulation of convective drying of potato pieces

The mathematical modeling and drying simulation were divided into two case studies for this work. For the two proposed models, the statistical parameters RMSE and R² indicated a good fit to the experimental data. A good fit indicates low RMSE values and high R² values.

Table 3.6 presents the coefficients and parameters obtained from the nonlinear regression of the constant rate period model coupled to the diffusion period, called case study 1. The critical time (t_{crit}) and moisture (X_{crit}) were considered as the point of intersection between the end of the linear model and the beginning of the diffusional model. The values of effective mass diffusivity (D_{eff}) correspond to the nonlinear period of drying kinetics.

Sample	t _{crit} (s)	X _{crit} (kg·kg ⁻¹ d.b.)	$\frac{D_{eff} \cdot 10^{10}}{(m^2/s)}$	RMSE	R²
CL40	4921.5	2.43	4.33	0.0442	0.9739
CL60	2532.7	2.22	8.64	0.0235	0.9907
CL80	1684.9	1.86	13.13	0.0202	0.9923
CB40	5094.8	2.18	4.16	0.0404	0.9766
CB60	2628.3	2.17	8.56	0.0296	0.9860
CB80	1726.6	1.79	14.14	0.0251	0.9886
PL40	4589.1	2.18	5.85	0.0320	0.9844
PL60	2938.5	1.81	9.90	0.0267	0.9878
PL80	1843.5	1.81	15.51	0.0280	0.9870
PM40	5084.9	2.05	4.36	0.0384	0.9796
PM60	2511.5	1.89	9.06	0.0242	0.9899
PM80	1640.3	1.92	14.22	0.0222	0.9906

Table 3.6. Results of time and critical moisture, effective diffusivity and statistical parameters

 for case study 1.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

Through the linear model of case study 1, it can be observed that the increase in drying temperature from 40 °C to 80 °C provided a reduction in t_{crit} and X_{crit} values, evidencing the fastest drying.

For the temperature of 40 °C the end of the linear period remained close to 5000 s, and produced potato slices with average critical moisture around 2.20 kg/kg d.b.. At 60 °C the end of the critical linear period remained close to 2000 s, and produced potato slices with average critical moisture around 2.00 kg/kg d.b.. Finally, at 80 °C the end of the critical linear period remained close to 1700 s, and produced potato slices with critical moisture around 1.85 kg/kg d.b..

Case study 1 computed the D_{eff} values for the decreasing drying rate period, in which the moisture migrates by diffusion in the solid domain.

The average value of D_{eff} for the temperature of 40 °C was $4.68 \cdot 10^{-10} \pm 0.79 \cdot 10^{-10}$ m²/s, while for the temperature of 60 °C was in $9.04 \cdot 10^{-10} \pm 0.61 \cdot 10^{-10}$ m²/s, and for the temperature of 80 °C equal to $14.25 \cdot 10^{-10} \pm 0.98 \cdot 10^{-10}$ m²/s. The minimum value of D_{eff} was obtained for the sample CB40 ($4.16 \cdot 10^{-10}$ m²/s), and the maximum value for the sample PL80 ($15.51 \cdot 10^{-10}$ m²/s).

Table 3.7 presents the coefficients and parameters obtained by the BOBYQA optimization method with the COMSOL Multiphysics v5.2 software, called case study2.

Sample	$D_{eff} \cdot 10^{10} ({\rm m^2/s})$	RMSE	R²
CL40	2.57	0.0279	0.9896
CL60	4.23	0.0376	0.9761
CL80	6.52	0.0307	0.9821
CB40	2.21	0.0220	0.9930
CB60	4.02	0.0280	0.9874
CB80	5.60	0.0414	0.9691
PL40	2.63	0.0217	0.9928
PL60	3.55	0.0246	0.9896
PL80	5.25	0.0292	0.9857
PM40	1.39	0.0283	0.9889
PM60	2.42	0.0298	0.9846
PM80	3.56	0.0296	0.9832

Table 3.7. Results of effective diffusivity for case study 2 and statistical parameters.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

The diffusional model applied in case study 2 considered three-dimensional solids and included the term of solid retraction and was numerically resolved by the finite element method (FEM) in COMSOL *Multiphysics*. In Figure 3.2 it is possible to observe the 3D solids and shrinkage over the drying time for all the different geometries at the temperature of 60 °C.



Figure 3.2. Shrinkage of polyhedral potatoes obtained via FEM model in case study 2.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

Case study 2 computed the values of D_{eff} for the decreasing drying rate period, in which there is an increase in the diffusion coefficient with the increase in drying temperature. The average value of D_{eff} at temperature of 40 °C was $2.20 \cdot 10^{-10} \pm 0.57 \cdot 10^{-10}$ m²/s, while for the temperature of 60 °C was $3.56 \cdot 10^{-10} \pm 0.81 \cdot 10^{-10}$ m²/s, and for the temperature of 80 °C equal to $5.23 \cdot 10^{-10} \pm 1.24 \cdot 10^{-10}$ m²/s. The minimum value of D_{eff} was obtained for the PM40 sample $(1.39 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s})$, and the maximum value for the PL80 sample $(6.52 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s})$.

Both models showed good statistical fitting and the coefficients of effective mass diffusivity corroborate with the literature, i.e. $3.55 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ a $19.2 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ (HASSINI et al., 2007). Foods such as banana, potato, carrot, pear and apple have diffusivity values in order of magnitude close to those obtained in this study, which varied from 10^{-11} to $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ (KHAN et al., 2017). In a previous study, the diffusion coefficient for starch-alginate gels obtained by the two-dimensional FEM model was between $1.65 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ and $12.13 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ (SILVA JÚNIOR et al., 2019).

Figure 3.3 shows the drying curves of moisture content for case studies 1 and 2, while Figure 3.4 shows the drying rate curves.

The potatoes sliced as polyhedral shapes presented mass around 1.20 g, similar volumes (1.10 cm^3) and similar specific area $(5.53 \text{ cm}^2/\text{g})$. The cylinder geometry presented lower value of specific area 4.75 cm²/g. However, the drying tests showed that potato slices cut into different geometries, but with same mass and volume, not changed the drying profiles or drying performance.



Figure 3.3. Experimental and predict moisture profiles obtained from models in case studies 1

Source: (OWN AUTHORSHIP).



Figure 3.4. Experimental and predict drying rate profiles obtained from case studies 1 and 2.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

3.4.5 Volumetric shrinkage of potatoes

Optimal shrinkage is part of the idea that the entire volume reduction is exactly the same as the volume of water removed during the drying process, but most food products do not follow this ideal shrinkage rule. The type of drying method and drying conditions influence shrinkage (JOARDDER; KUMAR; KARIM, 2017; NGUYEN et al., 2017). Drying promoted the retraction of the specimens, resulting from the water output and collapse of the cell structure, and the values of experimental shrinkage and the shrinkage obtained numerically can be observed in Figure 3.5.

The shrinkage value expressed in percentage should be understood as the size that the sample was in relation to the initial volume of each sample, the lower the value presented, the greater the final shrinkage suffered by the sample. The experimental volume observed for the samples had a tendency to start with a greater shrinkage and when the temperature was increasing the shrinkage had the tendency to decrease and this can be explained due to the formation of pores during drying.

The plant-based materials contain some empty spaces in their fresh state and that drying methods and conditions influence the porosity of the dry final product (JOARDDER; KUMAR; KARIM, 2017). The shrinkage for cylindrical samples was $14.5\% \pm 1.5\%$, for cubic samples was $15.8\% \pm 0.8\%$, for parallelepiped samples was $13.9\% \pm 0.8\%$ and for prism samples it was $15.0\% \pm 1.5\%$.

The shrinkage obtained by the FEM model via COMSOL *Multiphysics* software uses the ideal shrinkage concept for calculations and does not take into account the initial pores that the samples may have or the formation of pores during drying. It is possible to observe that the shrinkage values by this method it increases with the temperature increase for all samples. The shrinkage for cylindrical samples was $21.4\% \pm 2.3\%$, for cubic samples was $24.4\% \pm 2.0\%$, for samples in parallelepiped format was $26.1\% \pm 2.3\%$ and for prism-shaped samples it was $26.0\% \pm 2.7\%$.

The shrinkage obtained experimentally and by numerical method showed deviations between experimental and simulated, being the smaller values resulted from FEM method. Figure 3.5 showed both shrinkage (V/V_0) and specific area (S_l) profiles in relation to dimensionless moisture ratio (XR). The solid matrix of the potato pieces probably densified during drying, and consequently the deformation and compaction of the solid became higher in relation to the simulated values. The solid matrix of fruits and vegetables, including fresh potatoes, contains internal pores that are filled with water, and its internal structure could rearrange and become more compact than the volume of water removed during drying. This supposition can explain the differences in volumetric deformation, considering the solid deformation by water diffusion flux in FEM model. The potatoes cut as cylinder showed a higher shrinkage if compared to the others polyhedrons, and the simulated results were nearest to experimental data. The experimental values showed no substantial variations in volumetric deformation for the other geometries, indicating similar shrinkage for all potato pieces.

The shrinkage of the solid resulted in an increase in the specific surface, as shown in Figure 3.5. The S_i values were higher for prism potatoes (PM), followed by parallelepiped (PL), cube (CB) and cylinder (CL). During drying, the specific surface increases with the decrease of moisture content, and this tendency was observed in all type of polyhedron piece and drying temperature.

The effects of drying temperature can be also observed in Figure 3.5. The simulated data indicated higher shrinkage for drying at high temperatures, and drying tests at 80 °C showed better prediction than the trials at 40 or 60 °C. The experimental values of shrinkage (13.2%-16.7%) were similar between the studied geometries and temperatures, and showed no statistical difference for temperature ranging from 40 to 80 °C.



Figure 3.5. Shrinkage and specific area in relation to moisture ratio.

3.5 Conclusion

Fick's diffusion model described the drying of polyhedrons of potatoes through two case studies: the combined linear diffusion model and the numerical method. Case study 1 considered the polyhedrons as having a spherical diameter and an initial constant drying rate period, while case study 2 coupled the solid shrinkage in the FEM model. Both models well explained the drying profiles. The effective mass diffusivity was a transport parameter invoked in all of the case studies. The best-fit values of case 1 revealed a critical moisture in the range of 1.8 to 2.4 kg·kg⁻¹ d.b. and a mass diffusivity from $4.3 \cdot 10^{-10}$ to $15.5 \cdot 10^{-10}$ m²·s⁻¹. Case study 2 predicted the solid shrinkage (*V*/*V*₀) ranged from 19.6% to 29%, and diffusion coefficients from $2.2 \cdot 10^{-10}$ to $6.5 \cdot 10^{-10}$ m²·s⁻¹. The lower mass diffusivities observed in case 2 are explained by the pseudo-constant rate period, due to solid shrinkage and change of solid surface area, resulting in lower drying time toward equilibrium moisture. When shrinkage is considered, diffusive mass transfer (moisture) was the main mechanism in potatoes drying. The cutting of potatoes as polyhedrons with similar volumes did not substantially affect the drying rate, which shows that the mass diffusion coefficients are an independent property of the material. The potatoes cut in cylinders showed lower values for specific surface area (*S_i* from 4.7 to 4.9 cm²·g⁻¹), and better predicted the shrinkage profile by the FEM model. The developed drying models proved to be useful in describing the drying profiles of food materials with the evaluation of material properties and prediction of solid shrinkage.

Nomenclature

Α	Coefficient of the constant drying rate period (dimensionless)
С	Water concentration (mol.m ⁻³)
D _{air}	Diffusivity of water in air domain (m ² .s ⁻¹)
D _{eff}	Effective diffusivity of water in solid domain (m ² .s ⁻¹)
е	Edge or diameter of polyhedron (m)
h	Height of polyhedron (m)
J _n	Total normal molar flux (mol.m ⁻² .s ⁻¹)
K_p	Partition coefficient (dimensionless)
M_w	Water molar mass (kg.mol ⁻¹)
т	Mass (kg)
N _c	Coefficient of the constant drying rate period (s ⁻¹)

Р	Pressure (Pa)
R_s	Equivalent spherical radius (m)
R	Universal gas constant $(J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$
RH	Relative humidity (dimensionless)
RMSE	Root-mean-square error (dimensionless)
R^2	Coefficient of determination (dimensionless)
S	Specific area (m ⁻² .kg ⁻¹)
Т	Air temperature (°C or K)
t	Time (s)
V	Volume (m ³)
V/V_0	Shrinkage (dimensionless)
ν	Air velocity (m.s ⁻¹)
$\overrightarrow{v_n}$	Normal velocity of moving boundary (m.s ⁻¹)
X	Moisture content in dry basis (kg.kg ⁻¹)
XR	Moisture ratio (dimensionless)
ρ	Density (kg.m ⁻³)
μ	Dynamic viscosity (Pa.s)
CL	Sample label for cylinder polyhedron
СВ	Sample label for cube polyhedron
PL	Sample label for parallelepiped polyhedron
РМ	Sample label for prism polyhedron

References

- AJANI, C. et al. Parametric study and shrinkage modelling of natural rubber sheet drying using COMSOL multiphysics. **IOP Conference Series: Materials Science and Engineering**, v. 243, n. 1, 2017.
- ALBOSHARIB, D. et al. Effect of freezing and radiofrequency pretreatments on quality and kinetics of convective air-drying of potatoes. Journal of Food Processing and Preservation, v. 45, n. 12, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1111/jfpp.16062>.
- AOAC. Official methods of analysis of AOAC International. 18th. ed. Arlington, VA, USA: Association of Official Analytical Chemists, 2005.
- APRAJEETA, J.; GOPIRAJAH, R.; ANANDHARAMAKRISHNAN, C. Shrinkage and porosity effects on heat and mass transfer during potato drying. Journal of Food Engineering, v. 144, p. 119–128, 2015. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2014.08.004>.
- AVERSA, M. et al. Experimental Evaluation of Quality Parameters During Drying of Carrot Samples. Food and Bioprocess Technology, v. 5, n. 1, p. 118–129, 2012.
- BORGNAKKE, C.; SONNTAG, R. E. Fundamentos da Termodinâmica. 8° ed. [s.l.] Blucher, 2013.
- BOUTELBA, I. et al. Experimental data on convective drying of potato samples with different thickness. **Data in Brief**, v. 18, p. 1567–1575, 2018. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.dib.2018.04.065>.
- CASTRO, A. M.; MAYORGA, E. Y.; MORENO, F. L. Mathematical modelling of convective drying of fruits: A review. Journal of Food Engineering, v. 223, p. 152– 167, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2017.12.012>.
- CRANK, J. The Mathematics of Diffusion. 2° ed. London: Oxford University Press, 1975.
- CURCIO, S. et al. Formulation of a 3D conjugated multiphase transport model to predict drying process behavior of irregular-shaped vegetables. **Journal of Food Engineering**, v. 176, p. 36–55, 2016.
- CURCIO, S.; AVERSA, M. Influence of shrinkage on convective drying of fresh vegetables: A theoretical model. **Journal of Food Engineering**, v. 123, p. 36–49, 1 fev. 2014.
- CUSSLER, E. L. **Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems**. 3° ed. Cambridge: Cambridge, 2009.
- DEFRAEYE, T. Impact of size and shape of fresh-cut fruit on the drying time and fruit quality. **Journal of Food Engineering**, v. 210, p. 35–41, 2017.

GULATI, T.; UKIDWE, M.; DATTA, A. Engineering puffed ricePhysics Today, jul. 2018.

- HASSINI, L. et al. Estimation of potato moisture diffusivity from convective drying kinetics with correction for shrinkage. **Journal of Food Engineering**, v. 79, n. 1, p. 47–56, 2007.
- JOARDDER, M. U. H.; KUMAR, C.; KARIM, M. A. Prediction of porosity of food materials during drying: Current challenges and directions. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, v. 58, n. 17, p. 2896–2907, 22 nov. 2018. Disponível em: https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10408398.2017.1345852>. Acesso em: 3 fev. 2022.
- KHAN, M. I. H. et al. Determination of appropriate effective diffusivity for different food materials. **Drying Technology**, v. 35, n. 3, p. 335–346, 2017.
- MALEKJANI, N.; JAFARI, S. M. Simulation of food drying processes by Computational Fluid Dynamics (CFD); recent advances and approaches. Trends in Food Science and Technology, v. 78, n. June, p. 206–223, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.tifs.2018.06.006>.
- MUJUMDAR, A. S.; LAW, C. L. Drying Technology: Trends and Applications in Postharvest Processing. **Food and Bioprocess Technology**, v. 3, n. 6, p. 843–852, 23 abr. 2010. Disponível em: https://link-springercom.ez67.periodicos.capes.gov.br/article/10.1007/s11947-010-0353-1>. Acesso em: 28 nov. 2022.
- MULET, A. et al. Effect of shape on potato and cauliflower shrinkage during drying. **Drying Technology**, v. 18, n. 6, p. 1201–1219, 2000.
- NGUYEN, T. K. et al. Shrinkage and porosity evolution during air-drying of non-cellular food systems: Experimental data versus mathematical modelling. Food Research International. 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.foodres.2017.10.013>. Acesso em: 3 fev. 2022.
- PERUSSELLO, C. A. et al. Heat and mass transfer modeling of the osmo-convective drying of yacon roots (Smallanthus sonchifolius). Applied Thermal Engineering, v. 63, n. 1, p. 23–32, 5 fev. 2014.
- RAKESH, V.; DATTA, A. Microwave puffing: mathematical modeling and optimization. **Procedia Food Science**, v. 1, p. 762–769, 2011.
- RUIZ-LÓPEZ, I. I. et al. Analytical model for variable moisture diffusivity estimation and drying simulation of shrinkable food products. Journal of Food Engineering, v. 108, n. 3, p. 427–435, 1 fev. 2012.
- SABAREZ, H. T. Computational modelling of the transport phenomena occurring during convective drying of prunes. Journal of Food Engineering, v. 111, n. 2, p. 279–288, 1 jul. 2012.

- SENADEERA, W. et al. Influence of shapes of selected vegetable materials on drying kinetics during fluidized bed drying. Journal of Food Engineering, v. 58, n. 3, p. 277– 283, 2003.
- SILVA JÚNIOR, M. A. V. et al. Modeling of convective drying of cornstarch-alginate gel slabs. **Journal of Food Engineering**, v. 250, p. 9–17, 1 jun. 2019.
- SUN, M. et al. Simulation analysis of fluid-structure interactions with moving mesh. Advanced Materials Research, v. 305, p. 235–238, 2011.
- ZHU, Y. et al. Multiphase porous media model with thermo-hydro and mechanical bidirectional coupling for food convective drying. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 175, p. 121356, 1 ago. 2021.

4 CHAPTER III: MATHEMATICAL MODELING OF DRYING OF HYDROGELS VIA FEM METHOD AND TEXTURE ANALYSIS

ABSTRACT

This work aimed to develop numerical models to predict the moisture and deformation of cornstarch-alginate hydrogels, during convective drying at an air temperature of 60 °C and 0.5 m/s. The solids were molded in cylindrical geometry, and the transient three-dimensional FEM model predicted the drying profiles by diffusion-convection mass transport. The texture analysis evaluated the hyperelastic coefficients for hydrogels with moisture content ranging from 0.91 to 0.55 kg.kg⁻¹ w.b., giving a Young modulus ranging from 24 to 147 kPa, respectively. A dimensionless relationship between the moisture ratio and the elastic modulus produces a stiffness coefficient, used to adjust the moving boundary velocity and to predict volumetric deformation. Both models fit well the drying of hydrogels, with R² higher than 0.95. The FEM model simulated the shrinkage of hydrogels by evaluating the three-dimensional molar flux of water and the deformation of the mesh on the geometry boundaries. The FEM model coupled mass transfer and shrinkage of three-dimensional polyhedrons, with a mass diffusivity ranging from 2.38 to $5.46 \cdot 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. The presence of shrinkage changed the surface area of solids and increase the drying rate, evidencing a pseudo-constant rate period in the drying profiles. Therefore, developed models describe food materials drying with high shrinkage ratios.

KEYWORDS: convective drying; cornstarch-alginate; hydrogel; shrinkage, hyperelastic model; finite elements method

4.1 Introduction

Hydrogels are defined as polymeric materials that have a three-dimensional network structure. When dispersed in aqueous medium, hydrogels have the ability to swell without dissolving (RATNER, 1981). The main uses of hydrogels are in the controlled delivery and release of compounds, since they present biocompatibility, in addition to dispersing easily to the matrices in which they are incorporated (RISBUD et al., 2000). The properties of hydrogels depend on the physical-chemical characteristics of polymers that are part of their composition and external conditions (PICONE; CUNHA, 2011). The main polymers used in the formulation of hydrogels are sodium alginate, pectin, chitosan, and gelan gum. Combinations of two or more polymers have also been increasingly used in the production of hydrogels, with the aim of improving their properties, depending on the desired purpose.

Sodium alginate is an anionic polymer extracted from brown algae, formed by monomers α -L-guluronic acid (G) and (1-4)-linked β -manuronic acid (M) (THU et al., 1996). Generation of the three-dimensional structure known as the "*egg box*" model occurs by the connection of the G blocks of alginate with cations, such as Ca²⁺ and Mg²⁺ (GRANT et al., 1973). Sodium alginate is widely used as a wall material in the microencapsulation of compound (BHAGYA RAJ; DASH, 2022; TOPRAKÇI; ŞAHIN, 2022) and as dietary (BROWNLEE et al., 2005; PAXMAN et al., 2008), due to its gelling property and high biocompatibility and biodegradability.

Alginate hydrogels and the combination of alginate and starch have been used for the microencapsulation of several compounds, seeking to protect them and protect them against external factors, such as high temperatures or oxidation (DE CÁSSIA SOUSA MENDES et al., 2021; OBEROI et al., 2021; OLAYEMI; APEJI; ISIMI, 2022; TA et al., 2021). The use of starch combined with alginate can alter the hydrogel structure, causing the encapsulated

compound to be released more slowly (OKUNLOLA; ADEWUSI, 2019). In addition, protection against lipid oxidation was increased for wheat germ oil when a certain amount of corn starch was used in alginate hydrogels (FELTRE et al., 2020).

The drying of hydrogels is used in the food, pharmaceutical, and cosmetics industries to reduce the water content and obtain solid products with proper mechanical handling and encapsulation properties. (NICOLIN et al., 2018; MALEKJANI; JAFARI, 2018). The study of hydrogel drying is important because it allows to determine several properties of the material (BASTIANI et al., 2021). During the process of removing the water from the product, there is shrinkage, which is the decrease in the volume of the product. This phenomenon usually implies the formation of mechanical stresses and may generate a low quality product (ACHCHAQ et al., 2016; MAYOR; SERENO, 2004). The study of shrinkage in products should involve mechanical laws, taking into account the stresses and deformations of the material during drying (NGUYEN et al., 2017).

The drying of hydrogels requires the study of the shrinkage effects and mechanical properties on the moisture reduction. The mass transport phenomena can change with the solid matrix packing, and the drying rate is reduced with increasing solid density. The texture properties are useful to better explain the Hookean or hyperplastic behaviour of polymers and how their properties are affected by moisture and temperature (RATTI, 1994).

The mathematical modelling of drying is suitable to explain the transport phenomena by the main operation parameters and to optimize the process steps with a reduction in the number of experiments. This work aimed to develop numerical models using the finite element method applied to convective drying of hyperelastic materials. The FEM method was combined with correlations of texture profiles, and allowed to describe the convective drying of sodium alginate and corn starch hydrogels, resulting in proper prediction of solid shrinkage.

4.2 Material and methods

4.2.1 Material

The gels were produced from formulations containing native cornstarch and sodium alginate. Corn starch (Ingredion Brazil) with an initial moisture of 12.8 ± 2 g/100g was used as filling material for the gels. Sodium alginate (Protanal VK14, FMC Biopolymer) was dissolved in water at a concentration of 5%. Aqueous solution of CaCl₂ (Sigma-Aldrich) 1% w/w was used for ionic gelling of starch-alginate suspensions. Absolute ethanol (Dinâmica, Brazil) was used as a tensoactive for the dispersion of sodium alginate powder in distilled water.

4.2.2 Preparation of starch-alginate suspensions and ionic gelling

The preparation of hydrogel samples was adapted by Silva Júnior et al. (2019), in which suspensions containing corn starch were obtained in fractions of 50% (RC50 and GC50) and 90% (RC90 and GC90), presented in Table 4.1. The powder alginate fractions were previously dispersed in tensoactive ethanol and subsequently added water and corn starch.

Sample	RC50	RC90	GC50	GC90
Corn starch (g/100g d.b.)	50	90	50	90
Corn starch (g/100g w.b.)	5.2	33.2	5.2	33.2
Water (g/100g w.b.)	86.6	61.1	86.6	61.1
Sodium alginate (g/100g w.b.)	4.6	3.2	4.6	3.2
Ethanol (g/100g w.b.)	3.6	2.5	3.6	2.5
Heating temperature (°C)*	n.a.	n.a.	80	80

Table 4.1. Concentrations of corn starch and alginate suspensions and starch fractions after the ionic gelation and drying step.

* 60 min of heat treatment.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

The starch-alginate suspensions were packed in cylindrical PVC tubes of diameter 27.8 mm and submerged in a calcium chloride solution at 1% for 24 h. GC50 and GC90 samples were heated to 80 °C for 60 min, producing samples with gelatinized starch. The gels were cut into short cylinders about 25 mm high, as shown by Figure 4.1. The complete procedure can be viewed in the appendix A.



Figure 4.1. Preparation of gels in cylindrical geometry.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

4.2.3 Convective drying of hydrogels

Drying was carried out in a drying oven with air renewal and circulation (220V, Model MA 037, Marconi, Brazil). The drying air temperature was set at 60 °C, while the average air speed was kept fixed at 0.5 m/s. The gels of all different formulations (RC50, GC50, RC90, and GC90) were placed in the center of the device tray so that it was possible to circulate the air freely throughout the test body.

The wet gels were subjected to convective drying at 60 °C and 0.5 m/s and collected at intervals of 0, 0.5, 1.5 and 2 hours, producing samples with reduced moisture content. Wet and partially dried samples were applied in uniaxial compression tests to determine the coefficients of the Ogden hyperelastic model.

After convective drying, the samples were dried in an oven at 105 °C \pm 5 °C for 24 hours to determine the dry mass and total moisture content of the samples (AOAC, 2005).

After this step, the equilibrium moisture (W) can be calculated on a wet basis by the Eq. 26. From this value, it will be possible to find the moisture on dry basis (X) of the samples, by Eq. 27.

$$W_{b.u.} = \frac{m_{water}}{m_{sample}} \tag{26}$$

$$X_{b.s.} = \frac{W}{1 - W} \tag{27}$$

The experimental drying data were obtained in triplicate, for the formulations RC50, RC90, GC50 and GC90, and temperatures of 60 °C.

4.2.4 Texture Analysis

Uniaxial compression of the gels was obtained in a texturometer (model TAXT Plus, Stable Micro System, England) (Figure 4.2), equipped with 20 kg load cell and Exponent software (Stable Micro Systems). The tests used a compression speed of 1 mm/s and a displacement of 5 mm.

Cylindrical alginate starch gels, with dimensions close to d = 25 mm and $H_0 = 25$ mm (Figure 4.3), were used as samples in the uniaxial compression tests, in which strength and height values were obtained. The gels presented variable initial composition, represented by the nomenclatures RC50, RC90, GC50 and GC90, as described in Table 4.1 (SILVA JÚNIOR et al., 2019). The wet gels were submitted to convective drying at 60 °C and 0.5 m/s and collected at intervals of 0, 0.5, 1.5 and 2 hours, producing samples with different moisture content. Stress profiles by deformation of wet and partially dry gels were collected in triplicates.



Figure 4.2. Photograph of the TA XT plus texturometer.

Source: (OWN AUTHORSHIP).



Figure 4.3. Example of the sample used in uniaxial compression tests.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

4.2.5 Evaluation of mechanical coefficients

From the data on the initial height of the sample (H_0 , m), and height (h, m) and force (F, N) acquired during compression, it was possible to obtain the stress profiles (σ , Pa) by deformation (ε , m.m⁻¹), as described by Eq. 28 an Eq. 29 (YU; SANTOS; CAMPANELLA, 2012).

$$\sigma = \frac{F}{A} \tag{28}$$

$$\varepsilon = -\ln\left(\frac{h}{H_0}\right) \tag{29}$$

The value of the stretch ratio (λ), applied to the Ogden model, was obtained from the Eq. 30 (GAMONPILAS; CHARALAMBIDES; WILLIAMS, 2009).

$$\lambda = \exp(\varepsilon) \tag{30}$$

The Hyperelastic model of Ogden (Eq. 31) it was adjusted by nonlinear regression to the experimental data of stress and strain, and the coefficients of initial shear modulus (μ , Pa) and constant of Ogden (α) (GAMONPILAS; CHARALAMBIDES; WILLIAMS, 2009).

$$\sigma = \frac{2\mu}{\alpha} (\lambda^{\alpha} - \lambda^{-\frac{1}{2}\alpha}) \tag{31}$$

The modulus of elasticity, or Young module, (E, Pa) could be calculated according to:

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\varepsilon} = E = 3.\,\mu\tag{32}$$

The integral area over the stress-strain profile was used to estimate the amount of compression energy (U, J).

4.2.6 Mathematical modeling of convective drying via FEM method

Two studies were conducted in this work related to the simulation of drying kinetics, which coupled the partial differential equations with regard to mass transfer, fluid flow, geometric shrinkage (ALE method) and addition of a term for mechanical behavior and was numerically solved by the finite element method (FEM) through COMSOL Multiphysics 5.2. The FEM model was constructed in Cartesian coordinates and allowed to simulate convective drying with shrinkage of three-dimensional polyhedra. The present mathematical model was elaborated from the two-dimensional model previously described (SILVA JÚNIOR et al., 2019; (SILVA JÚNIOR, 2018).

Figure 4.4 outlines the starch-alginate composition cylinders, the parameters monitored in the experimental convective drying tests, and their contour conditions used in the mathematical model. The FEM model was assigned as nomenclature index 1 for the air fluid domain, and index 2 for starch-alginate solids.

Figure 4.4. Scheme of the geometry used in the simulation of drying in a three-dimensional FEM model.



Source: (OWN AUTHORSHIP).

The molar concentration of water in the drying air domain (c_1 ,mol.m⁻³) was evaluated by convective moisture transfer, as can be seen in Eq. 33.

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} - D_{air} \nabla^2 c_1 + \nu \cdot \nabla c_1 = 0 \tag{33}$$

Where v corresponds to the speed of the airflow, D_{air} represents the effective mass diffusivity of water vapor in drying air, which was estimated by Chapman–Enskog theory and Lenard-Jones potential parameters (CUSSLER, 2009). The mass conservation of the inlet and outlet airflow domain was denoted by Eq. 34:

$$\rho_1(\nabla \cdot \nu) = 0 \tag{34}$$
The viscous effects of air drying around the starch-alginate cylinders considered the transient three-dimensional model and the incompressible flow, and were calculated from the Navier-Stokes equations, as Eq. 35.

$$\rho_1 \frac{\partial v}{\partial t} + \rho_1 (v \cdot \nabla) v = \nabla \cdot \left[-P + \mu (\nabla v + (\nabla v)') \right] + F$$
(35)

Where P is the term of pressure and its gravitational force F.

The molar concentration of water in the domain of the starch-alginate cylinders $(c_2, \text{mol.m}^{-3})$ was obtained by diffusive mass transfer, as shown in eq. 36:

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} - D_{eff} \nabla^2 c_2 = 0 \tag{36}$$

Where D_{eff} is the effective diffusivity of water in the starch-alginate cylinders.

In this study, the solid matrix was considered as isotropic and evaluated the initial and detailed boundary conditions as cited by Silva Júnior et al. (2019).

From the law of ideal gases, the molar concentration of water c_1^0 (mol.m⁻³) from the drying air at the inlet of the dryer was obtained by the ratio between the partial pressure of the water P_w (Pa) and the product between the ideal gas constant (R = 8.314 J/mol.K) and the drying air temperature T (K).

$$c_1^0 = \frac{P_W}{RT} \tag{37}$$

For the solid domain, or gels, the initial concentration of molar water concentration (c_2^0 , mol.m⁻³) of the wet starch-alginate cylinder was obtained by the relationship between the density of the wet solid (ρ_2 , kg.m⁻³), molar mass of water ($M_w = 18.01528$ g/mol) and the initial moisture on dry basis X^0 (kg/kg d.b.).

$$c_2^0 = \frac{\rho_2}{M_w} \frac{X^0}{(1+X^0)} \tag{38}$$

The partition coefficient (K_p) determined the water concentration at the air-solid limit and was obtained by the ratio between the concentration of water vapor in the air $(c_1^{sat}, \text{mol.m}^{-3})$ and the equilibrium concentration on the sample surface $(c_2^{eq}, \text{mol.m}^{-3})$.

$$K_p = \frac{c_1^{sat}}{c_2^{eq}} \tag{39}$$

4.2.7 Evaluation of Shrinkage of hydrogels during drying

The FEM model considered the three-dimensional shrinkage of the gels along the convective drying. The deformation of the computational mesh was estimated by the Lagrangian-Eulerian Arbitrary Method (ALE). The deformation of the solid domain was obtained by two case studies, which are described below.

In the first study, named FEM model, the shrinkage was proportional to the volume of water removed by drying. Solid deformation was estimated from moisture loss on the surfaces of starch-alginate cylinders (SILVA JÚNIOR et al., 2019; AJANI et al., 2017; SUN et al., 2011). The deforming boundary velocity ($\vec{v_n}$, m.s⁻¹) was evaluated from the relationship between the normal molar diffusion flow (J_n , mol.m⁻².s⁻¹), water density (ρ_w , kg.m⁻³), and water molecular weight (M_w , kg.mol⁻¹) as described by:

$$\overrightarrow{v_n} = -\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{J_n M_w}{\rho_w} \tag{40}$$

Additionally, the second case study, called Texture-FEM model, estimated shrinkage through velocity $(\vec{v_n})$ Eq.40, but corrected by a solid hardening coefficient (β).

With the loss of moisture during drying, the modulus of elasticity of the starch-alginate gels undergoes modifications. The literature shows that lower moisture content (X, kg.kg⁻¹ d.b.) results in higher values of Young modulus (E, Pa) (THUSSU; DATTA, 2012). Considering that the gels have hyperplastic behavior, the modulus of elasticity can be estimated from Eq. 32, previously described.

From experimental tests of moisture content and uniaxial compression, the profile of dimensionless moisture loss $(1 - X_R)$ was traced by the dimensionless modulus of elasticity (E_R) , as given by equations 41 and 42.

$$E_R = \frac{(E - Emin)}{(Emax - Emin)} \tag{41}$$

Where, E_{min} corresponds to the lowest value for the modulus of elasticity during moisture removal, E_0 the initial modulus of elasticity of the wet gel, and E_{max} the value of the modulus of elasticity for the dry gel and estimated as $E_{max} = 1.5 E_0$.

$$(1 - X_R) = 1 - \frac{(X - Xeq)}{(X_0 - Xeq)}$$
(42)

Where, X_0 is the initial moisture content of the wet gel, and X_{eq} the equilibrium moisture of the dry gel.

The β coefficient is the angular coefficient, obtained from the linear adjustment between E_R and $(1 - X_R)$, represented by Eq. 43.

$$E_R = \beta (1 - X_R) \tag{43}$$

By multiplying the moving boundary velocity $(\vec{v_n}, \text{ m.s}^{-1})$ by the dimensionless coefficient of hardening (β^{-1}) , the simulated shrinkage profile can be corrected and thus reduce

deviations from the experimental shrinkage values. Therefore, the second case study used Eq. 44 as an alternative to predict shrinkage using the ALE method.

$$\overrightarrow{v_n} = -\frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{J_n M_w}{\rho_w} \frac{1}{\beta}$$
(44)

4.3 Results and discussion

4.3.1 Drying experiments of starch-alginate hydrogels

The drying experiments of the starch-alginate gels were consistent with a previous study (SILVA JÚNIOR, 2018). During drying, moisture content and hydrogel diameter and height measurements were obtained to determine solid volume and shrinkage. Table 4.2 shows the initial dimensions of the gels for the formulations containing starch fractions at 50% (RC50 and GC50) and 90% (RC90 and GC90).

Table 4.2. Sample size and parameters applied to convective drying of starch-alginate gels at a temperature of 60 °C.

Sample	RC50	GC50	RC90	GC90
d, Diameter (cm)	2.60 ± 0.02	2.45 ± 0.04	2.56 ± 0.02	2.65 ± 0.03
h, Height (cm)	2.26 ± 0.08	2.17 ± 0.06	2.08 ± 0.13	2.49 ± 0.19
X_0 , Initial Moisture (-)	10.29 ± 0.06	8.41 ± 0.06	2.25 ± 0.03	1.85 ± 0.03
X_f , Final Moisture (-)	0.93 ± 0.05	0.48 ± 0.08	0.22 ± 0.04	0.18 ± 0.01
ρ_2 , Solid density of wet gel	1055.3 ± 3.6	1061.2 ± 9.3	1186.7 ± 46.4	1160.7 ± 23.9
(g.cm ²)				
$(g \cdot cm^{-3})$	1849.4 ± 94.9	1928.6 ± 91.7	1657.5 ± 24.7	1826.9 ± 81.1
D_{eff} , Mass diffusivity of water in solid (10 ⁻¹⁰ m ² ·s ⁻¹)	5.46	3.78	4.42	2.38

Source: (OWN AUTHORSHIP).

The cylindrical gels presented average diameter and height dimensions of 2.56 cm and 2.25 cm, respectively. Heat treatment at 80 °C, for samples GC50 and GC90, resulted in variations in the final diameter. The GC50 samples had about a 6% reduction in diameter compared to the raw starch (RC50), while the GC90 samples had about a 3.5% increase in diameter compared to the RC90 samples. It can be assumed that heat treatment at 80 °C provided expansion of the gel matrix, by swelling of starch granules, for samples with a higher starch concentration (GC90). On the other hand, samples (GC50) that have lower starch concentrations and undergone heat treatment may have had and exudation of water, and a small diameter retraction.

Figure 4.5 shows the shrinkage of the cylindrical gels of RC50 samples, collected in convective drying intervals of 0, 0.5, 1.5 and 2 h. Where *t* is the drying time in a convective oven and *X* is the moisture of the sample in kg/kg d.b.

Figure 4.5. Shrinkage of sample RC50 during convective drying.



Source: (OWN AUTHORSHIP).

4.3.2 Texture Analysis

Starch-alginate suspensions were prepared and cylindrical gels followed the formulations RC50, RC90, GC50 and GC90. The gels were subjected to uniaxial compression analysis in a texturometer as shown by Figure 4.6.



Figure 4.6. Gels in the texturometer submitted to uniaxial compression experiments.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

To investigate the mechanical properties of the gels, the uniaxial compression technique was used, which is a conventional test for this purpose (NAFO; AL-MAYAH, 2020). From the uniaxial compression tests, it was then possible to obtain the stiffness parameters of the gels and correlate them with the moisture content of the solid.

Hydrogels are known for their mechanical behavior as a hyperelastic solid; they exhibit a large deformation and a nonlinear stress-strain ratio. Alginate gels exhibit a mechanical behavior of nonlinear material and although there are several models for hyperelastic solids, the Ogden model was chosen because it presents good adjustments to the experimental data (NAFO; AL-MAYAH, 2020; DI GIUSEPPE et al., 2017). Therefore, drying the gels led to the reduction of moisture content and modified the texture parameters for the Ogden model (hyperelastic solid), modulus of elasticity, and the energy used for compression.

The Mathematica 12 software performed a non-linear regression to determine the Ogden parameters and also calculated the compression work by the integral of the stress x strain profile.



Figure 4.7. Uniaxial compression tests for collected starch-alginate samples.

Source: (OWN AUTHORSHIP).

Figure 4.7 shows the *stress* (kPa) graphs by *stretch* (-) obtained through uniaxial compression tests. It is possible to observe that the formulations with a lower amount of starch (RC50 and GC50) had a lower stiffness during drying, showing a maximum stress value after 2 hours of drying of 35 kPa for samples RC50 and 55 kPa for GC50 samples, and samples with a higher amount of starch (RC90 and GC90) had a higher stiffness during drying, reaching a maximum stress value of 85 kPa for RC90 samples and above 100 kPa for GC90 samples. During drying, a tendency for the samples to decrease stiffness in the first moments of drying was observed, which may be due to the softening of the samples and rearrangement of the structure, and with the continuation of drying, the stiffness of the material increases as expected. This trend was not observed in the GC90 formulation samples, and this is due to this

formulation containing a higher concentration of starch and going through the gelatinization process, which causes the inner layer of the gel to form a stronger structural network and does not change during the growing drying period.

Table 4.3 shows the moisture content and texture parameters obtained for the Ogden model of the uniaxial compression test.

Table 4.3. Uniaxial compression tests of gels at different moisture contents, produced during convective drying.

c i	Drying	W	X	μ	α	Ε	U
Sample	time (h)	(kg/kg w.b.)	(kg/kg d.b.)	(Pa)	(-)	(Pa)	(·10³ J)
GC50	0	0.8937 ±0.0007	8.41 ±0.06	24798.6 ± 66.1	7.61 ±0.42	74395.8	36.6
GC50	0.5	0.8803 ± 0.0024	7.36 ± 0.16	21104.9 ± 286.0	7.62 ± 0.05	63314.7	28.7
GC50	1.5	0.8576 ± 0.0050	6.03 ± 0.25	27227.4 ± 1006.0	6.73 ±0.89	81682.1	34.5
GC50	2.0	0.8472 ± 0.0095	5.56 ± 0.40	31032.2 ± 2384.0	6.17 ±0.33	93096.6	39.3
RC50	0	0.9114 ± 0.0005	10.29 ±0.06	24605.1 ± 4.3	7.84 ± 0.18	73815.2	41.6
RC50	0.5	0.9014 ± 0.0005	9.14 ±0.05	22572.3 ±2377.0	6.55 ± 0.34	67716.8	33.5
RC50	1.5	0.8813 ± 0.0142	7.51 ± 1.03	18443.0 ± 335.9	6.97 ± 0.10	55329.1	33.2
RC50	2.0	0.8696 ± 0.0038	6.68 ±0.22	18069.4 ± 1463.0	6.24 ± 0.92	54028.2	32.6
GC90	0	0.6497 ±0.0039	1.85 ±0.03	93982.3 ±2721.0	3.82 ± 0.07	281946.8	111.4
GC90	0.5	0.6070 ± 0.0038	1.54 ± 0.02	108094 ± 4876.0	4.41 ± 0.05	324282.0	125.8
GC90	1.5	0.5640 ± 0.0053	1.29 ± 0.03	110686 ±4391.0	4.69 ± 0.90	332059.5	134.5
GC90	2.0	0.5514 ± 0.0128	1.23 ±0.06	147374 ±4249.0	3.13 ± 0.80	442124.0	167.0
RC90	0	0.6921 ± 0.0033	2.25 ±0.03	17327.8 ± 4945.0	8.38 ± 0.68	51983.4	30.9
RC90	0.5	0.6664 ± 0.0017	$2.00\pm\!\!0.02$	$10182.7 \pm \! 1362.0$	8.78 ± 0.15	30548.1	21.8
RC90	1.5	0.6162 ± 0.0062	1.61 ±0.04	25589.3 ± 548.3	7.15 ± 0.61	76767.9	50.1
RC90	2.0	0.5830 ±0.0096	1.40 ± 0.05	39295 ±20990.0	7.11 ±1.92	117885.8	67.5

Source: (OWN AUTHORSHIP).

Being, *W* the moisture on wet basis; X the moisture on a dry basis; $\mu \in \alpha$ are stiffening parameters of the Ogden model; E is elasticity modulus or Young's modulus; *U* is the compression energy corresponds to the area when subjected to a deformation of 5 mm.

The samples, which in the formulation contained a lower starch concentration (RC50 and GC50) showed a higher water fraction, around 90% of initial moisture. The samples (RC90 and GC90) because they contained in their formulation a higher starch concentration, presented a lower fraction of water, around 65% of moisture in wet basis.

The moisture data showed to be in agreement with a previous study that also used starchalginate formulations with flat geometries (SILVA JÚNIOR et al., 2019).

The compression tests for the samples collected during drying showed that the Ogden constant (α) presents a trend of global decrease with moisture loss. For example, at the initial time (0 h), the GC90 sample had an *X* value of 8.41 kg.kg⁻¹ and α of 3.92, while for the equilibrium time (2 h), the values of *X* and α were equal to 1.23 kg.kg⁻¹ and 3.13, respectively. Similar behaviour was observed for the other samples of raw and gelatinized.

The initial shear module (μ) which is the parameter representing the stiffness of the material showed a trend of global increase with moisture loss during drying. However, it was shown that the initial shear module (μ) initially decays, which may be due to the softening of the samples and rearrangement of the structure, and with continued drying, the stiffness of the material increases as expected. As an example, the sample GC50 presented the μ value of 24798.6 Pa for the initial time and with 0.5 h presented the value of μ of 21104.9 Pa and for the final time of 2 h presented the value of μ of 31032.2 Pa. A similar behaviour was observed in formulations GC50, RC50, and RC90.

The GC90 samples showed a linear increase in the initial shear module (μ) with a decrease in moisture. Probably, because of the higher fraction of native cornstarch, these samples generated a stronger solid matrix that is rearranged at the beginning of drying. Thus, the mechanical relaxation period was not observed at the beginning of drying.

Appendix D presents the result of the uniaxial compression test carried out for the RC50 formulation with a longer drying time and it is possible to observe that the behavior of the shear modulus (μ) follows the global trend.

The Ogden constant (α) and the initial shear module μ are parameters associated with the model obtained for each material and are determined by adjusting the experimental compression data.

4.3.3 Evaluation of stiffening coefficient (β^{-1})

Figure 4.8 shows the linear regression, described by Eq. 43, and the determination of the β coefficient. Most formulations showed a linear tendency between the elastic modulus ratio (E_R) and the moisture loss ratio $(1 - X_R)$, explained by R² coefficients greater than 0.94. A general behavior in drying was observed, in which there was an increase of the modulus of elasticity with loss of moisture. In exception, the RC50 sample showed softening of the material in the initial drying moments, possibly due to the phenomenon of gelatinization of starch "in natura".

The formulation RC50 has a large amount of water and corn starch at drying temperature at 60 °C, gelatinization began, loss of crystalline structure, and reduction in the hardening coefficient (β).

The values of β were close to 1.0, but the smaller values (< 0.90) substantially affect the volumetric deformation, resulting in greater solid shrinkage. In particular, at a drying temperature of 60°C, the β values were 0.8571, 0.8995, 1.0459 and 0.9501, for the samples

RC50, GC50, RC90 and GC90, respectively. From β values, the stiffening coefficients (β^{-1}) were estimated as show in Table 4.4.

Figure 4.8. Dimensionless relationship between elastic modulus and moisture loss rate data and evaluation of the hardening coefficient.



Table 4.4. Shrink correction parameter used for the simulation of the second case study called

 Texture-FEM model.

Sample	Stiffening Coefficient (β^{-1})
GC50	1.1117
RC50	1.1667
GC90	1.0525
RC90	0.9561

Source: (OWN AUTHORSHIP).

4.3.4 Modeling and simulation of convective drying of cornstarch-alginate hydrogels

The mathematical modeling and simulation of drying of hydrogels used two case studies: FEM model and Texture-FEM model. For the two proposed models, the statistical parameter R^2 indicated a good fit to the experimental data for the experimental data, collected at the beginning of drying. The temperature drying air was fixed at 60 °C. Both FEM model and Texture-FEM model used the same mass diffusivity ranged from 2.38 to 5.46 \cdot 10⁻¹⁰ m²·s⁻¹, as shown in Table 4.2.

Figure 4.9 shows the fitting of the proposed numerical models, resulting in R² values higher than 0.977, 0.976, 0.954 and 0.956, for the samples RC50, GC50, RC90 and GC90, respectively. The FEM model computed the mesh deformation from the moving boundary velocity equation ($\vec{v_n}$, m.s⁻¹), plotted as blue lines.



Figure 4.9. COMSOL simulation with experimental data extracted from texture tests.

In the case of the Texture-FEM model, plotted as red lines, the stiffening coefficients (β^{-1}) corrected the $\overrightarrow{v_n}$ equation, and probably better explained the volumetric deformation of the hydrogels during drying. This model assumes the presence of a relationship between the solid hardening, moisture content, and drying surface area of the hydrogels.

The change in mechanical properties affects the volume shrinkage during drying. Samples (RC50 and GC50) with higher water content (W > 0.89 kg.kg⁻¹ w.b.), also showed higher β^{-1} values (1.1117 and 1.1667) and the Texture-FEM model estimated a higher loss of moisture compared to the fist FEM model, especially in advanced drying periods.

Figure 4.10 showed simulations of the drying rate period by moisture ratio, and the Texture-FEM model defined an increase in water molar flux removal, explained by the development of a greater specific surface area of hydrogels according to solid shrinkage.



Figure 4.10. Drying rate profiles obtained from the first order derivative.

In contrast, the samples (RC90 and GC90) with a higher cornstarch content and lower moisture content ($W < 0.69 \text{ kg.kg}^{-1} \text{ w.b.}$), showed minimal deviations between the simulated drying profiles, as shown in figures Figure 4.9 and Figure 4.10. Inserting the stiffening coefficient (β^{-1}) in the Texture-FEM model did not affect the prediction of volumetric deformation for materials with reduced water content.

From the analysis of hydrogels, the initial values of the modulus of elasticity (E, Pa) were around 74 kPa for the samples RC50 and GC50, 52 kPa for RC90, and 282 kPa for GC90. The relationship between mechanical properties and shrinkage behavior evidenced that hydrogels with higher initial Young modulus (E > 80 kPa) showed a volumetric deformation proportional to moisture removal. Additionally, hyperelastic solids with higher moisture and lower initial Young modulus (E < 80 kPa) showed a higher matrix packing with moisture loss, giving a higher volumetric shrinkage, if compared to the exclusively mass transfer transport.

This phenomenon could be explained by the development of a higher specific surface area, which is attributable to the extra packing of the hyperplastic matrix during drying. Figure 4.11 shows the simulated volumetric deformation for the FEM model and the Texture-FEM model. As stated before, the Texture-FEM model simulated a larger shrinkage for hydrogels containing higher amounts of water and lower Young modulus (i.e. samples RC50 and GC50). The results are in agreement with the previous study that used a 2D FEM model to describe the drying of cornstarch-alginate slabs and resulted in experimental shrinkage values lower than the simulated (SILVA JÚNIOR et al., 2019).

The developed FEM model predicted a final shrinkage (V/V_0) of 0.196, 0.182, 0.266 and 0.381, while the Texture-FEM model were 0.114, 0.120, 0.297 and 0.341, for the samples RC50, GC50, RC90 and GC90, respectively. Except for sample RC90, the Texture-FEM model showed a final shrinkage 10%-40% lower than those predicted by the FEM model. However, due to the swelling effects of raw cornstarch by water absorption, the final shrinkage of RC90 samples given by Texture-FEM model was 11% higher than that obtained by FEM model.



Figure 4.11. Shrinkage simulated by study 1 and study 2.

Figure 4.12 shows the Texture-FEM simulations evaluated at drying time of 0, 10000, 20000 and 30000 s, for the samples RC50. The hydrogels initially molded as cylinders have shrunk, producing angular edges. This phenomenon occurred due to the removal of primary moisture at the corners of the polyhedron, while the center of the solid remained wet, as shown by the moisture profile evaluated at t = 10000 s. At end of drying (t > 30000 s), the moisture removal cease and the solid volume become fixed. The Texture-FEM model also simulated the drying air domain, with coupling of mesh deformation. The inlet air velocity was 0.5 m/s, and changed according to the non-slip condition adopted as walls boundary layer. The ALE method performed the mesh deformation of air domain with coupling of solid boundaries, and predict the shrinkage during the drying.

Both developed numerical models described well the tree-dimensional mass transfer by diffusion-convection with an acceptable prediction of volumetric deformation and shrinkage. The coupling of stiffening coefficient obtained from texture analysis could adjust the moving boundary velocity of the FEM model, and well simulated the mesh deformation by assuming the increasing Young modulus during the moisture loss.

Figure 4.12. Evaluation of shrinkage, moisture content and drying air flow profiles from Texture-FEM model for RC50 samples.



Source: (OWN AUTHORSHIP).

4.4 Conclusion

The FEM model described the drying of cylindrical hydrogels at 60 °C through combined diffusion-convection mass transfer, and evaluated the hydrogels shrinkage by ALE method. In addition, a Texture-FEM model was also developed, which incorporated a dimensionless relationship (stiffness coefficient) between the texture coefficients and moisture to the first FEM model. The composition of hydrogels and thermal pre-treatment (80 °C) produced materials with distinct properties. The effective mass diffusivity ranged from 2.38 to $5.46 \cdot 10^{-10}$ m²·s⁻¹. The moisture content ranged from 0.91 to 0.55 kg.kg⁻¹ w.b., and the stiffness parameter of the Ogden model ranged from 24 to 147 kPa. In particular, the samples containing 50% d.b. of cornstarch (RC50) showed the higher diffusivity, higher moisture, and lower Young modulus. The stiffness coefficients adjust the moving boundary velocity and better predict volumetric deformation of hydrogels, showing a solid shrinkage (V/V_0) ranging from 0.114 to 0.341. The Texture-FEM model showed a final shrinkage 10%-40% lower than those predicted by the FEM model. Samples with swelling effects (RC90) showed a modified stiffness coefficient ($\beta^{-1} > 1$) and a lower volumetric deformation, which could be explained by the higher water absorption by raw cornstarch in the initial drying period. The developed drying models proved to be useful in describing the drying profiles of hydrogels and food materials with the evaluation of material properties and prediction of solid shrinkage.

Nomenclature

С	Water concentration (mol.m ⁻³)
d	Sample diameter (m)
D _{air}	Diffusivity of water in air domain (m ² .s ⁻¹)
D _{eff}	Effective diffusivity of water in solid domain (m ² .s ⁻¹)
Ε	Elasticity Modulus or Young's Modulus (Pa)
F	Applied force during uniaxial compression (N)
h	Sample height during uniaxial compression (m)
H_0	Initial Sample Height (m)
J _n	Total normal molar flux (mol.m ⁻² .s ⁻¹)
K_p	Partition coefficient (dimensionless)
M_w	Water molar mass (kg.mol ⁻¹)
m	Mass (kg)
Р	Pressure (Pa)
R	Universal gas constant (J.mol ⁻¹ .K ⁻¹)
Т	Air temperature (°C or K)
t	Time (s)
U	Energy required to compress the gels (J)
V	Volume (m ³)
V_{V_0}	Shrinkage (dimensionless)
v	Air velocity (m.s ⁻¹)
$\overrightarrow{v_n}$	Normal velocity of moving boundary (m.s ⁻¹)
W	Moisture Content in wet basis (kg.kg ⁻¹)
X	Moisture content in dry basis (kg.kg ⁻¹)
XR	Moisture ratio (dimensionless)
α	Ogden Constant (dimensionless)
β^{-1}	Stiffening Coefficient (dimensionless)
Е	Strain (m.m ⁻¹)
λ	Stretch ratio (dimensionless)
μ	Initial Shear Modulus (Pa)

ρ	Density (kg·m ⁻³)
σ	Stress (Pa)
GC50	Dried samples containing 50% of gelatinized cornstarch
GC90	Dried samples containing 90% of gelatinized cornstarch
RC50	Dried samples containing 50% of native cornstarch
RC90	Dried samples containing 90% of native cornstarch

References

- ACHCHAQ, F. et al. Temperature and moisture effects on the failure mode of highly shrinkable raw catalyst supports. **Procedia Structural Integrity**, v. 2, p. 2283–2290, 2016. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.prostr.2016.06.286>.
- AJANI, C. et al. Parametric study and shrinkage modelling of natural rubber sheet drying using COMSOL multiphysics. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, v. 243, n. 1, 2017.
- AOAC. Official methods of analysis of AOAC International. 18th. ed. Arlington, VA, USA: Association of Official Analytical Chemists, 2005.

BASTIANI, F. H. et al. Modeling the drying kinetics of alginate particles considering shrinkage. Journal of Food Process Engineering, v. 44, n. 8, p. e13760, 1 ago. 2021. Disponível em: https://onlinelibrarywiley.ez67.periodicos.capes.gov.br/doi/full/10.1111/jfpe.13760>. Acesso em: 3 nov. 2022.

- BHAGYA RAJ, G. V. S.; DASH, K. K. Microencapsulation of betacyanin from dragon fruit peel by complex coacervation: Physicochemical characteristics, thermal stability, and release profile of microcapsules. Food Bioscience, v. 49, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.fbio.2022.101882>. Acesso em: 25 out. 2022.
- BROWNLEE, I. A. et al. Alginate as a source of dietary fiber. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, v. 45, n. 6, p. 497–510, 2005. Disponível em: https://www.tandfonline.com/action/journalInformation?journalCode=bfsn20>. Acesso em: 25 out. 2022.
- CUSSLER, E. L. **Diffusion Mass Transfer in Fluid Systems**. 3° ed. Cambridge, 2009.
- DE CÁSSIA SOUSA MENDES, D. et al. Microencapsulation of jabuticaba extracts (Myrciaria cauliflora): Evaluation of their bioactive and thermal properties in cassava starch biscuits. **LWT**, v. 137, p. 110460, 1 fev. 2021.
- DI GIUSEPPE, M. et al. Mechanical behaviour of alginate-gelatin hydrogels for 3D bioprinting. 2017. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2017.12.018>. Acesso em: 7 mar. 2022.
- FELTRE, G. et al. Encapsulation of wheat germ oil in alginate-gelatinized corn starch beads: Physicochemical properties and tocopherols' stability. **Journal of Food Science**, v. 85, n. 7, p. 2124–2133, 1 jul. 2020. Disponível em: https://onlinelibrarywiley.ez67.periodicos.capes.gov.br/doi/full/10.1111/1750-3841.15316>. Acesso em: 3 nov. 2022.

- GAMONPILAS, C.; CHARALAMBIDES, M. N.; WILLIAMS, J. G. Determination of large deformation and fracture behaviour of starch gels from conventional and wire cutting experiments. Journal of Materials Science, v. 44, n. 18, p. 4976–4986, 2009.
- GRANT, G. T. et al. Biological interactions between polysaccharides and divalent cations: The egg-box model. **FEBS Letters**, v. 32, n. 1, p. 195–198, 15 maio 1973.
- MALEKJANI, N.; JAFARI, S. M. Simulation of food drying processes by Computational Fluid Dynamics (CFD); recent advances and approaches. **Trends in Food Science and Technology**, v. 78, n. June, p. 206–223, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.tifs.2018.06.006>.
- MAYOR, L.; SERENO, A. M. Modelling shrinkage during convective drying of food materials: a review. **Journal of Food Engineering**, v. 61, n. 3, p. 373–386, fev. 2004. Disponível em: http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0260877403001444>.
- NAFO, W.; AL-MAYAH, A. Characterization of PVA hydrogels' hyperelastic properties by uniaxial tension and cavity expansion tests. International Journal of Non-Linear Mechanics, v. 124, p. 103515, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.ijnonlinmec.2020.103515>. Acesso em: 21 fev. 2022.
- NGUYEN, T. K. et al. Shrinkage and porosity evolution during air-drying of non-cellular food systems: Experimental data versus mathematical modelling. Food Research International. 2017. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.foodres.2017.10.013>. Acesso em: 3 fev. 2022.
- NICOLIN, D. J. et al. Mathematical modeling of soybean drying by a fractional-order kinetic model. Journal of Food Process Engineering, v. 41, n. 2, p. e12655, 1 abr. 2018. Disponível em: https://onlinelibrarywiley.ez67.periodicos.capes.gov.br/doi/full/10.1111/jfpe.12655>. Acesso em: 3 nov. 2022.
- OBEROI, K. et al. Effect of alginate-microencapsulated hydrogels on the survival of lactobacillus rhamnosus under simulated gastrointestinal conditions. **Foods**, v. 10, n. 9, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.3390/foods10091999>.
- OKUNLOLA, A.; ADEWUSI, S. A. Development of theophylline microbeads using pregelatinized breadfruit starch (artocarpus altilis) as a novel co-polymer for controlled release. **Advanced Pharmaceutical Bulletin**, v. 9, n. 1, p. 93–101, 21 fev. 2019. Disponível em: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/31011563. Acesso em: 3 nov. 2022.
- OLAYEMI, O. J.; APEJI, Y. E.; ISIMI, C. Y. Formulation and Evaluation of Cyperus esculentus (Tiger Nut) Starch-Alginate Microbeads in the Oral Delivery of Ibuprofen. Journal of Pharmaceutical Innovation, v. 17, n. 2, p. 366–375, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s12247-020-09509-2>. Acesso em: 3 nov. 2022.

- PAXMAN, J. R. et al. Daily ingestion of alginate reduces energy intake in free-living subjects. Appetite, v. 51, n. 3, p. 713–719, 2008.
- PICONE, C. S. F.; CUNHA, R. L. Influence of pH on formation and properties of gellan gels. **Carbohydrate Polymers**, v. 84, n. 1, p. 662–668, 11 fev. 2011.
- RATNER, B. D. Biomedical applications of hydrogels: review and critical appraisal. In: WILLIAMS, D. F. (Ed.). Biocompatibility of clinical implant materials. Boca Raton, Fl: CRC Press, 1981. p. 146.
- RATTI, C. Shrinkage during drying of foodstuffs. In: **Journal of Food Engineering**. [s.l: s.n.]23p. 91–105.
- RISBUD, M. V et al. pH-sensitive freeze-dried chitosan-polyvinyl pyrrolidone hydrogels as controlled release system for antibiotic delivery. Journal of Controlled Release, v. 68, n. 1, p. 23–30, 2000. Disponível em: <www.elsevier.com/locate/jconrel>. Acesso em: 25 out. 2022.
- SILVA JÚNIOR, M. A. V. Estudo experimental e modelagem matemática da secagem convectiva de fatias de gel de amido-alginato. 2018. 2018 Universidade de São Paulo, 2018. Disponível em: https://teses.usp.br/teses/disponiveis/74/74133/tde-22102018-164651/publico/ME6551009COR.pdf>. Acesso em: 26 nov. 2019.
- SILVA JÚNIOR, M. A. V. et al. Modeling of convective drying of cornstarch-alginate gel slabs. **Journal of Food Engineering**, v. 250, p. 9–17, 1 jun. 2019.
- SUN, M. et al. Simulation analysis of fluid-structure interactions with moving mesh. Advanced Materials Research, v. 305, p. 235–238, 2011.
- TA, L. P. et al. Effects of various polysaccharides (alginate, carrageenan, gums, chitosan) and their combination with prebiotic saccharides (resistant starch, lactosucrose, lactulose) on the encapsulation of probiotic bacteria Lactobacillus casei 01 strain. International Journal of Biological Macromolecules, v. 183, p. 1136–1144, 31 jul. 2021.
- THU, B. et al. Alginate polycation microcapsules: I. Interaction between alginate and polycation. **Biomaterials**, v. 17, n. 10, p. 1031–1040, 1996.
- THUSSU, S.; DATTA, A. K. Texture prediction during deep frying: A mechanistic approach. **Journal of Food Engineering**, v. 108, n. 1, p. 111–121, 2012.
- TOPRAKÇI, İ.; ŞAHIN, S. Encapsulation of olive leaf antioxidants in microbeads: Application of alginate and chitosan as wall materials. Sustainable Chemistry and Pharmacy, v. 27, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.scp.2022.100707>. Acesso em: 25 out. 2022.
- YU, J.; SANTOS, P. H. S.; CAMPANELLA, O. H. A Study to characterize the mechanical behavior of semisolid viscoelastic systems under compression chewing case study of agar gel. **Journal of Texture Studies**, 2012.

APÊNDICE A - PROCEDIMENTO COMPLETO PARA ELABORAÇÃO E FORMULAÇÕES DOS HIDROGÉIS

- *i.* Pesou-se a água destilada em um Becker de 100 mL;
- ii. Pesou o amido de milho nativo em um Becker de 100 mL;
- *iii.* Pesou o alginato em um Becker de 100 mL;

Figura APÊNDICE A.1. Ilustração dos passos i, ii e iii do procedimento para formulação



dos géis de amido de milho mais alginato de sódio.

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

- *iv. Mediu-se o álcool etílico puro e adicionou ao Becker contendo alginato, para efeito como tensoativo;*
- v. Adicionou-se lentamente água destilada ao Becker contendo a solução de alginato mais álcool e homogeneizou;
- vi. Adicionou-se lentamente a solução formada no passo V ao Becker contendo amido de milho e homogeneizou;
- vii. Verteu-se a solução final em moldes previamente preparados;
- viii. Colocou os moldes submersos em uma solução de Cloreto de Cálcio 1 %

Figura APÊNDICE A.2. Ilustração dos passos iv, vi e viii do procedimento para formulação



dos géis de amido de milho mais alginato de sódio.

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

- *ix.* Esperou o tempo de cura de 24 h até que se formassem géis rígidos nos moldes e retirou os corpos de prova.
 - x. Os corpos de provas foram retirados dos moldes e usados nos experimentos.

Figura APÊNDICE A.3. Ilustração dos passos ix e x do procedimento para formulação dos géis de amido de milho mais alginato de sódio.





Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

APÊNDICE B - ESTUDOS RELACIONADOS A MODELAGEM E SIMULAÇÃO E GERAÇÃO DE MALHAS NO COMSOL MULTPHYSICS

i. Método numérico via FEM

O método numérico é uma técnica na qual um problema é desenvolvido de tal forma que é possível que a solução de uma ou mais equações diferenciais, de difícil resolução, sejam resolvidas por equações algébricas utilizando operações aritméticas. É possível utilizando o método analítico encontrar uma solução exata para as variáveis dependentes em um número infinito de pontos. E quando optamos por trabalhar com o método numérico encontramos uma solução numérica aproximada da equação diferencial e aceitamos ter a solução através de um número discreto de vértices da malha e quanto maior o número de pontos, mais próxima da solução exata será a solução numérica (CASTRO; MAYORGA; MORENO, 2018). Os métodos mais utilizados são: o Método das Diferenças Finitas (MDF), o Método dos Volumes Finitos (MVF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF).

O COMSOL *Multiphysics*® é um software multipropósito para modelagem e simulação em muitas áreas de engenharias e pesquisas científicas. O programa utiliza o método de elementos finitos e pode modelar geometrias em 2D e 3D e é dividido em vários módulos, cada um orientado a um tipo de fenômeno físico diferente. Este *software* foi escolhido por possibilitar a criação de modelos multifísicos, como por exemplo, o acoplamento simultâneo de pacotes CFD, transferência de massa, e deformação da malha computacional.

O produto pode ser usado sozinho, ou expandido com as funcionalidades de qualquer combinação de módulos complementares para simular eletromagnetismo, mecânica estrutural, acústica, mecânica dos fluidos, transferência de calor e transferência de massa.

Com esse programa, o usuário não precisa programar as equações o qual constituem o modelo matemático que descreve o problema. Sua plataforma é de fácil entendimento, mas cabe

aos usuários ter um conhecimento profundo sobre o problema para conseguirem programar o *software*.

ii. Geração de malhas numéricas: Desenho da geometria e desenvolvimento de um algoritmo para otimização da malha numérica

O modelo geométrico criado no COMSOL Multiphysics foi uma representação tridimensional dos géis de amido-alginato e das matrizes alimentícias.

Discretizar a malha no domínio da solução significa dividir a geometria em vários pequenos elementos finitos com o propósito de representar o campo solução e representar a geometria visando a obtenção de uma solução aproximada do problema através das soluções das equações governantes em cada um dos elementos criados. Para problemas em 3D o programa gera malhas padrão no formato tetraédrico e é aplicado a todos os domínios do problema, como os géis e o túnel de secagem.

Existem duas opções de realizar a geração de malhas no COMSOL Multiphysics que é a opção *Physics-Controlled Mesh* (Próprio programa faz discretização) ou a *User Controlled Mesh* (Usuário escolhe as definições para discretização). Escolhendo gerar a malha pela primeira opção, o usuário tem que definir o grau de refinamento da malha a qual será gerada pelo programa na geometria estudada, o COMSOL dá nove opções de refinamento que vai desde a mais refinada (*Extremely Fine*) até a mais grosseira (*Extremely Coarse*) e em todas as opções gera tamanho de malha reduzido nas bordas e nas fronteiras entre os elementos. Ao optar pela geração de malha pela segunda opção o usuário pode definir diferentes tamanhos de malha para cada região do domínio de solução, podendo dessa maneira refinar uma região específica de interesse e deixar a malha mais grosseira em alguma parte da geometria que não apresente grande interesse. Quanto maior o refinamento da malha, maior o número de elementos gerados no domínio, menor a dimensão dos elementos, maior o custo computacional

para solução do modelo e mais aproximado da solução real será o resultado obtido. Será realizado o teste de malha, que consiste em determinar qual o maior refinamento da malha necessário para não apresentar variações na solução do problema a fim de evitar o dispêndio de memória computacional.

O *software* COMSOL *Multiphysics* possui um pacote de otimização que pode ser utilizado para maximizar ou minimizar uma função objetivo. Durante o desenvolvimento desta pesquisa, foi programado um algoritmo denominado "*MESHBUILDER*". O algoritmo permite encontrar os valores dos coeficientes de construção da malha numérica que resultam na maximização da qualidade da malha.

A Tabela APÊNDICE B.1 apresenta os coeficientes ajustáveis e as respectivas faixas de estudo.

Tabela APÊNDICE B.1. Coeficientes de construção da malha numérica no COMSOLMultiphysics v5.2.

Coeficiente	Descrição	Valor mínimo	Valor máximo		
hmax	Maximum element size	Lmax	$\frac{Lmax}{m} * 1.2$		
		n	n n		
hmin	Minimum element size	Lmin	$\frac{Lmin}{m} * 1.2$		
		n	n n		
grate	Maximum element grow rate	1,03	1,2		
curvat	Curvature factor	0,1	0,8		
narrow	Resolution of narrow regions	0,8	1,2		
Easter (DDÓDDIA AUTODIA)					

Fonte: (PROPRIA AUTORIA).

É possível no COMSOL Multiphysics ver a estatística do *mesh* criado de maneira simples. No nó do mesh durante a programação é possível escolher para mostrar as estáticas, aonde ele irá mostrar a qualidade mínima que apresentou na geometria e a qualidade média da geometria inteira. A qualidade do mesh varia de 0 a 1 e mede a regularidade da forma dos elementos de malha. A Figura APÊNDICE B.1 mostra um exemplo de malhas triangulares e mostra como se comporta a qualidade malha com a diferença de regularidade dos elementos formados.

Qualidade do Elemento de Malha

Figura APÊNDICE B.1. Qualidade de malha de elementos triangulares.

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

 iii. Desenho da geometria e desenvolvimento de um algoritmo para otimização da malha numérica (Meshbuilder)

A malha numérica utilizada nas simulações foi obtida pela divisão finita da geometria 3D (cilindro) em tetraedros conforme podemos observar na Figura APÊNDICE B.2.

Figura APÊNDICE B.2. Discretização do corpo de prova cilíndrico no COMSOL



Multiphysics.

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

Na Figura APÊNDICE B.3 podemos observar a construção da malha na opção de criação de NORMAL e pode-se observar que essa malha criada tem uma qualidade média de 0,9559 e a quantidade de elemento criados foi de 2124 elementos.

Figura APÊNDICE B.3. Ilustração para a construção da malha utilizando o refinamento NORMAL no COMSOL Multiphysics.



Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

O algoritmo de otimização de malhas foi desenvolvido para aumentar a qualidade da malha criada e dessa maneira conseguir resultados mais aproximados da solução exata, mas sem aumentar muito a quantidade de elementos pois quanto maior a quantidade de elementos maior a quantidade de equações para resolver e maior o custo computacional o qual é umas das limitações que encontramos hoje (Figura APÊNDICE B.4).

Figura APÊNDICE B.4. Configuração da ferramenta de otimização para o MESHBUILDER.

Settings						
Optimization						
= Compute C Update	Solution					
Method:						
Coordinate search						-
Optimality tolerance:						
1e-5						
Maximum number of obje 1	ctive evalua	tions in each	Parametric Swe	ep:		
Maximum number of obje	ctive evalua	tions:				
1000						
Distribute parametric	sweep					
 Objective Function 					4.4	4.1
** Expression	Description Evaluate f		luate for			
comp1.dom1	Pro	Probe variable dom1		Stationary		+
Type:						
IVIO AUTUZOUDZI						
Multiple objectives						
Multiple objectives:						
Multiple objectives: Sum of objectives						7
Multiple objectives: Sum of objectives Solution: Maximum of objectives	_					
Multiple objectives: Sum of objectives Solution: Maximum of objectives Control Variables ar	nd Paramet	ers				
Multiple objectives: Sum of objectives Solution: Maximum of objectives Control Variables ar Parameter name Ini	nd Paramet tial value	ers Scale	Lower bou	nd	Upper bound	7
Multiple objectives: Sum of objectives Solution: Maximum of objectives Control Variables ar Parameter name Ini hmax + 0.0	nd Paramet tial value 1	ers Scale	Lower bour 0.008	nd	Upper bound 0.012	,
Multiple objectives: Sum of objectives Solution: Maximum of objectives Control Variables ar Parameter name Ini hmax 0.0 hmin 0.0	nd Paramet tial value 1	ers Scale	Lower bour 0.008 0.001	1d	Upper bound 0.012 0.0015	17
Multiple objectives: Sum of objectives Solution: Maximum of objectives Control Variables ar ^{**} Parameter name Ini hmax • 0.0 hmin • 0.0 grate • 1.2	nd Paramet tial value 1 01 5	ers Scale 1 1 1	Lower bour 0.008 0.001 1.03	rd	Upper bound 0.012 0.0015 1.25	7
Multiple objectives: Sum of objectives Solution: Maximum of objectives Control Variables ar ** Parameter name Ini hmax • 0.0 hmin • 0.0 grate • 1.2 curvat • 0.6	od Paramet tial value 1 01 5	ers Scale 1 1 1 1	Lower bour 0.008 0.001 1.03 0.1	rd	Upper bound 0.012 0.0015 1.25 0.8	

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

Na Figura APÊNDICE B.6 pode-se ver a houve um aumento da qualidade da malha criada pelo gráfico e na Figura APÊNDICE B.5 é observado que o algoritmo de otimização de malhas realmente otimizou a malha proposta pois a qualidade média da malha criada foi de 0,9704 e quantidade de elementos criado 2202 elementos. O que mostra um aumento na qualidade média da malha sem que aumente muito o número de elementos criados e dessa maneira aumente o uso de memória computacional ou que aumente muito o tempo de resolução do problema.

Figura APÊNDICE B.5. Ilustração para a construção da malha utilizando o refinamento



NORMAL otimizado pelo MESHBUILDER no COMSOL Multiphysics.

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

Figura APÊNDICE B.6. Incremento da função objetivo de qualidade da malha, pelo



algoritmo "MESHBUILDER".

APÊNDICE C - ENSAIOS DE COMPRESSÃO UNIAXIAL DE PEDAÇOS DE BATATA

A APÊNDICE C apresenta testes preliminares para ensaios de compressão uniaxial de fatias de batata.

Pedaços de batata foram fatiados em formato cilíndrico de 1 cm de diâmetro por 1,25 cm de altura e submetidos a secagem convectiva, a temperatura de 60 °C e velocidade do ar de 0,5 m/s. A secagem de pedaços de batata teve duração de 0, 60, 120 e 180 min, e as amostra foram submetidas a ensaios de compressão uniaxial. A Figura APÊNDICE C.1 apresenta os resultados de compressão uniaxial para os distintos intervalos de tempo.

Pode-se observar a diminuição da força requerida para deformar o sólido ao longo da secagem, no intervalo de tempo estudado. Tal fenômeno é provavelmente decorrente da desestruturação da matriz sólida. Um exemplo, é a destruição da parede vegetal pelo aquecimento da amostra e perda de água.

O comportamento é similar aos ensaios realizados para os géis de amido-alginato. Entretanto, o presente ensaio ainda não é conclusivo e necessita realizar outras repetições em tempos de secagem maiores, ou seja, conteúdo de umidade menor. Figura APÊNDICE C.1. Ensaios de compressão para os cilindros de batata após secagem a



0, 60, 120 e 180 min.

B: Pedaços de Batata; 000, 060, 120, 180: Indicam o tempo de secagem de 0min, 60min, 120min e 180min. Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

O modelo de Ogden foi utilizado para se obter os parâmetros $\mu e \alpha$, assim como o modulo de elasticidade E e a Energia de compressão W, como apresentado pela Tabela APÊNDICE C.1.

Tabela APÊNDICE C.1. Coeficientes de Ogden obtidos para as fatias de batata durante a secagem convectiva e 60 °C.

Amostra	μ (Pa)	α(-)	E (Pa)	Energia (·10 ³ N.m)
B000	598291,0	2,10	1794873,0	473,7
B060	145583,0	8,49	436749,0	152,8
B120	163158,0	7,21	489474,0	154,9
B180	211478,0	6,94	634434,0	191,0

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).

APÊNDICE D – ENSAIOS DE COMPRESSÃO UNIAXIAL PARA AS AMOSTRAS RC50 COM MAIOR QUANTIDADE DE DADOS EXPERIMENTAIS

Tendo em vista que foi observado um tendência geral para os parâmetros encontrados e a única formulação que não tinha repetido a tendência geral foi a formulação de gel do RC50 então resolveu-se fazer um ensaio de compressão uniaxial com uma maior quantidade de pontos experimentais para observar se realmente o módulo de cisalhamento inicial (μ), o módulo de *Young* (E) e a energia utilizada para compressão tinham esse comportamento de no início da secagem diminuir seu valor e ao longo da secagem ele vai aumentando. Foi realizado então com a formulação RC50 o teste de compressão uniaxial e a mesma metodologia anteriormente explicada e foi coletado uma maior quantidade de pontos experimentais analisar se a tendência seria de aumentar o módulo de cisalhamento inicial (μ).

Conforme pode ser observado o fenômeno se repetiu no ensaio de compressão uniaxial utilizando um maior número de pontos experimentais, ou seja, módulo de cisalhamento inicial (μ) , o módulo de *Young* (E) e a energia utilizada para compressão diminui no início da secagem o que pode ser devido provavelmente ao um rearranjo da estrutura molecular do gel e ao decorrer da secagem o módulo vai aumentando devido retirada de água do material e assim se tornando mais rígido.


Figura APÊNDICE D.1. Ensaios de compressão uniaxial para as amostras de amido-alginato coletadas em intervalos de secagem de 0 a 5.75 horas.

Tabela APÊNDICE D.1. Ensaios de compressão uniaxial de géis em diferentes conteúdos de umidade, produzidos durante a secagem convectiva.

						Energia
Amostra	W [kg / kg b.u]	X [kg / kg b.s]	μ [Pa]	α [-]	E [Pa]	[x10 ³ N.m
						ou J]
RC50	0,9082 ±0,0078	9,95 ±0,89	25567,7 ±2331	7,08 ±0,13	76703,0	37,8
RC50-45min	0,8964 ±0,0003	8,65 ±0,025	$18820,7 \pm 2099$	7,77 ±0,71	56462,0	32,6
RC50-105min	0,8784 $\pm 0,0004$	$7,22 \pm 0,026$	19822,2 ±405,5	7,78 \pm 0,09	59466,5	28,6
RC50-135min	$0,8538 \pm 0,0045$	5,84 ±0,209	21312,2 ±985,5	$6,70 \pm 0,13$	63936,5	29,6
RC50-195min	0,8113 ±0,0094	4,31 ±0,263	31567,7 ±6992	6,43 ±0,86	94703,1	31,9
RC50-300min	$0,7886 \pm 0,0030$	3,73 ±0,066	49984,2±15487	$5,23 \pm 0,67$	149952,5	53,2
RC50-345min	0,6939 ±0,0203	2,27 ±0,217	181106±198238	-0,13±6,90	543318,5	114,0

Fonte: (PRÓPRIA AUTORIA).