

# Dimensionnement des emballages alimentaires

---

Transfert de matière dans le système aliment / emballage



**Sébastien Gaucel**

[sebastien.gaucel@supagro.inra.fr](mailto:sebastien.gaucel@supagro.inra.fr)

# Contenu

---

Modélisation des transferts de matière.

Régulation des transferts : quel emballage choisir ?

Outils d'aide au dimensionnement :

<http://138.102.94.88/lateTools/>

Cas particuliers :

- Fruits et légumes frais
- Produits carnés



# Rôle (non-commercial) de l'emballage

## PACKAGING - COATING

Protection to ensure food integrity



Stabilization to maintain food quality and safety

### Shelf-life

Degradation reactions	Non-living products	Living products
Physico-chemical	✓	✓
Microbiological	✓	✓
Physiological		✓

### Quality and safety

- ❖ Raw materials qualities ( $t_0$ )
- ❖ Degradation reactions kinetics  $f(t)$ 
  - Processing conditions
  - Storage, distribution, in-home preparation conditions

### Environmental conditions

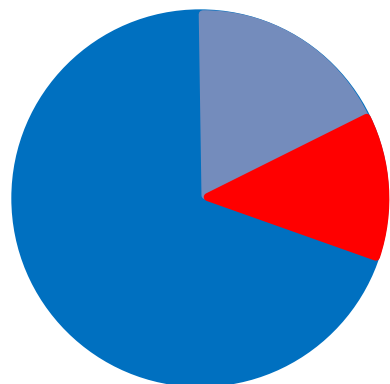
- ❖ Temperature
- ❖ Mass Transfer ( $O_2$ , water, aroma compounds, contaminants, etc...)
- ❖ Light transmission

# Impact du système aliment-emballage



Food produced for human consumption

Roughly 1/3 wasted !



46%  
Fruit &  
Vegetables

(adapted from Gustavsson et al.  
2011)



Environmental  
cost of over  
production



Environmental  
impact of energy  
use

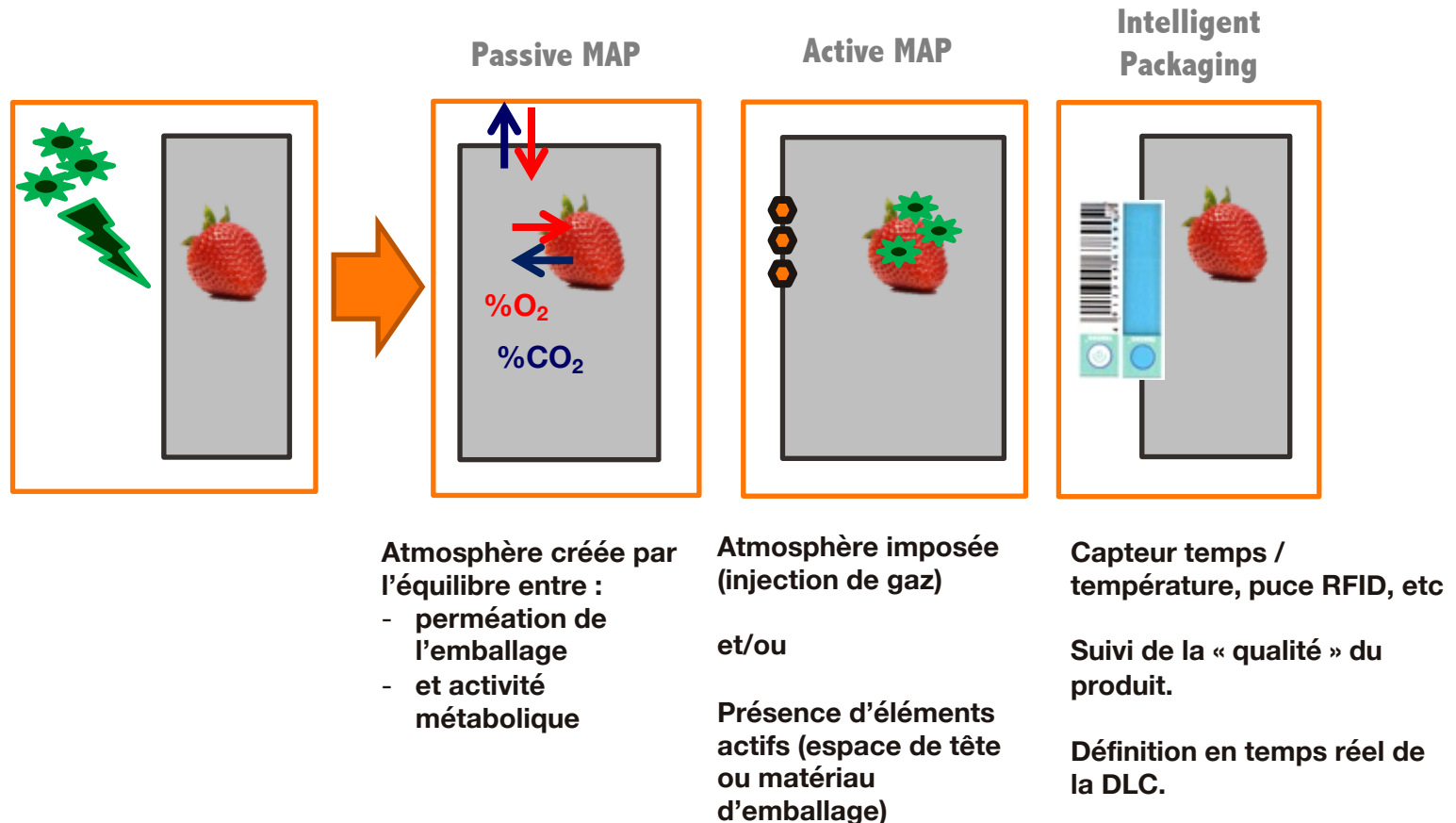


Packaging  
material discarded

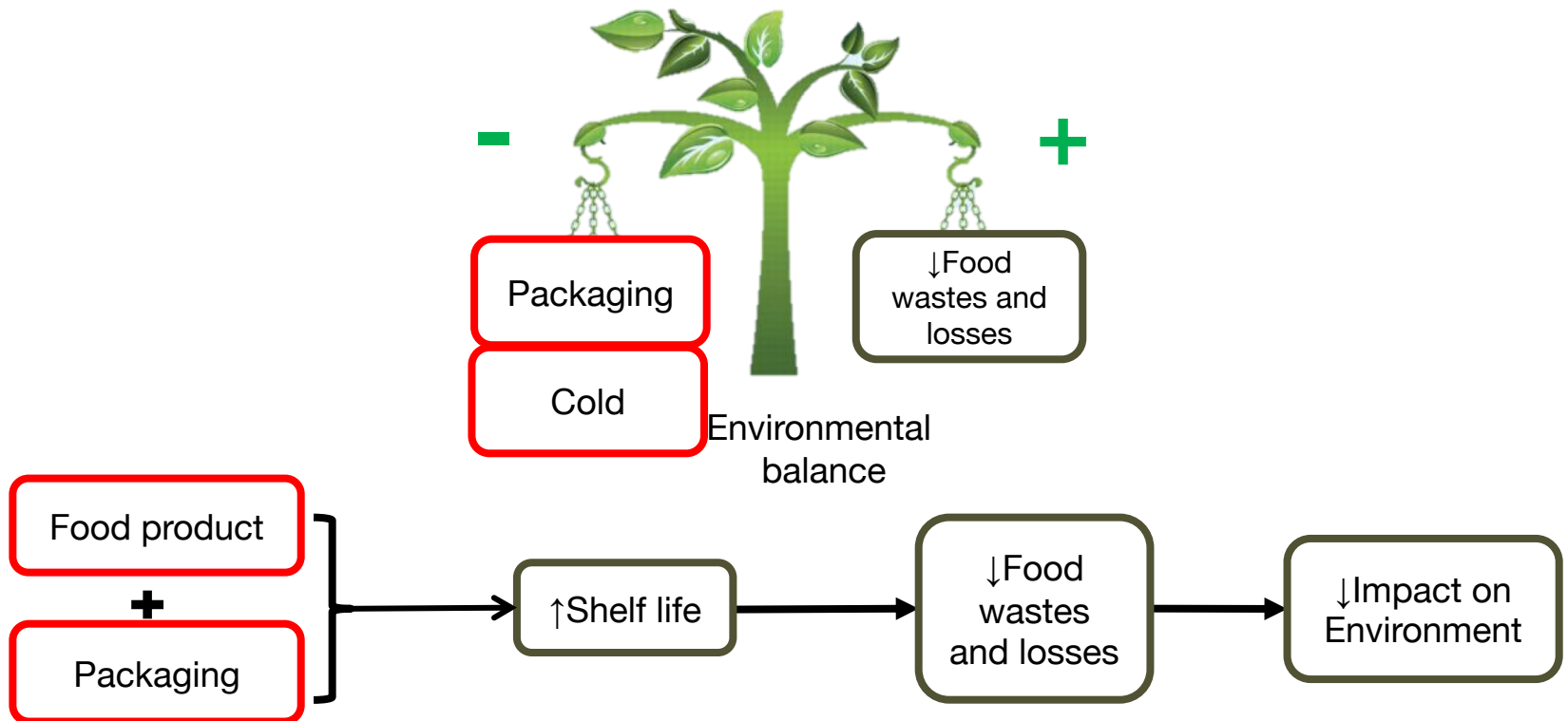
end of the life  
issues



# Les emballages sous atmosphère modifiée, actifs et intelligents



# EAM / MAP = un acteur pour réduire les pertes et gaspillages alimentaires



# Définition du dimensionnement

---



- Le Dimensionnement  $\neq$  du simple choix des dimensions de l’emballage
- Le Dimensionnement inclut :
  - Géométrie de l’emballage (volume de l’espace de tête, épaisseur et surface de l’emballage)
  - Composition initiale de l’espace de tête
  - Propriétés de transfert des matériaux de l’emballage (perméabilités/diffusivités  $O_2$ ,  $CO_2$ , vapeur d’eau, etc)
  - Éventuel usage d’éléments actifs (absorbants d’ $O_2$ , anti-microbiens, etc)
- Le Dimensionnement doit inclure :
  - Acceptabilité par le consommateur
  - Impact environnemental

# Exemple de mauvais dimensionnements



<- Sur-emballage



<- Sur-dimensionnement ->

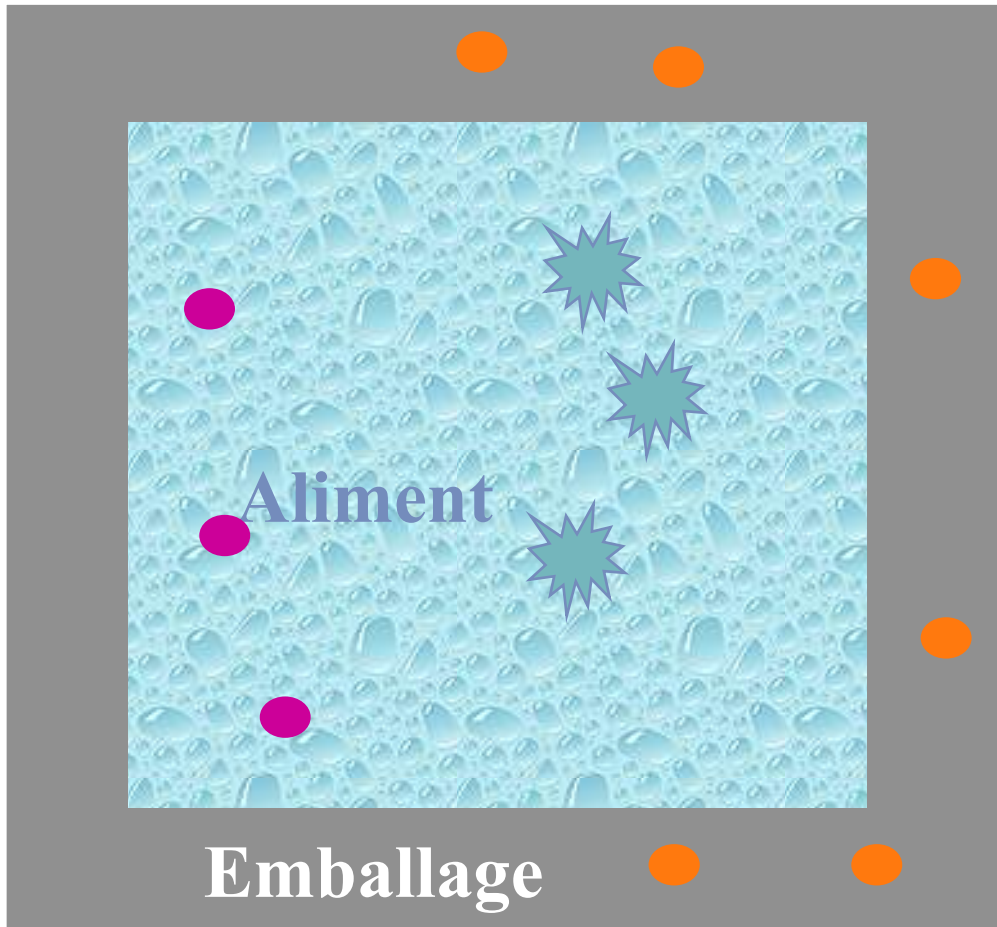


<- Emballage non-adapté ?

Sous-dimensionnement ? ->



# Transferts de matières et réactions dans le système aliment-emballage



## Migrants:

Composants de l'emballage

Gaz et vapeurs de l'environnement

Additifs et composants de l'aliment

Réactions de dégradations physico-chimiques et biologiques

## Approches pour choisir un emballage

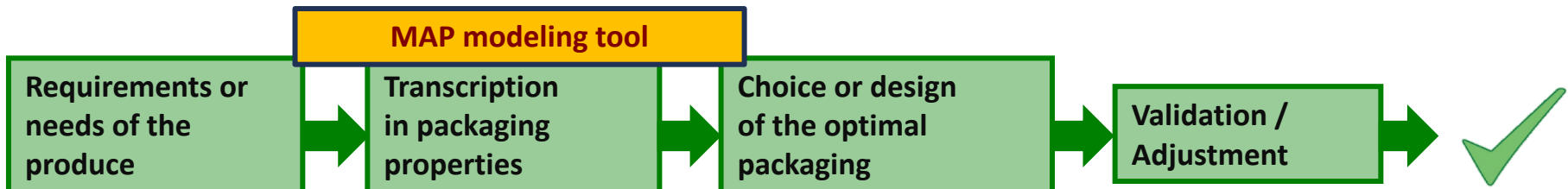
### ❖ Trial and Error Approach

= From the packaging properties to the food product

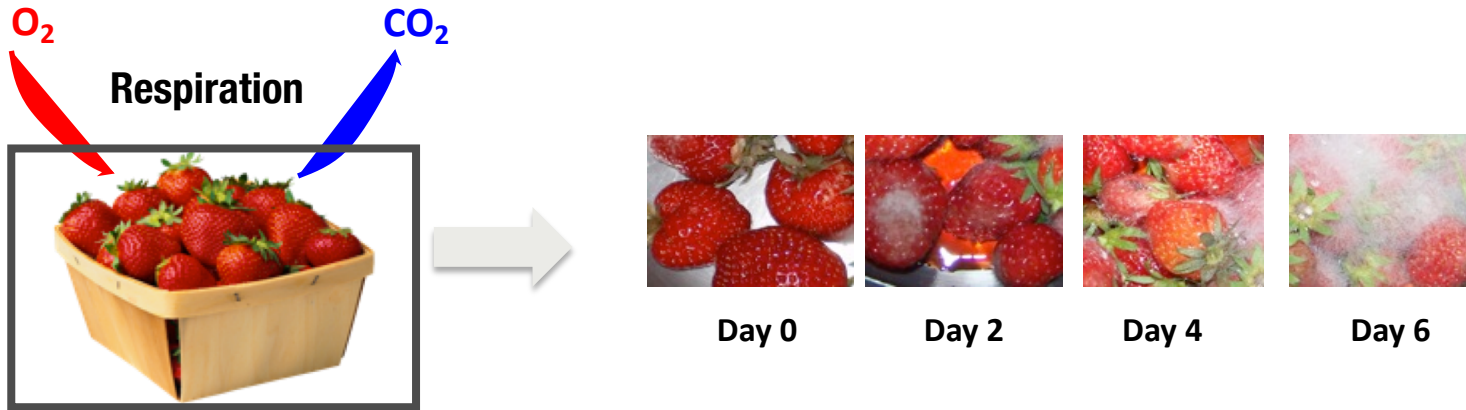


### ❖ Requirement Driven Approach

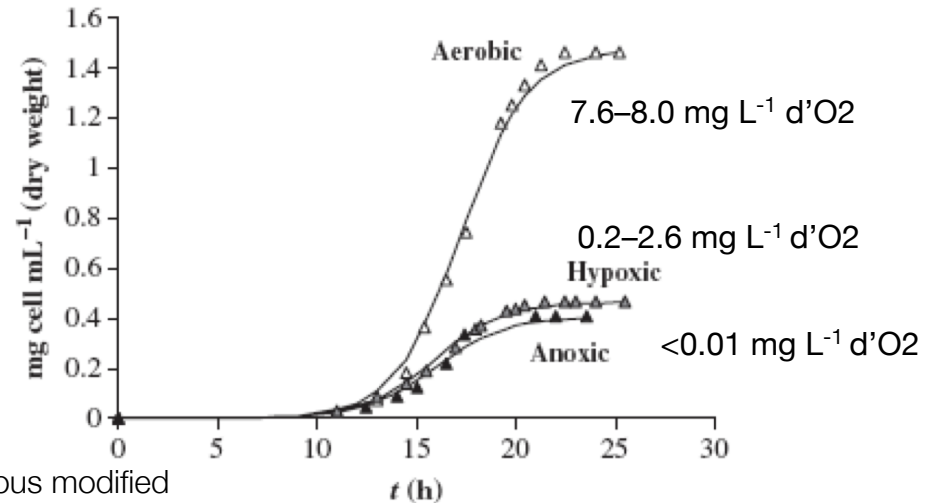
= From the needs of the food product to the packaging



# Packaging, mass transfer and food shelf life prediction



**Microbial growth**



*Listeria innocua* growth in meat packed in various modified atmosphere conditions initial load  $1.5 \times 10^{-4}$  mg cell mL<sup>-1</sup>

# Des outils simples pour dimensionner les emballages

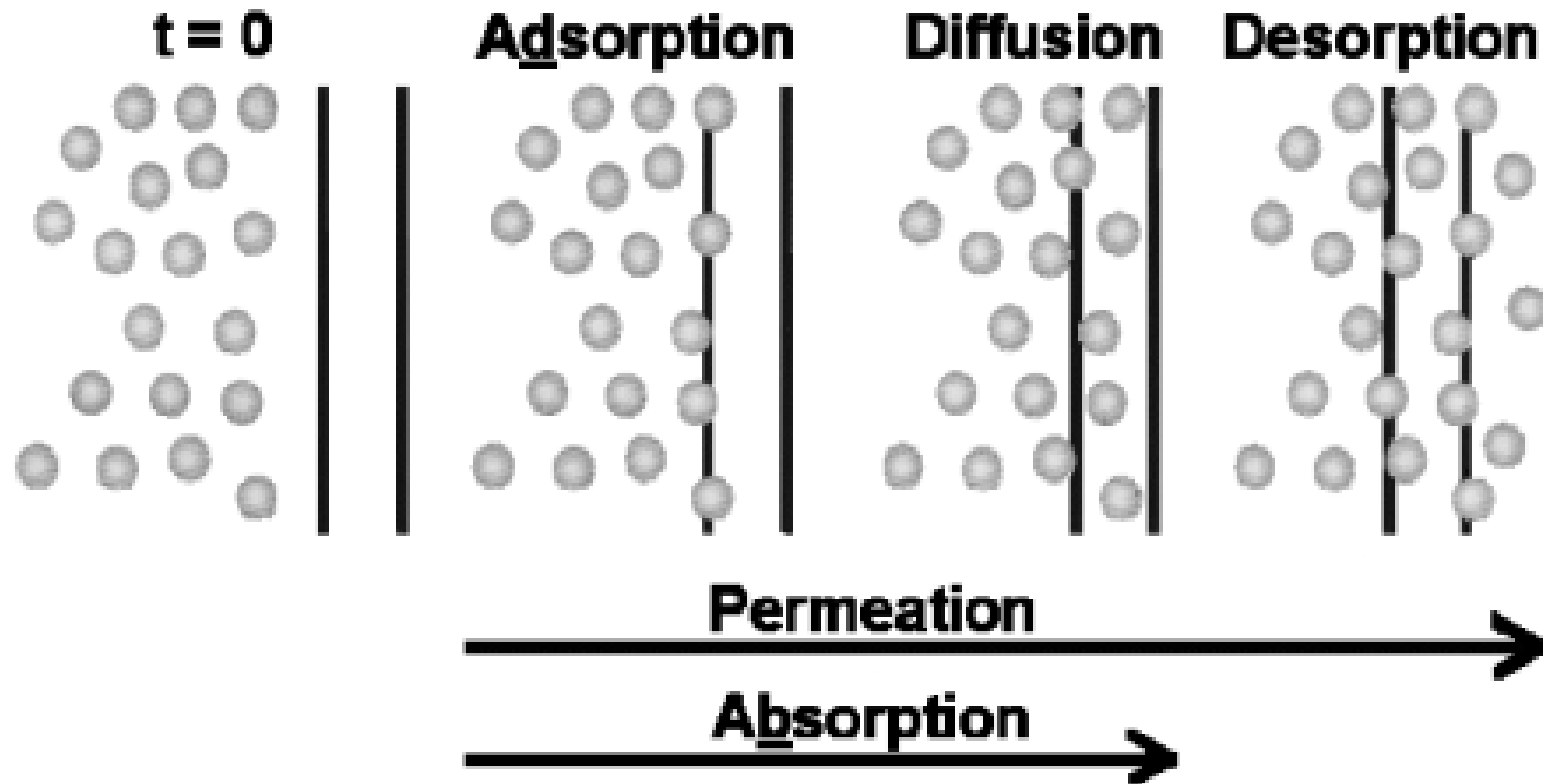
---

Les modèles de transfert de matière





# Théorie de la perméation (cas d'un matériau d'emballage)



# Loi de Henry

(à l'équilibre)

A une température donnée, la pression d'un gaz est proportionnelle à sa concentration :

$$P_{\text{gaz}} = K_H (T) \times C_{\text{gaz dissous}} = \frac{1}{S_{\text{gaz}}} \times C_{\text{gaz dissous}}$$



William Henry  
(1775-1836)

ATTENTION aux unités !

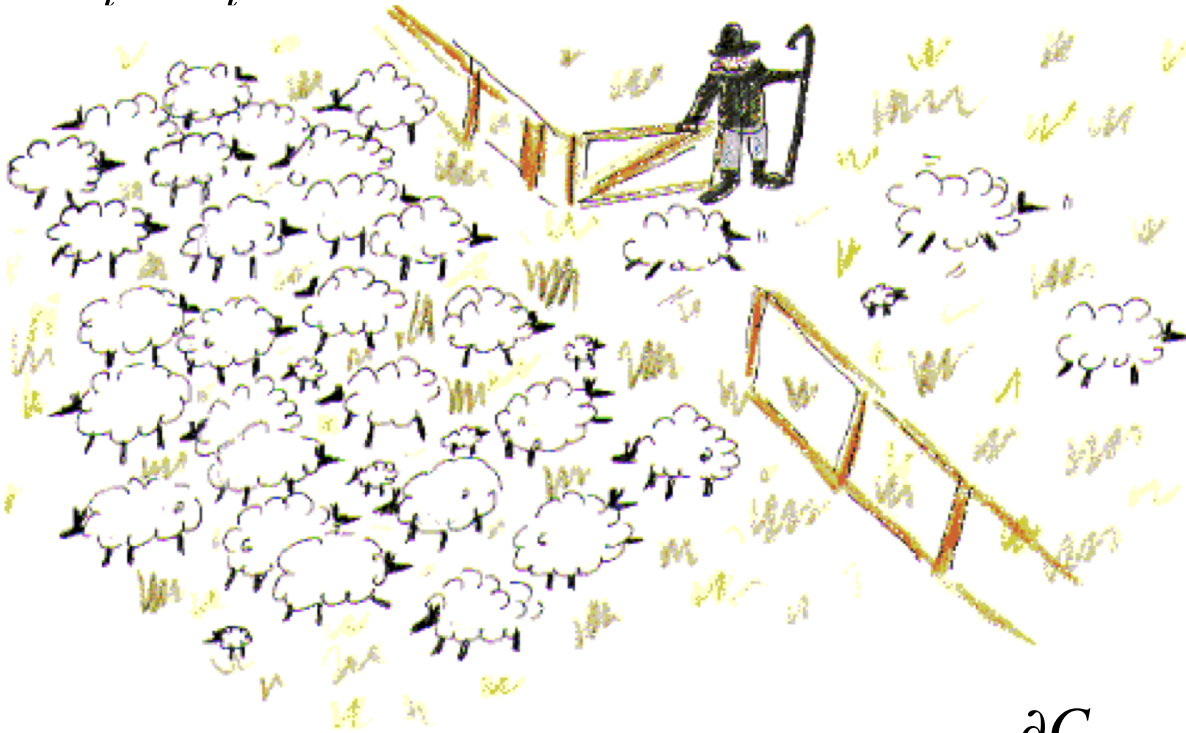
Avec  $P_{\text{gaz}}$  en Pa,  $C_{\text{gaz dissous}}$  en mol L<sup>-1</sup> et  $K_H (T)$  en Pa L mol<sup>-1</sup> et donc  $S_{\text{gaz}}$  mol L<sup>-1</sup> Pa<sup>-1</sup>.

Quand on utilise la loi de Henry et donc  $K_{\text{Henry}}$ , il est donc important de vérifier la dimension de la valeur que l'on utilise.

## Lois de Fick

La diffusion se fait du milieu le plus concentré vers le moins concentré

$$\vec{J}_i = -D_i \vec{\nabla} c_i$$



Adolph Fick  
(1829-1901)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \partial \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

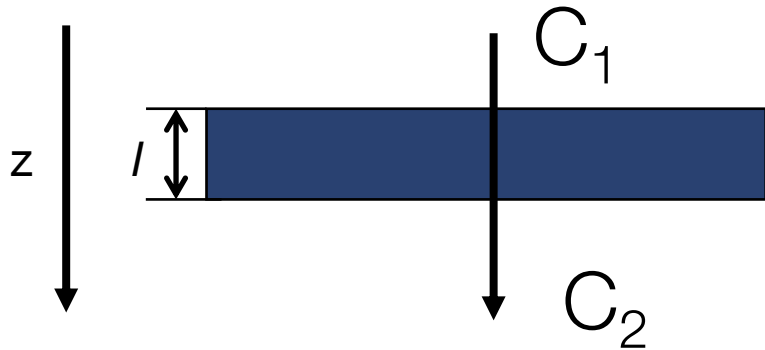
# Première loi de Fick

(État stationnaire)

Le flux de diffusion est proportionnel au gradient de concentration

$$\vec{J}_i = -D_i \vec{\nabla} c_i$$

En 1D (selon z)



$$J = -D \frac{\partial C}{\partial z} \cong DA \frac{\Delta C}{l}$$

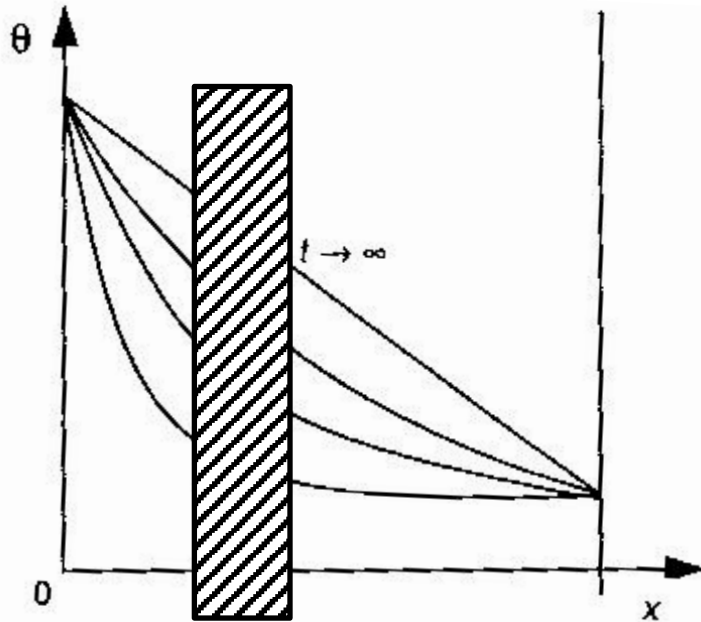
+ Loi de Henry  $C = S \times p$   $\Rightarrow$   $J = DSA \frac{\Delta p}{l}$

Coefficient de perméabilité P

$$P = D \times S$$

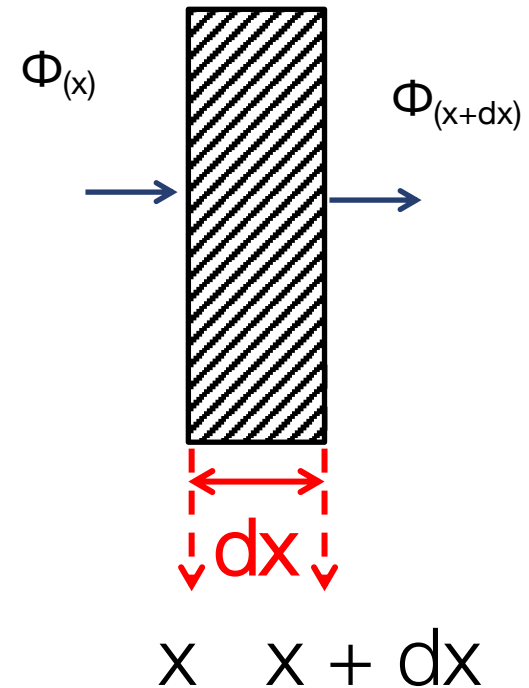
# Seconde loi de Fick

(État transitoire)



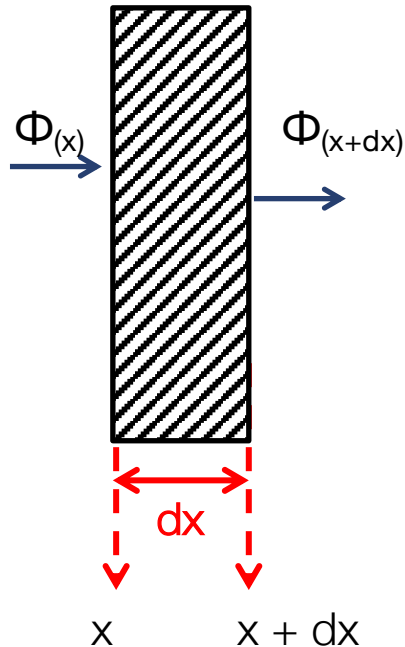
C

Evolution du régime non stationnaire vers le régime stationnaire



# Seconde loi de Fick

(État transitoire)



-le débit de matière traversant la face d'abscisse  $x$  est :

$$- A \left( D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right)_x$$

-en  $x+dx$  :

$$- A \left( D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x+dx}$$

-la vitesse d'accumulation dans le volume  $A \cdot dx$  :

$$\frac{\partial (AC)}{\partial t} \times dx$$

Bilan sur le volume  $A \cdot dx$  pour un corps inerte (sans production/consommation de chaleur) :

$$\frac{\partial (AC)}{\partial t} \times dx = - A \left( D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right)_x - \left( - A \left( D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x+dx} \right)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{- \left( D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right)_x + \left( D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x+dx}}{dx}$$

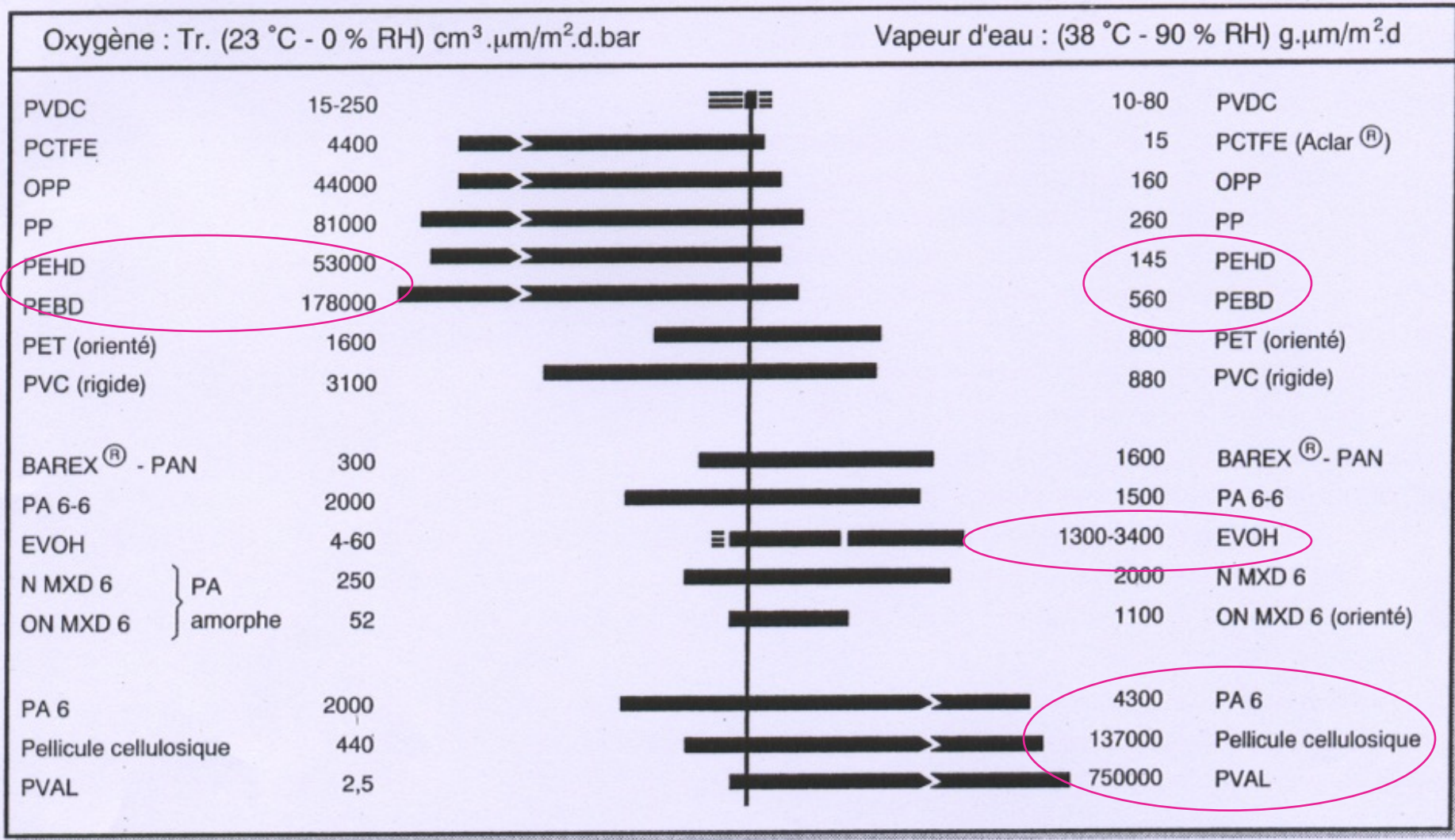
quand  $dx \rightarrow 0$  (définition de la dérivée)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_c \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

# Comparaison schématique des matériaux en fonction de la perméabilité à l'eau et à l'O<sub>2</sub>



Figure 6.2.2-1. Perméabilité O<sub>2</sub> et H<sub>2</sub>O de 16 polymères pour 1 film de 1 μ



Source : Solvay.



Permeability coefficients ( $P$ ) of PLA in  $\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{Pa}^{-1}$  to selective gases and vapors and a comparison with other commercial available polymers [81]. All  $P$  values were measured at  $25^\circ\text{C}$  unless indicated otherwise.

	$P_{\text{O}_2} \times 10^{-20}$	$P_{\text{CO}_2} \times 10^{-20}$	$P_{\text{N}_2} \times 10^{-20}$	$P_{\text{H}_2\text{O}} \times 10^{-16}$
PLA <sup>a</sup>	$315 \pm 150$	$2811 \pm 842$	$32.2 \pm 2.8$	$161 \pm 41$
LDPE	3100	18600	914	5.51
HDPE	424	538	137	2.02
PP	1790	10500	286	3.12
PS, biaxially oriented	2860	15500	742	57.8–67.5
PAN (Barex <sup>TM</sup> )	5.87	23.6	n/a	39.5
PVAL	0.07–9.46	18.2	0.13 <sup>b</sup>	n/a
EVOH, 32% ethylene	0.09	0.36	0.005	n/a
EVOH, 44% ethylene	0.41	3.14	0.04	n/a
PVDC (Saran <sup>TM</sup> )	3.59	31.4	0.56	0.56
PTFE (Teflon <sup>TM</sup> )	4570	149000	1260	0.49
PVC, unplasticized	49	247	11.1	16.5
PET, 40% $X_c$	35.9	179	55.7	7.8
PET, amorphous	62	449	n/a	n/a
PC (Lexan)	1480	1170	271	83.5
Nylon 6	31	171	6.57	n/a
Cellophane <sup>c</sup>	9.46	105	7	n/a

n/a: not available.

Polymer name abbreviations: PLA = poly(lactic acid), LDPE = low density polyethylene, HDPE = high density polyethylene, PP = polypropylene, PS = polystyrene, PAN = polyacrylonitrile, PVAL = poly(vinyl alcohol), EVOH = ethylene vinyl alcohol, PVDC = poly(vinylidene chloride), PTFE = polytetrafluoroethylene, PVC = poly(vinyl chloride), PET = poly(ethylene terephthalate), PC = polycarbonate.

<sup>a</sup> Data from this review, reported as average value  $\pm$  standard deviation.

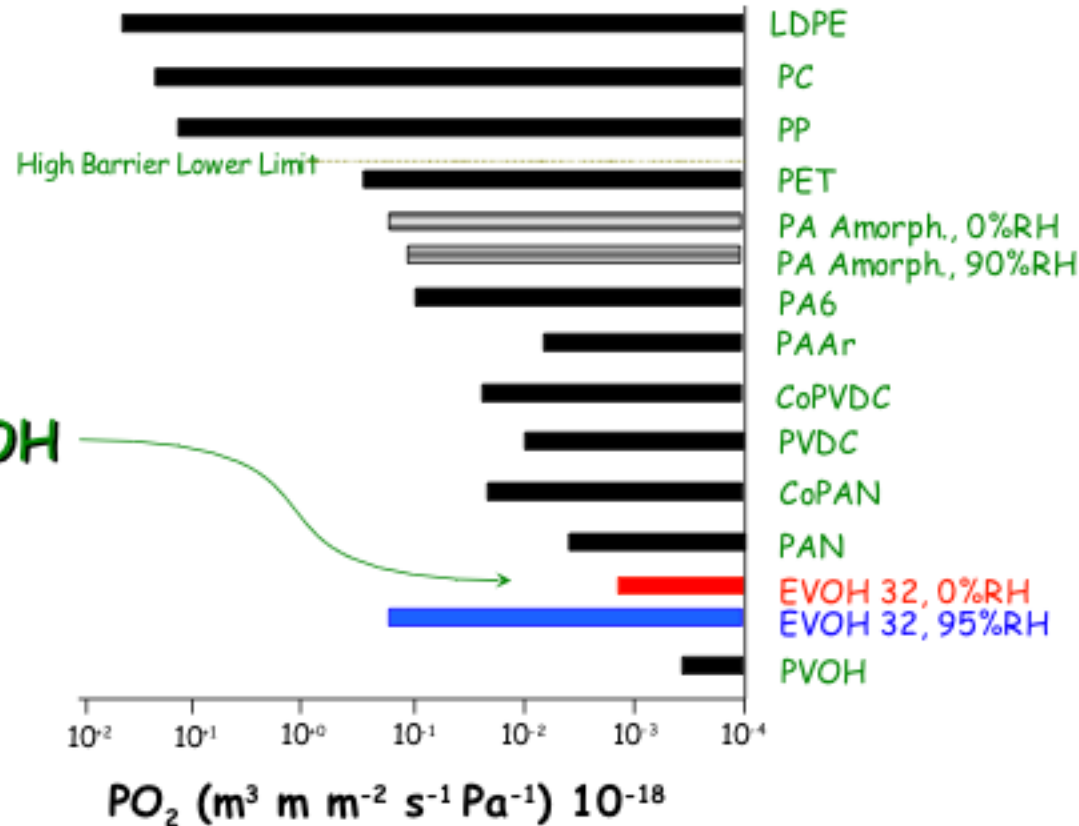
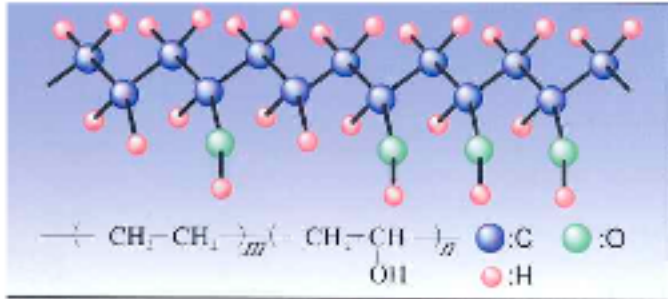
<sup>b</sup> Measured at  $14^\circ\text{C}$ .

<sup>c</sup> Measured at 76% RH.



# Comment augmenter les propriétés barrières ?

-> utiliser des multicouches



Exemple film rigide: PS/EVOH/PS

Film souple: PE/EVOH/PE

# CAS D'ÉTUDE SIMPLE : REPRISE EN O<sub>2</sub> D'UN SACHET D'EMMENTAL.

# Reprise en O<sub>2</sub> dans un emballage sous atmosphère modifiée

Vous utilisez un film de Polyéthylène basse densité (PEBD) pour conditionner du fromage râpé sous atmosphère modifiée (100% N<sub>2</sub>). Vous souhaitez savoir si l'emballage convient à votre produit, le seuil de tolérance pour l'O<sub>2</sub> après 10 jours de conservation est de 2%.

La dimension de l'emballage est de 15 X 10 cm, l'épaisseur du film est de 50 µm et on considère que le volume est de 2 L. Il est stocké à 4°C.

A l'intérieur de l'emballage, la composition initiale en O<sub>2</sub> est de 0 %, à l'extérieur elle est de 21 %.

Votre fournisseur d'emballage vous donne la valeur de perméabilité à l'O<sub>2</sub> suivante:  $440 \times 10^{-18} \text{ mol m}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$ .

Quelle est la composition en O<sub>2</sub> (en %) après 10j de conservation?

L'emballage convient-il?

# Reprise en O<sub>2</sub> dans un emballage sous atmosphère modifiée



On évalue la quantité d'O<sub>2</sub> perméant au travers de l'emballage en se basant sur un calcul de flux initial (1<sup>e</sup> loi de Fick)

$$J = \alpha = \frac{P \times A \times \Delta p}{e}$$

Le flux initial gazeux au travers de l'emballage est (en mol.m<sup>-2</sup>.s<sup>-1</sup> !):

$$J = \frac{440 \times 10^{-18}}{50 \times 10^{-6}} \times (0,21 - 0) \times 1,013 \times 10^5$$

soit

$$J = 1,87 \times 10^{-7} \text{ mol m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

Ce flux par unité de surface devra être multiplié par la surface d'échange pour obtenir le flux en mol.s<sup>-1</sup>

Remarque : ici, le  $\Delta p$  est une différence de pression partielle d'O<sub>2</sub>.

La pression partielle s'obtient en multipliant la fraction molaire (entre 0 et 1) par la pression totale (ici la pression atmosphérique).

# Reprise en O<sub>2</sub> dans un emballage sous atmosphère modifiée

Après 240 h, il est rentré

$$n = 1,87 \times 10^{-7} \times A \times 240 \times 3600$$

**Avec**  $A = 2 \times 15 \times 10^{-2} \times 10 \times 10^{-2} \text{ m}^2$

Soit,  $n = 0,0048 \text{ moles d'O}_2$

Attention 2 faces !



Dans la totalité de l'emballage, il y a  $n_T$ , nombre total de moles :

$$n_T = \frac{1,013 \times 10^5 \times 2 \times 10^{-3}}{277 \times 8,314} = 0,088 \text{ moles}$$

En utilisant la loi des gaz parfaits ( $PV=nRT$ ) avec  $T = 4^\circ\text{C}$  donc  $277,5\text{K}$ )

Soit  $0,00485/0,088=0,055$  **soit 5,5%**

**L'emballage ne convient pas !**

# Quelle perméabilité à l'O<sub>2</sub> faudrait-il pour le film d'emballage?



On calcule le nombre de moles d'O<sub>2</sub> max. qu'il faudrait au bout de 240 h dans le sachet (2% du nombre total de moles) :

$$0,02 \times 0,088 = 0,00176 \text{ moles}$$

On calcule ensuite le flux maximal d'O<sub>2</sub> qu'il faudrait au travers du sachet :

$$J = \frac{0,00176}{240 \times 3600} = 2,04 \times 10^{-9} \text{ mol. s}^{-1}$$

Puis en appliquant la loi de Fick, on obtient la perméabilité correspondante :

$$P = \frac{J \times e}{A \times \Delta p} = \frac{2,04 \times 10^{-9} \times 50 \times 10^{-6}}{(2 \times 15 \times 10 \times 10^{-4}) \times (0,21 - 0) \times 1,013 \times 10^5} = 1,59 \times 10^{-16}$$

Pour respecter la valeur de 2% max au bout de 10j, il nous faut donc un matériau d'emballage avec une perméabilité à l'O<sub>2</sub> d'au plus  $1,59 \times 10^{-16} \text{ mol.m}^{-1}.\text{s}^{-1}.\text{Pa}^{-1}$

---

Quelles sont les hypothèses faites ?

Comment se passer de ces hypothèses ?



---

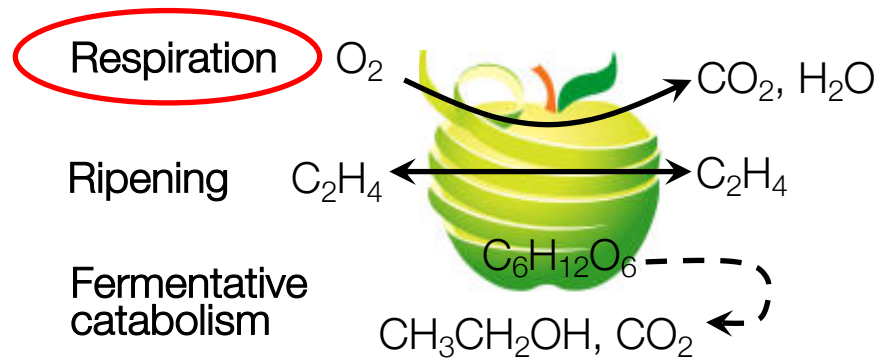
# CAS DES FRUITS ET LÉGUMES FRAIS

## TRANSFERT/RESPIRATION





## Fresh or minimally processed fruits and vegetables



**Shelf-life is controlled by**

**Sensory attributes**

Textural modification  
*Softening, Drying up, Development*  
 Flavor  
*Change in aroma content & off-odors appearance*  
 Color deterioration  
*Browning, Discoloration*

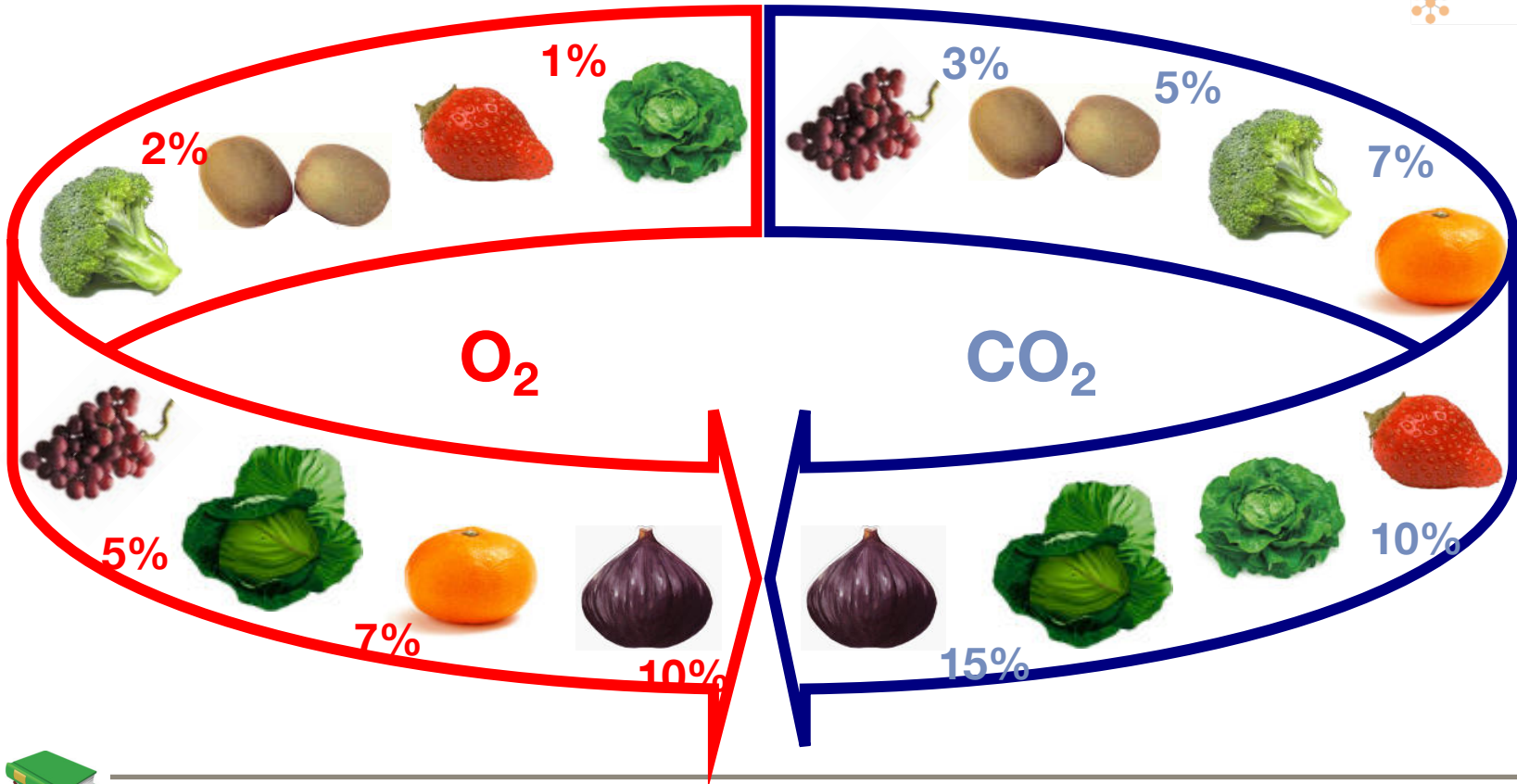
**Safety concerns**

Pathogens  
*psychotropic*  
 Indigenous flora  
*Bacteria, Yeasts, Moulds*  
 Chemical migrants

**Nutritional value**

Vitamin loss  
 Bran composition  
 Bio-availability of  
*Polyphenol*  
*Minerals*  
*Trace elements*  
*Other phytonutrients*

# Diversité des F&L: différents seuils de tolérance $O_2$ & $CO_2$



La durée de vie très courte des F & L peut être rallongée en limitant la respiration, cad en maintenant dans l'environnement proche du produit une concentration abaissée en  $O_2$  et modérément élevée en  $CO_2$

# Modelling respiration = Michaelis-Menten equation

$$RR_{O_2} = \frac{RR_{O_2 \max} \cdot p_{O_2}^{pkg}}{(K_{m_{app} O_2} + p_{O_2}^{pkg})} \quad \text{No inhibition}$$

$$RR_{O_2} = \frac{RR_{O_2 \max} \cdot p_{O_2}^{pkg}}{(K_{m_{app} O_2} + p_{O_2}^{pkg}) \cdot \left(1 + \frac{p_{CO_2}^{pkg}}{K_{i_{CO_2}}^{n}}\right)} \quad \text{Non-competitive inhibition}$$

$$RR_{O_2} = \frac{RR_{O_2 \max} \cdot p_{O_2}^{pkg}}{K_{m_{app} O_2} + \left(1 + \frac{p_{CO_2}^{pkg}}{K_{i_{CO_2}}^u}\right) \cdot p_{O_2}^{pkg}} \quad \text{Uncompetitive inhibition}$$



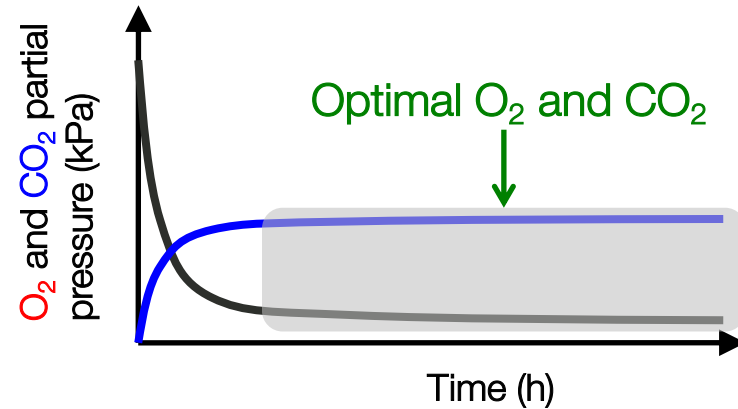
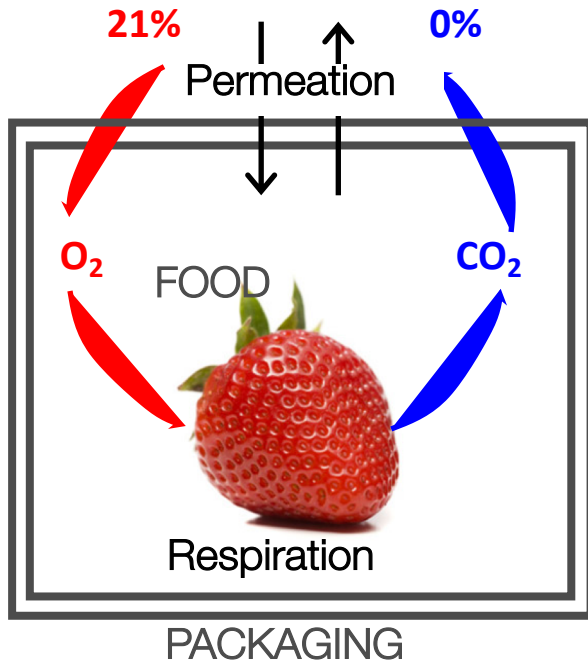
**Maud  
Menten**  
1879-1960



**Leonor  
Michaelis**  
1875-1949

*RR<sub>O<sub>2</sub></sub>*max: maximal O<sub>2</sub> consumption rate; K<sub>m</sub>O<sub>2</sub>: Michaelis-Menten constant; K<sub>i</sub>: CO<sub>2</sub> inhibition constant; p<sub>O<sub>2</sub></sub>: oxygen partial pressure (or molar quantity)

# MAP of fresh fruits and vegetable - predictive modelling of gas concentration in packaging headspace



	<b>Fick's law</b>	<b>Mickaëlis-Menten</b>
	Permeation	Respiration
$p_{O_2}^{pkg}$	$= \frac{Pe_{O_2} \cdot S}{e} (p_{O_2}^{ext} - p_{O_2}^{pkg})$	$= \frac{RR_{O_2 \max} \cdot p_{O_2}}{(Km_{O_2} + p_{O_2}) \times \left(1 + \frac{p_{CO_2}}{Ki_{CO_2}}\right)} \cdot m$
$p_{CO_2}^{pkg}$	$= \frac{Pe_{CO_2} \cdot S}{e} (p_{CO_2}^{ext} - p_{CO_2}^{pkg})$	$= \frac{RQ \cdot RR_{O_2 \max} \cdot p_{O_2}}{(Km_{O_2} + p_{O_2}) \times \left(1 + \frac{p_{CO_2}}{Ki_{CO_2}}\right)} \cdot m$

# Mise en pratique : outil TailorPack

---



**Ouvrir**

<http://138.102.94.88/lateTools/TailorPack>

# Comment dimensionner l'EAM passive de l'endive?

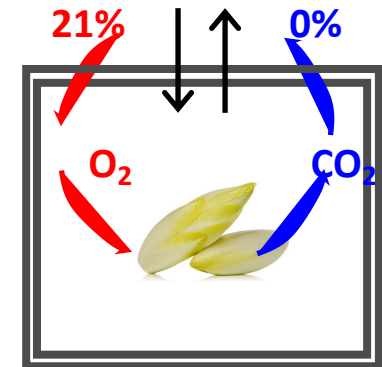
On souhaite conditionner 0,5 kg d'endives dans une poche de LDPE de 2L (surface 0,14 m<sup>2</sup>) à 20°C (durée de vie souhaitée 7 j)

On connaît les perméabilités du LDPE (épaisseur 60 microns):

pO <sub>2</sub> (mol/Pa/m/s)	1E-15
pCO <sub>2</sub> (mol/Pa/m/s)	5E-15

et les caractéristiques respiratoires de l'endive:

Mass (kg)	0,5
RQ	0,74
RRO <sub>2</sub> max (mol/kg/h)	1,4
Km (Pa)	9800
Ki (Pa)	1525000



L'emballage convient-il?

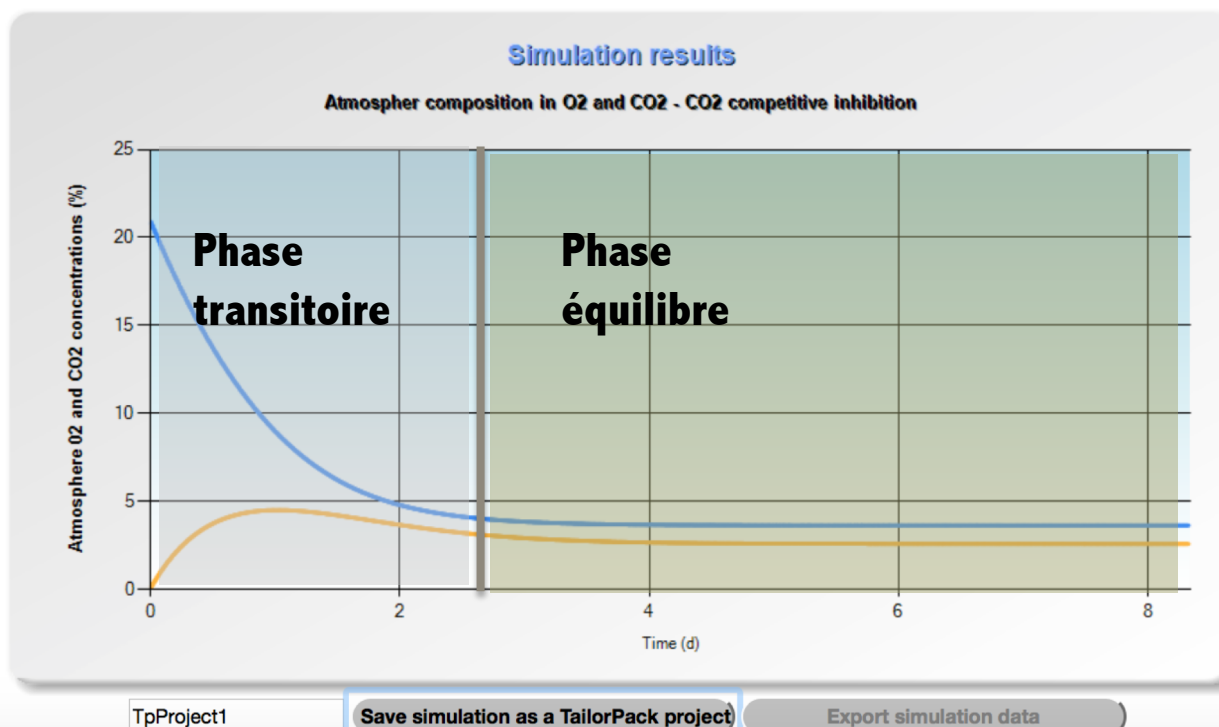
**Valeurs cibles**

**O<sub>2</sub>=5%**

**CO<sub>2</sub>=4%**

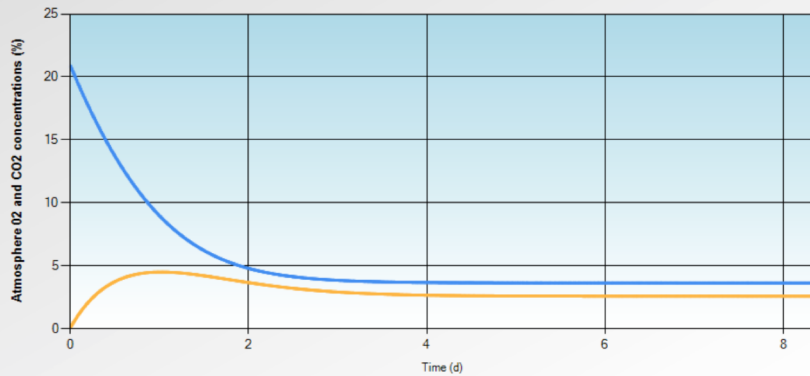
# Simulation de l'EAM endive

On observe une phase transitoire (60 h), et une phase stationnaire (de 60 à 200 h). Les valeurs à l'équilibre sont égales à 4% environ pour l'O<sub>2</sub> et 3,5% pour le CO<sub>2</sub>. Ces valeurs sont proches des valeurs optimales de conservation de l'endive à 20°C. L'emballage de 60 microns en LDPE semble convenir.



### Simulation results

Atmospher composition in O2 and CO2 - CO2 competitive inhibition

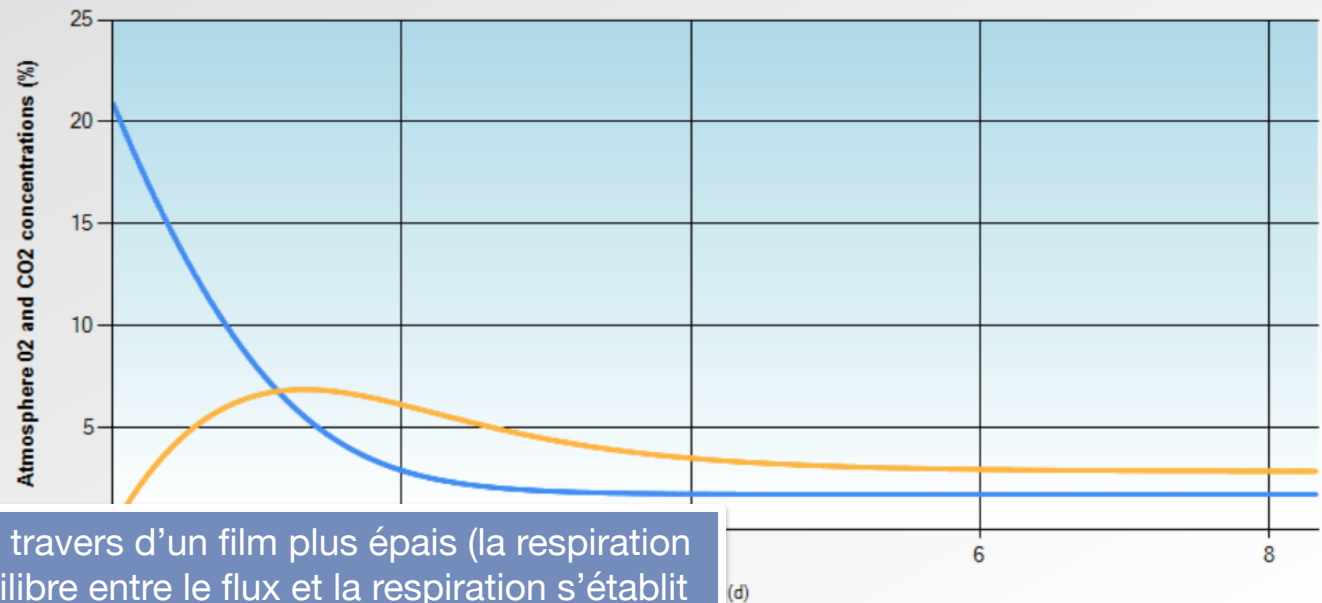


du d'emballage ( $\times 2$ ).



### Simulation results

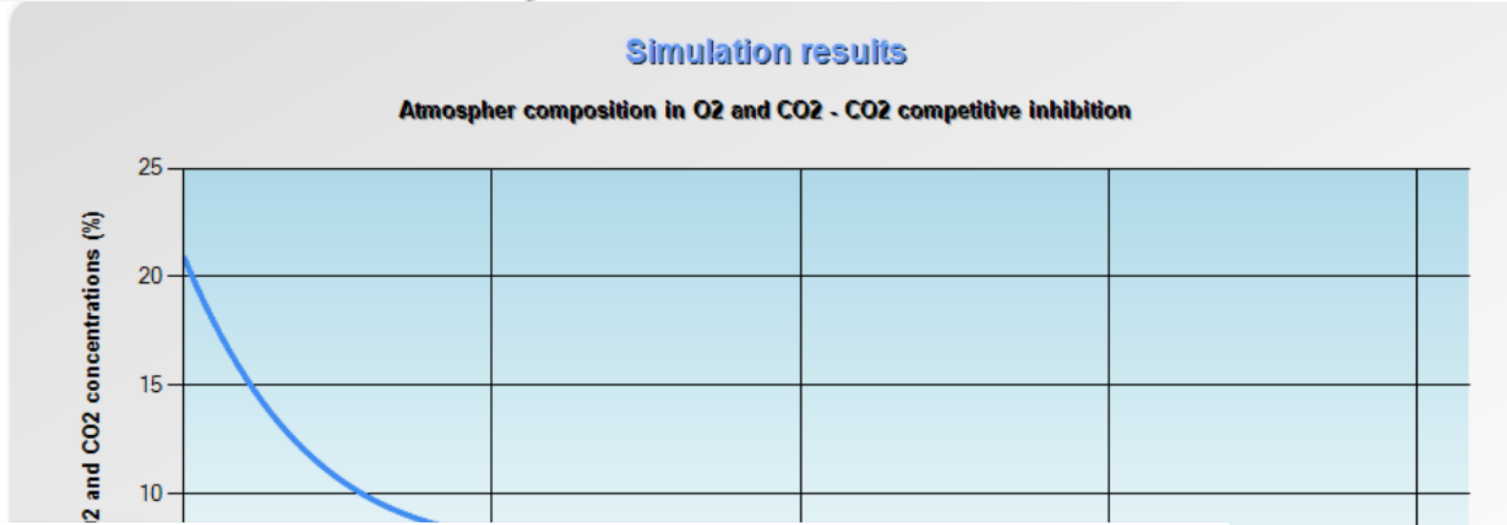
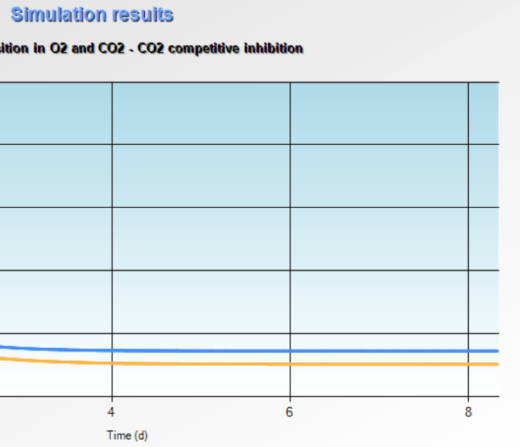
Atmospher composition in O2 and CO2 - CO2 competitive inhibition



Le flux est moins important au travers d'un film plus épais (la respiration ne change pas), le point d'équilibre entre le flux et la respiration s'établit donc plus près de l'anoxie que lorsque le film est plus fin (60 microns).



# Augmentez la surface d'échange à 0,20 m<sup>2</sup>. Que



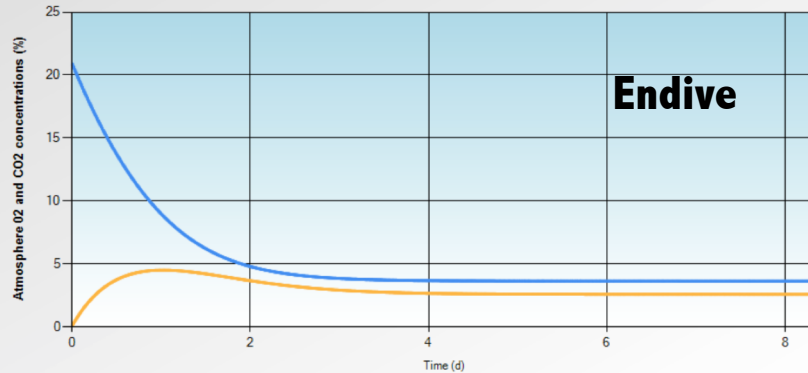
On constate qu'à l'équilibre les valeurs sont légèrement modifiées. Et l'équilibre est plus long à atteindre. Les valeurs d'O<sub>2</sub> sont plus élevées à l'équilibre car la surface d'échange est + importante et dans la loi de Fick le flux est plus grand. La respiration du végétal ne change pas donc l'équilibre entre flux et respiration s'établit à une valeur d'équilibre un peu plus proche de celle de l'atmosphère ext. Idem pour le CO<sub>2</sub> qui du coup est évacué en plus grande quantité.

# Changez les endives par des tomates (même masse). Que constatez-vous ? Pourquoi ?

	RRO2 max (mmol/kg/h)	Km (kPa)	Ki kPa (-)	RQ (-)	(kg)	V (L)	(dimension s sachet cm*cm ou cm <sup>2</sup> )	O <sub>2</sub> opt (%) à 20°C	CO <sub>2</sub> opt (%) à 20°C	Durée de vie projetée (j)
<b>Tomate</b>	0,58±0.9	7,0± 1,0	(-)	1	0,85	2	28× 25,5	6	5	7
<b>Endive</b>	1,4	9,8	152 5	0,74	0,50	2	28× 25,5	4	3	7
<b>Champignon</b>	6,0	< 0.1	(-)	0,81	0,25	1	68	5 -10	2,5 - 10	5

### Simulation results

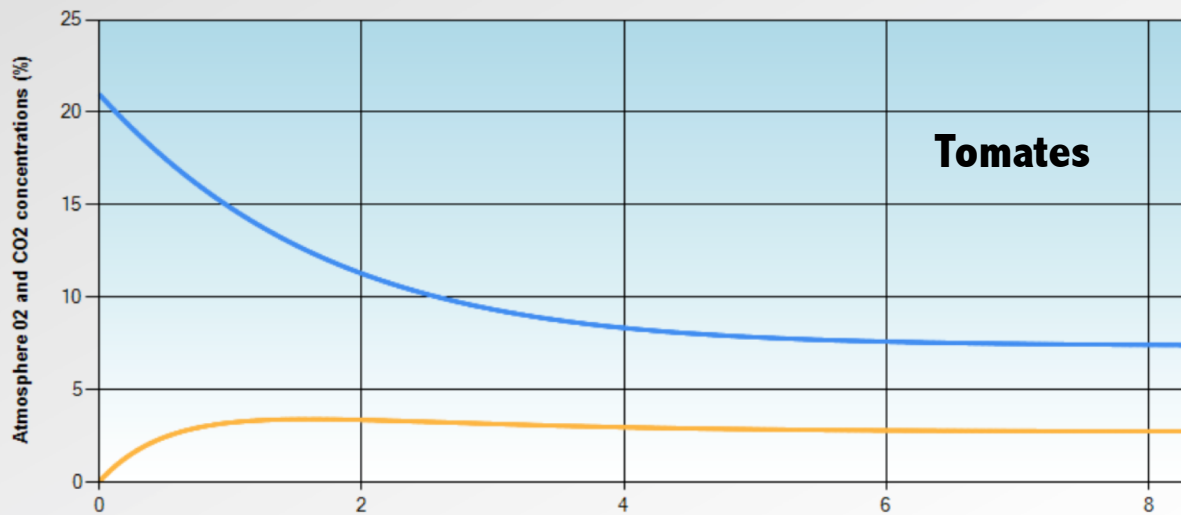
Atmospher composition in O2 and CO2 - CO2 competitive inhibition



**Endive**

### Simulation results

Atmospher composition in O2 and CO2 - CO2 competitive inhibition



**Tomates**

L'équilibre s'établit pour O<sub>2</sub> = 6.5% et CO<sub>2</sub>=4% pour les tomates et au bout de 120h environ. L'intensité respiratoire de la tomate 0.58 mmol/kg/h est plus faible que celle de l'endive 1.4 mmol/kg/h. Le flux est donc proportionnellement plus important que la respiration dans le cas de la tomate et donc l'équilibre s'établit à un point plus élevé que pour l'endive.

# Conservation des fruits et légumes frais sous emballage sous atmosphère modifiée



## B/ Identification des perméabilités optimales pour le produit

Utiliser TailorPack en mode « Optimisation »

Produit	PO <sub>2</sub> opt (mol m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> Pa <sup>-1</sup> )	PCO <sub>2</sub> opt (mol m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> Pa <sup>-1</sup> )
tomate	3.30e-15	1.24e-14
endive	6.51e-15	1.57e-14
champignon	5.78e-14	2.07e-13

# Conservation des fruits et légumes frais sous emballage sous atmosphère modifiée

---



## C- Choix du matériau d'emballage

<http://pfl.grignon.inra.fr/EcoBioCapQuerying/>

run simulation

clear

Permeance O2

(mol.m-2.s-1.Pa-1)

1.737458e-10

Permeance CO2

(mol.m-2.s-1.Pa-1)

9.627958e-10

Permeability O2

(mol.m-1.s-1.Pa-1 - 50 µm)

8.687289e-15

Permeability CO2

(mol.m-1.s-1.Pa-1 - 50 µm)

4.813979e-14



## Food properties

Endive

Mass (kg): 0.5

Shelf life (day): 7

Temperature (°C):

Optimal atmosphere value:

O2 (%): 4

CO2 (%): 3

Respiration properties:

RRO2 max  
(mmole/kg/h): 1.1833729665147

RQ (RRCO2 / RRO2): 0.74

KmO2 (Pa): 9260

## Packaging geometry

Surface (cm<sup>2</sup>): 142

Volume (l): 2

## Preferences associated with criteria

 allow the ranking of packagings with unknown values for mandatory criteria

enlarge min

min

max

enlarge max

mandatory

optional

O2 permeance

1.21622e-10

1.563712e-10

1.911204e-10

2.258695e-10

1

CO2 permeance

6.73957e-10

8.665162e-10

1.059075e-9

1.251635e-9

1

Temperature

14

18

22

26

1

Biodegradability

Transparency

transparent

translucent

opaque



## Preferences associated with criteria

allow the ranking of packagings with unknown values for mandatory criteria

	enlarge min	min	max	enlarge max	mandatory	optional
O2 permeance	<input type="text" value="1.21622e-10"/>	<input type="text" value="1.563712e-10"/>	<input type="text" value="1.911204e-10"/>	<input type="text" value="2.258695e-10"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="1"/> <input type="checkbox"/>
CO2 permeance	<input type="text" value="6.73957e-10"/>	<input type="text" value="8.665162e-10"/>	<input type="text" value="1.059075e-9"/>	<input type="text" value="1.251635e-9"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="1"/> <input type="checkbox"/>
Temperature	<input type="text" value="14"/>	<input type="text" value="18"/>	<input type="text" value="22"/>	<input type="text" value="26"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="1"/> <input type="checkbox"/>
Biodegradability	<input type="checkbox"/>				<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>
Transparency	<input type="text" value="transparent"/> <input type="text" value="translucent"/> <input type="text" value="opaque"/>		<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>		<input type="checkbox"/>	<input type="text"/>



## Packagings ranking

	ranking	name	type	% known value
<input type="checkbox"/>	1	MC (L)	Polysaccharides	66
<input type="checkbox"/>	2	PP films	Polypropylene	66
<input type="checkbox"/>	2	Po 3	Polyolefin	66
<input type="checkbox"/>	2	PB	Polybutadiene	66
<input type="checkbox"/>	3	HPC/Lipids	Polysaccharides	66
<input type="checkbox"/>	4	PO 1	Polyolefin	66
<input type="checkbox"/>	5	PO 2	Polyolefin	66

→ Ranking of the most suitable packaging material for the endive

## Food properties

Mushroom Agaricus bisporus Lange ▾

Mass (kg): 0.25

Shelf life (day): 7

Temperature (°C): 

Optimal atmosphere value:

O2 (%): 7.5

CO2 (%): 3.75

Respiration properties:

RRO2 max  
(mmole/kg/h): 1.6

RQ (RRCO2 / RRO2): 0.98

KmO2 (Pa): 100

KmCO2 (Pa):

## Packaging geometry

Surface (cm<sup>2</sup>): 68

Volume (l): 1

run simulation

clear

Permeance O2  
(mol.m-2.s-1.Pa-1) 1.156844e-9Permeance CO2  
(mol.m-2.s-1.Pa-1) 4.141286e-9Permeability O2  
(mol.m-1.s-1.Pa-1 - 50 µm) 5.78422e-14Permeability CO2  
(mol.m-1.s-1.Pa-1 - 50 µm) 2.070643e-13

## Preferences associated with criteria

 allow the ranking of packagings with unknown values for mandatory criteria

	enlarge min	min	max	enlarge max	mandatory	optional
O2 permeance	8.097908e-10	1.04116e-9	1.272528e-9	1.503897e-9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
CO2 permeance	2.8989e-9	3.727157e-9	4.555414e-9	5.383671e-9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Temperature	14	18	22	26	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Biodegradability	<input checked="" type="checkbox"/>				<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Transparency	translucent opaque		transparent		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>



## Preferences associated with criteria

allow the ranking of packagings with unknown values for mandatory criteria

	enlarge min	min	max	enlarge max	mandatory	optional
O2 permeance	<input type="text" value="8.097908e-10"/>	<input type="text" value="1.04116e-9"/>	<input type="text" value="1.272528e-9"/>	<input type="text" value="1.503897e-9"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="text" value="1"/>	<input type="checkbox"/> <input type="text"/>
CO2 permeance	<input type="text" value="2.8989e-9"/>	<input type="text" value="3.727157e-9"/>	<input type="text" value="4.555414e-9"/>	<input type="text" value="5.383671e-9"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="text" value="1"/>	<input type="checkbox"/> <input type="text"/>
Temperature	<input type="text" value="14"/>	<input type="text" value="18"/>	<input type="text" value="22"/>	<input type="text" value="26"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="text" value="1"/>	<input type="checkbox"/> <input type="text"/>
Biodegradability	<input checked="" type="checkbox"/>				<input checked="" type="checkbox"/> <input type="text" value="1"/>	<input type="checkbox"/> <input type="text"/>
Transparency	<input type="text" value="translucent"/> <input type="text" value="opaque"/>		<input type="text" value="transparent"/>		<input type="checkbox"/> <input type="text"/>	<input type="checkbox"/> <input type="text"/>



## Packagings ranking

	ranking	name	type	% known value
<input type="checkbox"/>	1	RK	Multilayer Films with Polyvinylidene Chloride Barrier	25
<input type="checkbox"/>	2	Zein + glycerol	Proteins	50
<input type="checkbox"/>	2	Zein + glycerol	Proteins	50
<input type="checkbox"/>	2	Zein + mannitol	Proteins	50
<input type="checkbox"/>	2	Zein + mannitol	Proteins	50
<input type="checkbox"/>	2	Zein + mannitol	Proteins	50
<input type="checkbox"/>	2	Zein + glucose	Proteins	50
<input type="checkbox"/>	3	Zein + glucose	Proteins	50

# COUPLAGE TRANSFERT DE GAZ / MICROBIOLOGIE PRÉVISIONNELLE

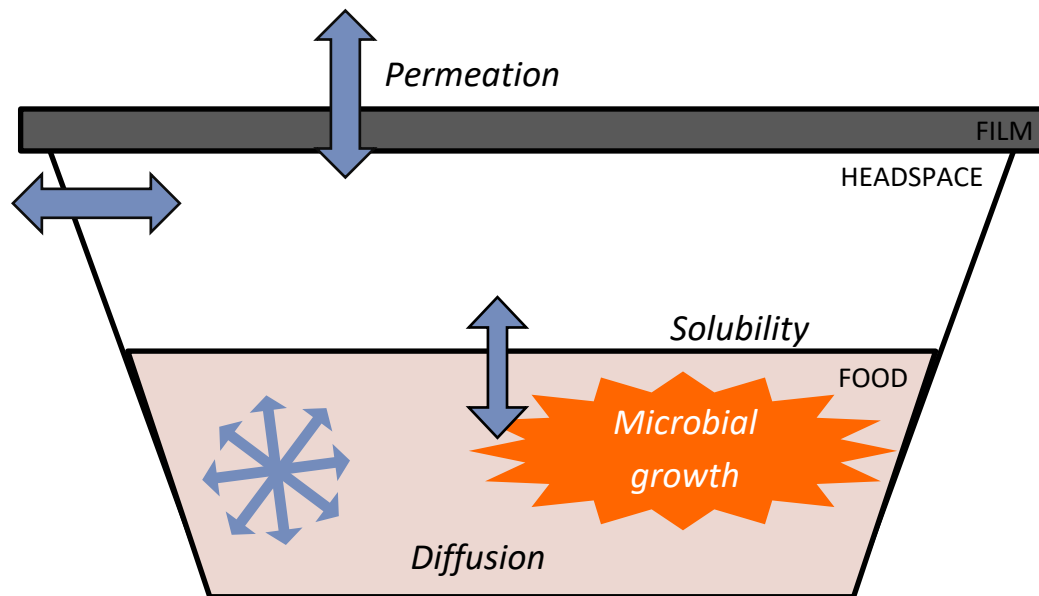
# MAP design and microbial food safety

Food packaging system:



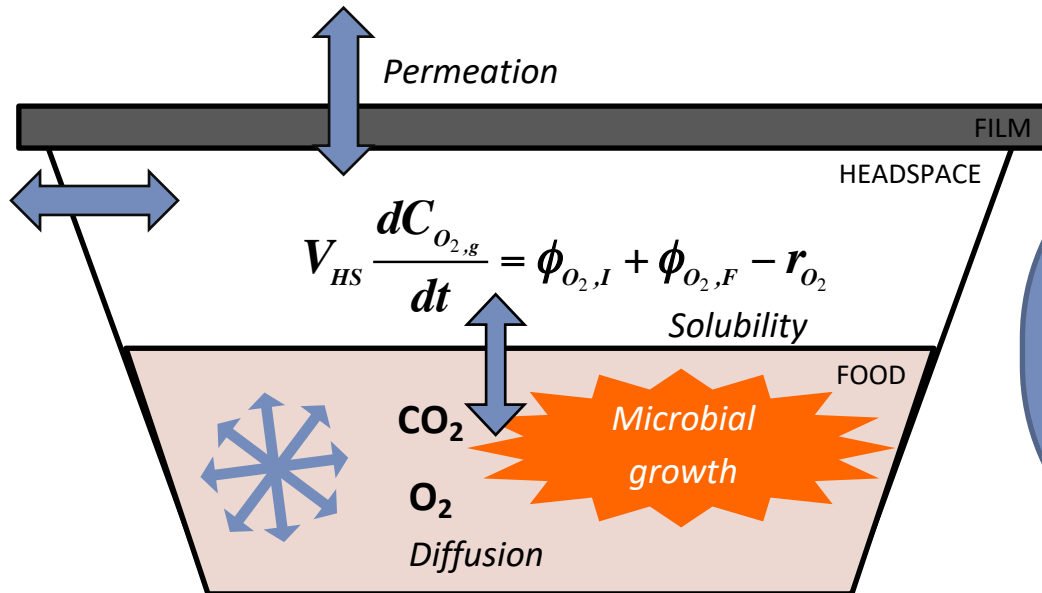
# MAP design and microbial food safety

Food packaging system:



## MAP design and microbial food safety

Food packaging system:



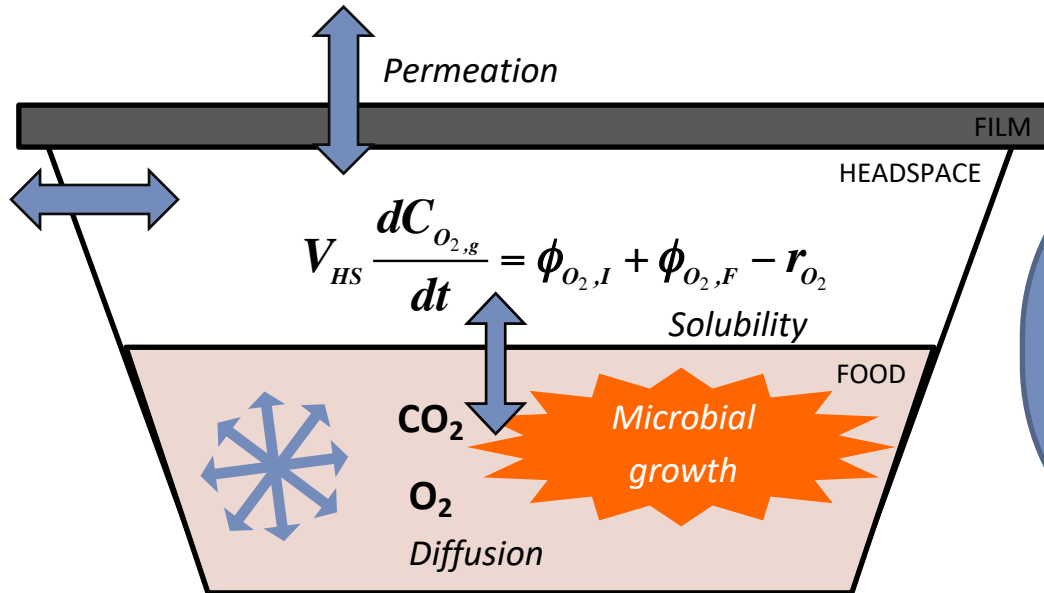
$$\phi_{j,F} = M_j P_j (S_F / e_F) (p_{j,\infty} - p_{j,g})$$

$$\left. \frac{\partial C_{jL}}{\partial t} \right|_{t,x} = D_j \frac{\partial^2 C_{jL}}{\partial x^2} + S_j$$

**Mass transfer model**

# MAP design and microbial food safety

Food packaging system:



$$\phi_{j,F} = M_j P_j (S_F / e_F) (p_{j_\infty} - p_{j_g})$$

$$\left. \frac{\partial C_{jL}}{\partial t} \right|_{t,x} = D_j \frac{\partial^2 C_{jL}}{\partial x^2} + S_j$$

**Mass transfer model**

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = 0 & \text{for } t \leq lag \\ \frac{dN}{dt} = \mu_{max} N \left( 1 - \frac{N}{N_{max}} \right) & \text{for } t > lag \end{cases}$$

**Predictive microbiology**

**Coupling mass transfer & predictive microbiology models**

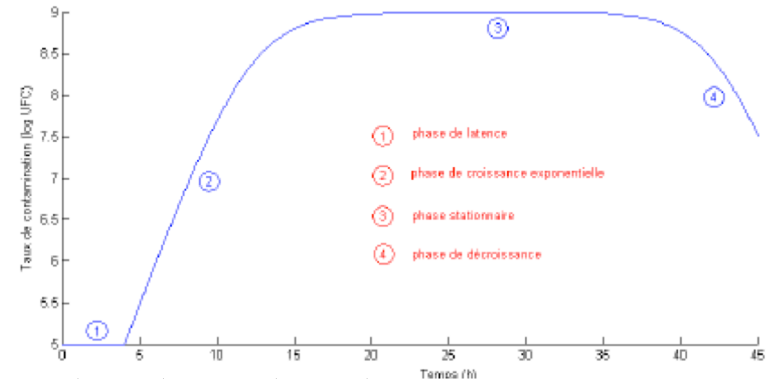
# Petit rappel de microbiologie prévisionnelle

## Modèle primaire de croissance

$$\frac{dN}{N \cdot dt} = \mu_{\max} \alpha(t) \cdot f(N) \quad \text{avec} \quad N_{(t=0)} = N_0 \quad \text{et} \quad f(N) = \left(1 + \frac{N}{N_{\max}}\right) \quad \text{et} \quad \alpha(t) = \begin{cases} 0, & t \leq lag \\ 1, & t > lag \end{cases}$$

## Modèle secondaire

$$\mu_{\max} = \mu_{opt} \cdot CM_2(T) \cdot CM_1(pH) \cdot SR(a_w) \cdot SR(nit) \cdot SR(phe) \cdot SR(CO_2) \cdot \xi$$



$$\text{Ex.} \quad \mu_{\max} = \mu_{ref} \left( \frac{T - T_{\min}}{T_{ref} - T_{\min}} \right)^2 \left( \frac{a_w - a_{w \min}}{a_{w \text{opt}} - a_{w \min}} \right) (1 - 10^{pH_{\min} - pH}) \left( \frac{CO_{2 \max} - CO_2}{CO_{2 \text{opt}} - CO_{2 \max}} \right)^2 \xi$$

## Les logiciels de microbiologie prévisionnelle

- The Pathogen Modeling Program <http://pmp.arserrc.gov/PMPHome.aspx>
- SymPrevius <http://www.symprevius.net/>
- Seafood Spoilage and Safety Predictor <http://sssp.dtuaqua.dk/>
- ComBase <http://www.combase.cc/index.php/index.php/en/>
- → ces logiciels ne prennent actuellement pas en compte les transferts de gaz O<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> au travers de l'emballage



# COUPLAGE TRANSFERT DE GAZ/MICROBIOLOGIE PREVISIONNELLE



Ouvrez le logiciel Map'Opt. <http://138.102.94.88/lateTools/MapOpt>

Voici votre système d'étude : viande de poulet (400g) emballée dans une barquette en PS/EVOH/PE operculée avec un film souple de OPP/EVOH/PE

Barquette :

Epaisseur (µm)	Hauteur (cm)	Longueur (cm)	Largeur (cm)
95	5	25	15

Film d'opercule:

Epaisseur (µm)	Surface (cm <sub>2</sub> )
30	375

Aliment:

Masse (g)	Surface d'échange (cm <sub>2</sub> )	Epaisseur (cm)
400	375	1,5

Paramètres microbiologiques:

	Taux de croissance opt. (h <sup>-1</sup> )	Temps de latence (h)	Population maximale (log CFU/g <sup>1</sup> )	MIC CO <sub>2</sub> (%)	O <sub>2</sub> min (%)
<i>Listeria monocytogenes</i>	1.1	0	8.5	304	(-)
<i>Pseudomonas fluorescens</i>	2.88	0	8.5	40	0.25

1/ Quelle sera la courbe de croissance prévisible de *Pseudomonas fluorescens* sur cette viande conservée à 6°C ?

- sous 40% CO<sub>2</sub>/60% N<sub>2</sub> (2% d'O<sub>2</sub> résiduel)

- sous 50% CO<sub>2</sub>/50% N<sub>2</sub> (2% d'O<sub>2</sub> résiduel)

(durée de vie escomptée 10j, contamination initiale = 2 log CFU/g<sup>-1</sup>) ? (on négligera la respiration du microorganisme)

2/ Combien de CO<sub>2</sub> faudrait-il mettre pour limiter la croissance de Pseudo en dessous de 5 Log à 11j?

3/ Que se passe-t-il quand on prend en compte la respiration du microorganismes?

Revenir au mélange initial 50% CO<sub>2</sub>/50% N<sub>2</sub> (2% d'O<sub>2</sub> résiduel)

4/ Que se passe-t-il quand on prend en compte la respiration du microorganismes?

→ quel niveau de CO<sub>2</sub> peut-on mettre alors dans l'espace de tête pour limiter la croissance à 5 Log à 11 j?

# Pour aller plus loin ...

---

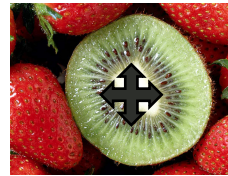
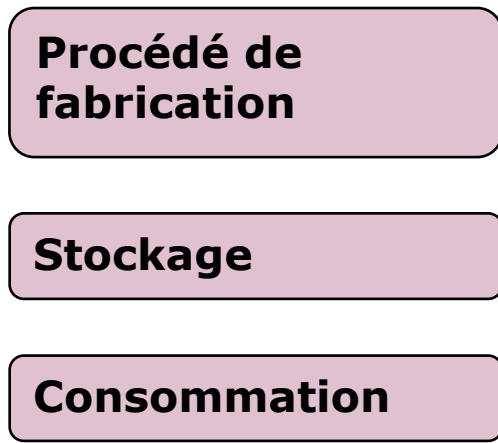


# Cas des réactions d'oxydation

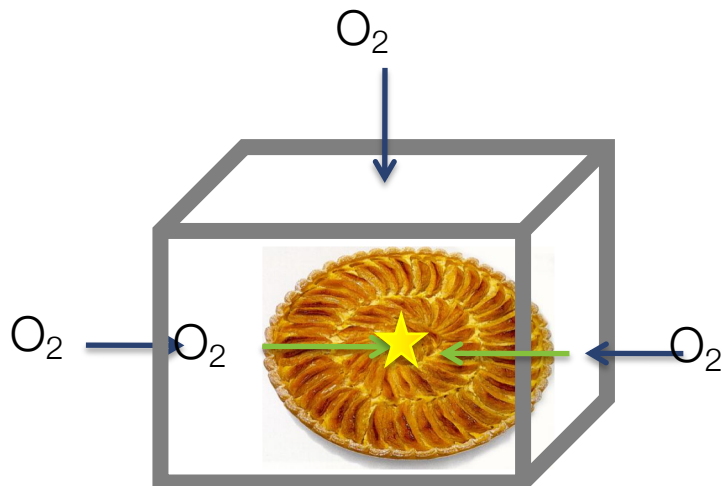
---



# Oxygène et oxydation des aliments



Diminution des qualités physico-chimiques, nutritionnelles et organoleptiques



perméation



sorption/diffusion dans l'aliment



réaction d'oxydation

# Stratégies de protection de l'aliment

## ➤ Dans l'aliment

- Ajout d'antioxydants
- Encapsulation de composés d'intérêt

## ➤ Procédé

- Inertage



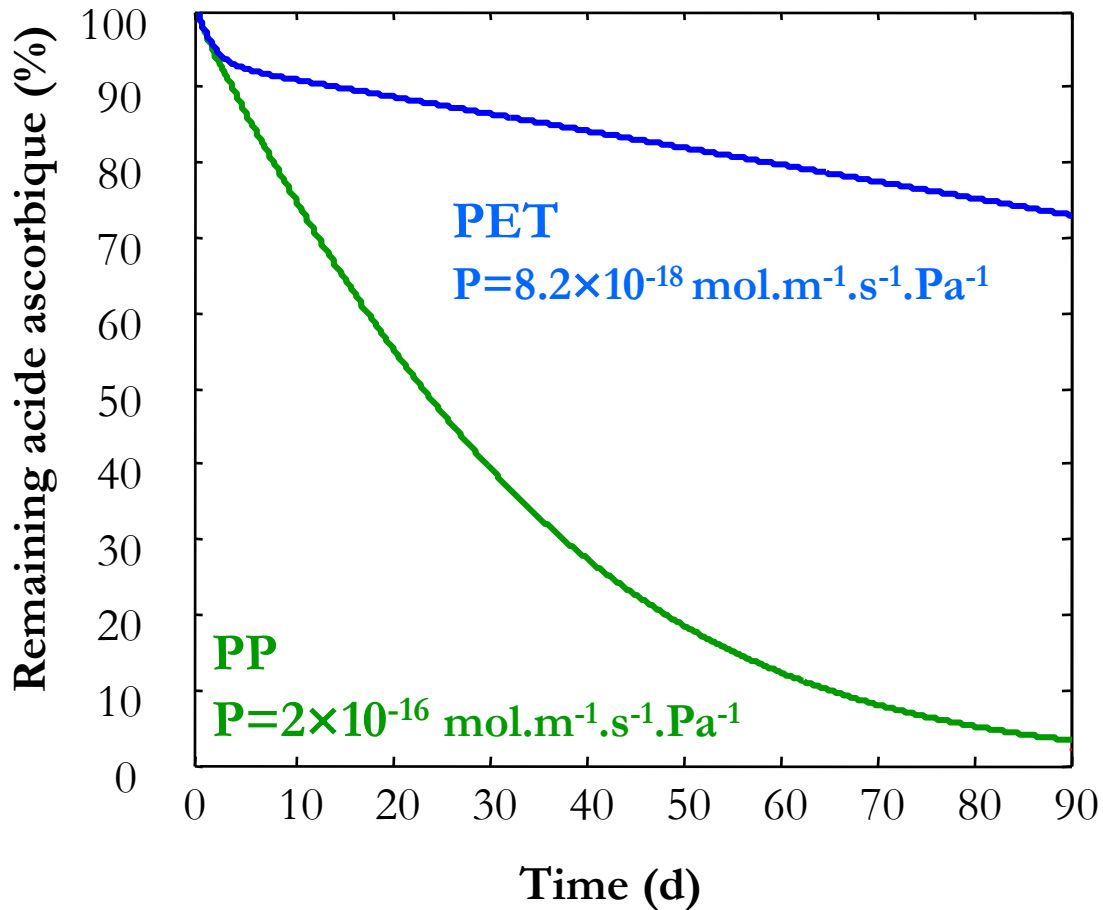
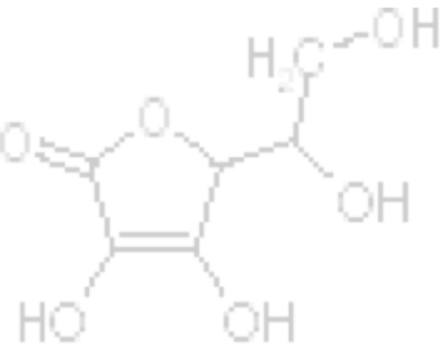
## ➤ Emballage

- Emballage barrière
- Absorbants d'oxygène

## ❖ Solutions basées sur un savoir-faire empirique

- Pas de moyen de quantifier l'oxydation
  - Stratégies le plus souvent surdimensionnées

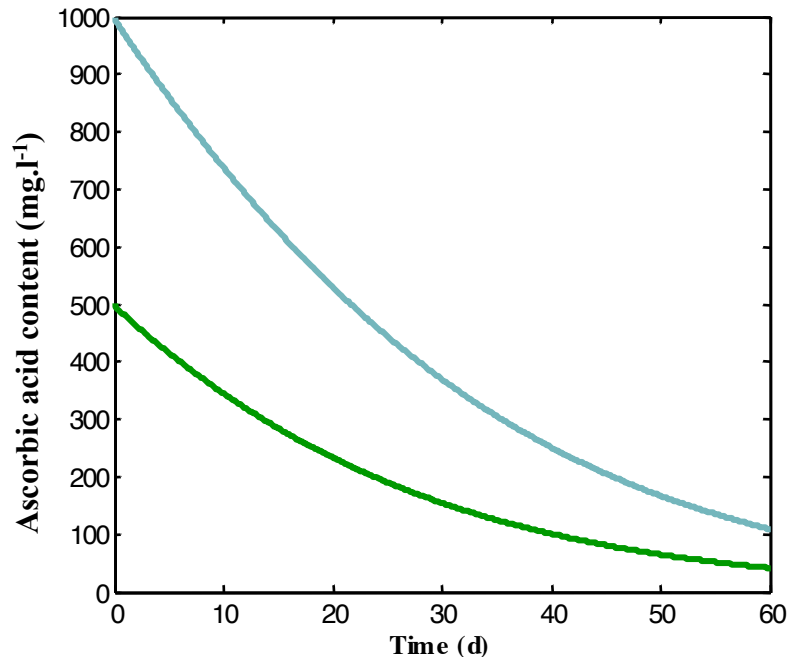
# Modelling of the coupling oxygen transfer / oxidation reaction





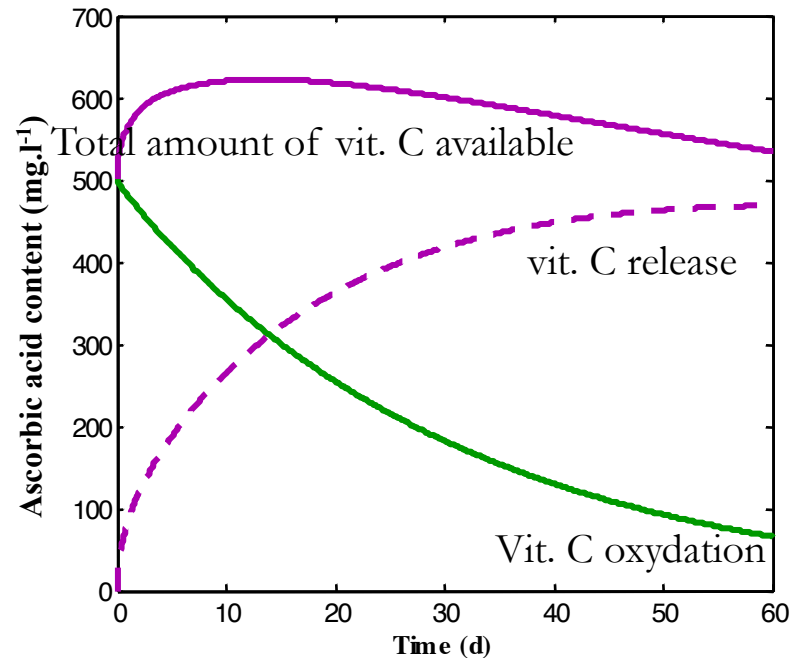
# How to guarantee a minimum vit C content whenever consumption date ?

## Orange juice fortification with added vitamin C



Q AA added: 500mg.L<sup>-1</sup>

## Controlled release of vitamin C by active coated packaging



$D_{\text{diff}}^{\text{AA}}$  in the coating :  $2.4 \times 10^{-16} \text{ m}^2/\text{s}$

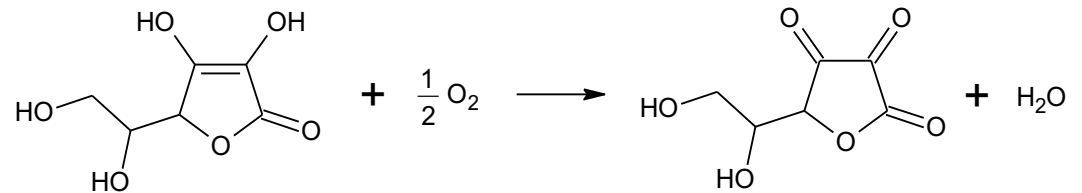
$Q_{\text{initial}}$  AA in the coating: 500 mg

Thickness of coating: 30 $\mu\text{m}$

# Oxydation de l'acide ascorbique

## Acide ascorbique

⚙️ Sensible à l'oxydation



## Etude de la cinétique réactionnelle

$$-\frac{d[AA]}{dt} = -2 \frac{d[O_2]_d}{dt} = k[AA]^\alpha [O_2]_d^\beta$$

avec

$$k_{app} = k[O_2]_d^\beta$$

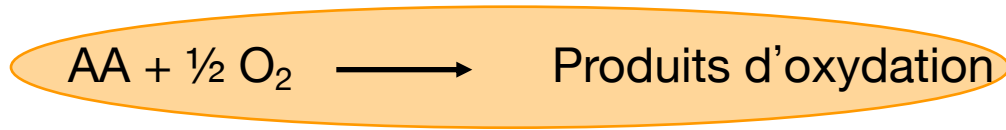
Evaluation de  $k, \alpha, \beta$   
expérimentalement

$[AA]$  dépend du  
transfert d'AA dans le  
produit solide

$[O_2]_d$  dépend du  
transfert d' $O_2$  dans le  
produit solide

# Formalisation de l'impact de l'oxygène

Approche modélisation



$$\frac{\partial [\text{O}_2]_d}{\partial t}$$

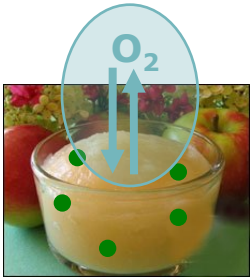
transfert

réaction

$$\frac{\partial [\text{AA}]}{\partial t}$$

Loi de Fick

Cinétique d'oxydation

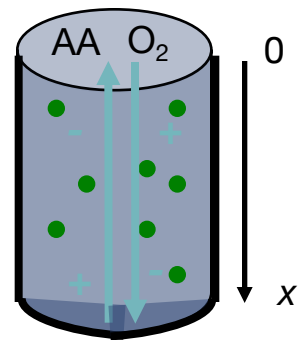


❖ Simplification du système :

diffusion monodimensionnelle

$$\frac{\partial [\text{O}_2]_d}{\partial t} = D_{\text{O}_2} \frac{\partial^2 [\text{O}_2]_d}{\partial x^2} + r_{\text{O}_2}$$

$$\frac{\partial [\text{AA}]}{\partial t} = D_{\text{AA}} \frac{\partial^2 [\text{AA}]}{\partial x^2} + r_{\text{AA}}$$



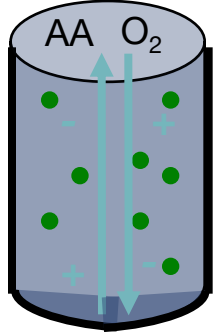
# Modèle de couplage proposé

Transferts de matière

Oxydation de l'acide ascorbique

$$[AA](t + dt) = [AA](t) + D_{AA} \frac{d^2[AA]}{dx^2} dt - k[AA]^\alpha [O_2]_d^\beta dt$$

$$[O_2]_d(t + dt) = [O_2]_d(t) + D_{O_2} \frac{d^2[O_2]_d}{dx^2} dt - nk[AA]^\alpha [O_2]_d^\beta dt$$



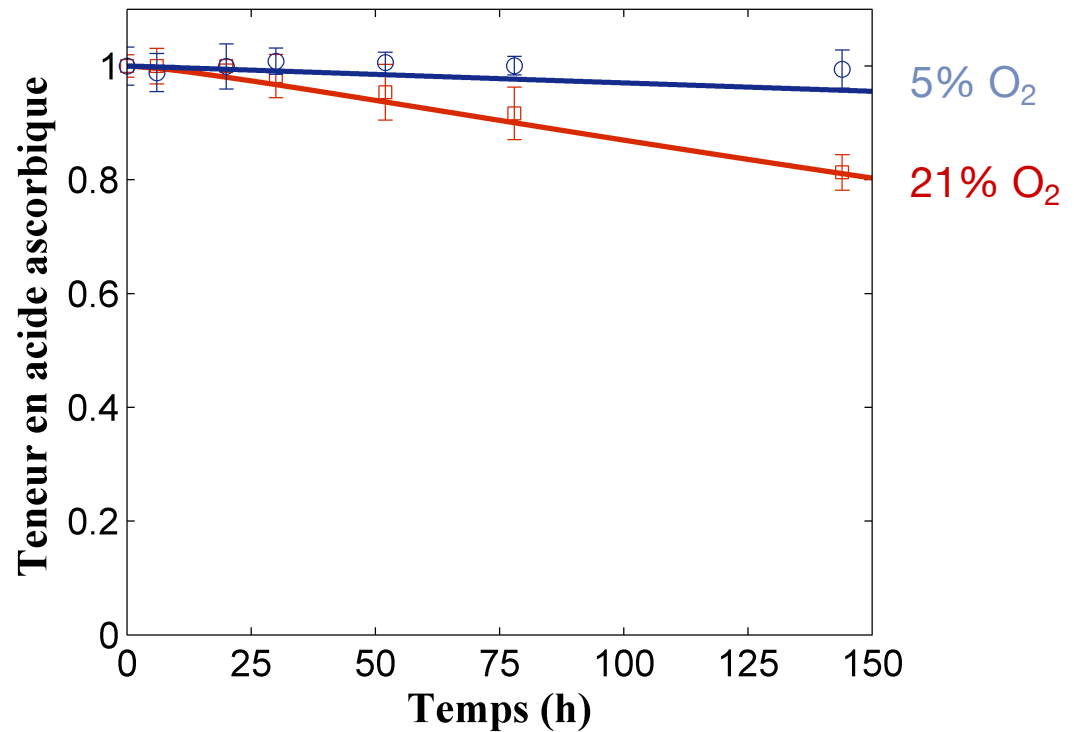
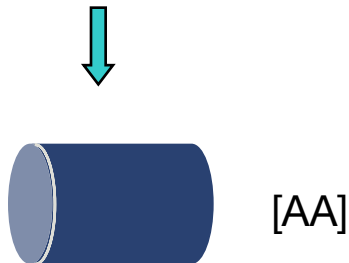
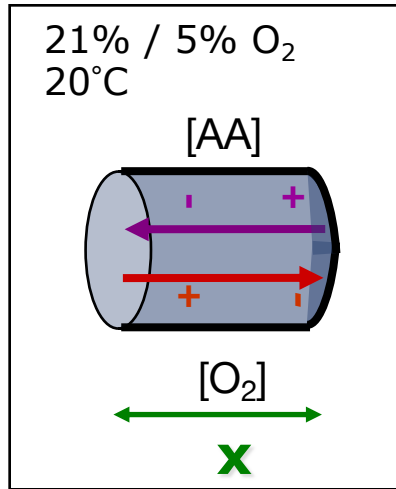
$\frac{\partial [AA](0,t)}{\partial x} = 0$ 
 $\frac{\partial [AA](e,t)}{\partial x} = 0$ 
 $\frac{\partial [O_2]_d(0,t)}{\partial x} = 0$ 
 $\frac{\partial [O_2]_d(e,t)}{\partial x} = 0$

$[O_2]_d(0,t > 0) = S \times p_{O_2}^{gas}(0,t > 0)$

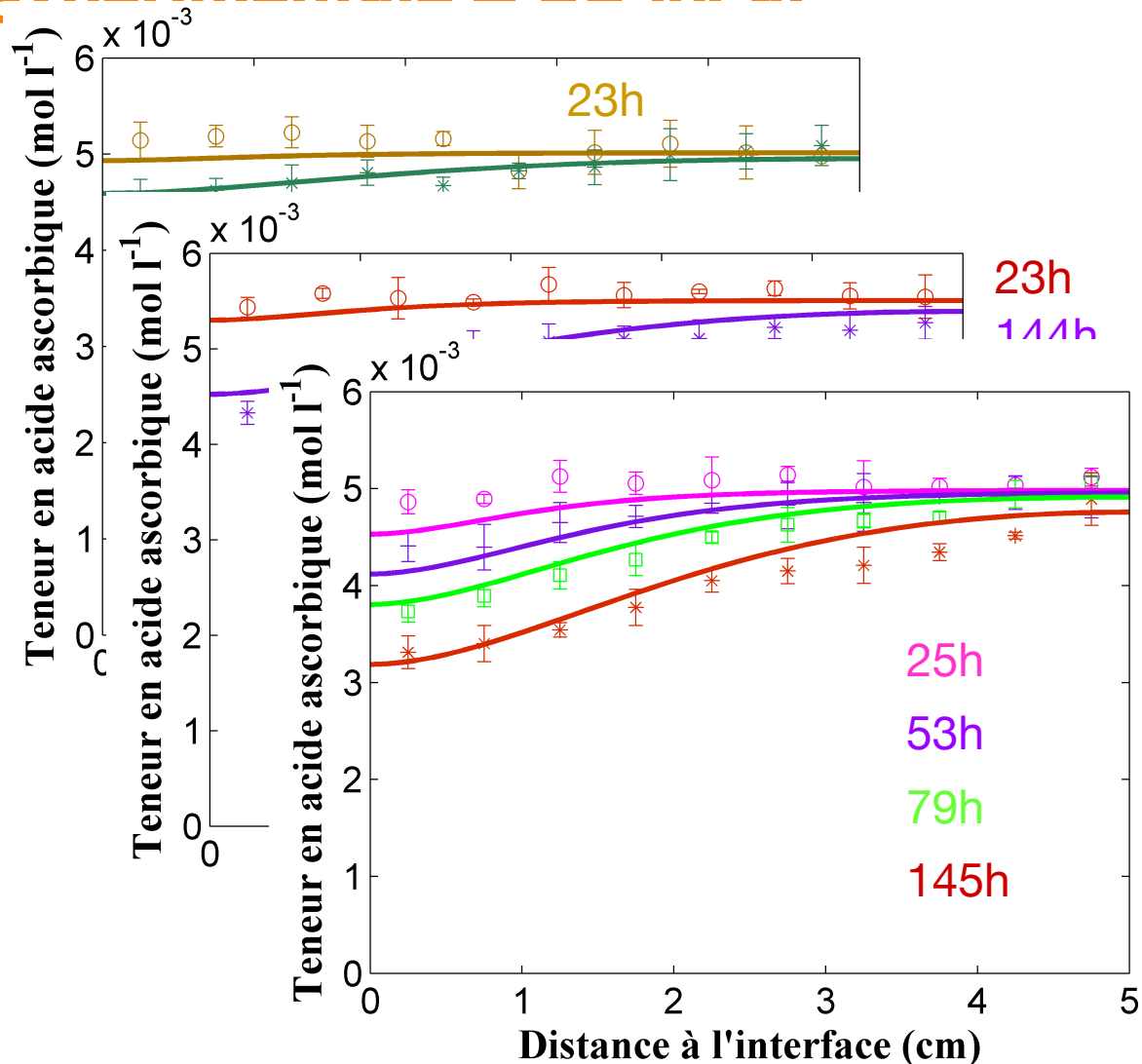
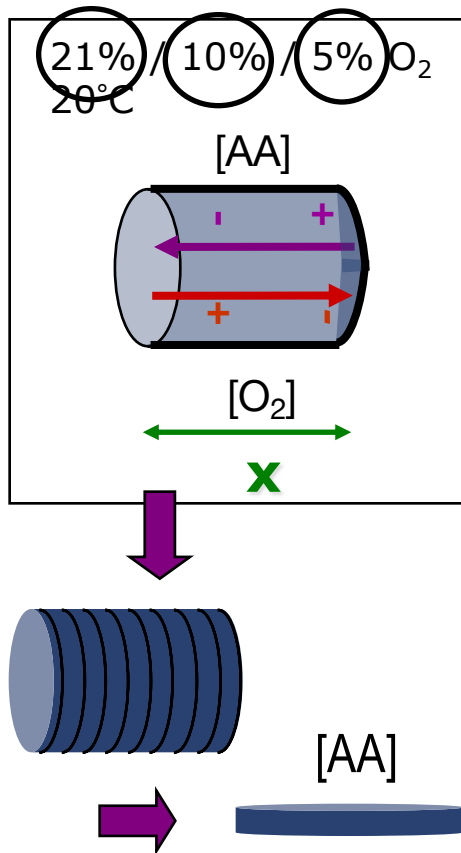
avec

$$\begin{cases} [AA](x,0) = [AA]_0 \\ [O_2]_d(x,0) = [O_2]_{d,0} \end{cases}$$

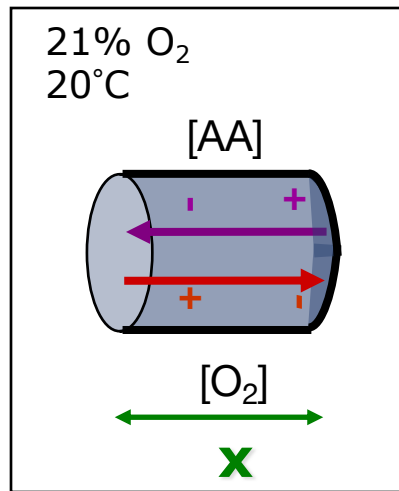
# Validation expérimentale – AA global



# Validation expérimentale – $\Delta\Delta$ local



# Validation expérimentale – O<sub>2</sub> local



Sondes à O<sub>2</sub> placées  
à différentes  
distances de  
l'interface

