



© Olivier Vitrac

Modélisation des transferts de matière dans les aliments à toutes les échelles



En savoir plus

Vitrac O et al.

Modeling in food across the scales: towards a universal mass transfer simulator of small molecules in food.

SN Applied Sciences . 2020 - [10.1007/s42452-020-03272-2](https://doi.org/10.1007/s42452-020-03272-2)

Partenaires

Le code de calcul de dynamique de Langevin est une brique d'un système plus ambitieux permettant de décrire simultanément l'évolution des macroconstituants et macroconstituant de l'aliment à l'aide de représentations particulières multiéchelles.

Contact

Olivier Vitrac

UMR SAYFOOD

olivier.vitrac@inrae.fr



Contexte

À l'échelle macroscopique, les aliments présentent une structure compartimentée et/ou fragmentée qui limite l'emploi d'outils de modélisation largement utilisés en ingénierie pour la simulation de leur transformation, mélange et digestion. À l'échelle microscopique, les lois de la physique interdisent une prédiction exacte du nombre de solutés dans une région de l'espace à un instant donné. La description macroscopique des phénomènes de transferts de matière s'intéresse aux premiers moments statistiques (concentration moyenne et flux). Ce niveau de description est insuffisant pour décrire les mêmes phénomènes de transport à l'échelle microscopique au voisinage d'interfaces, d'agglomérats ou de macromolécules. Il est par conséquent difficile de construire des modèles mathématiques génériques et prédictifs qui prennent en compte les détails de la structure et de la composition des aliments.

Résultats

La diffusion de petits solutés dans les aliments structurés ou en cours de déstructuration est très différente de la diffusion libre. La présence d'interfaces tend à réduire la mobilité moléculaire des solutés et à induire des corrélations dans leurs déplacements sur le long terme. Les propriétés macroscopiques qui en découlent sont qualitativement différentes de celles déduites du désordre local à l'échelle microscopique. L'originalité de l'implémentation numérique

réside sur l'utilisation d'un processus stochastique (dynamique de Langevin) capable de prendre en compte les équilibres thermodynamiques locaux aux interfaces et les espaces confinés sans limites de résolution. Une paramétrisation simple est proposée pour décrire la diffusivité des micronutriments, arômes ou contaminants dans des structures digitalisées types émulsions, suspensions de micelles, liposomes, cellules, etc. La formulation physique finale présente une analogie avec les phénomènes optiques de type réflexion, dispersion, réfraction et diffraction et se prête bien à un calcul parallèle. Comme dans les algorithmes de raytracing, chaque substance explore son environnement indépendamment des autres. Les détails les plus fins sont résolus continument à l'aide de représentations probabilisées exactes pour les interfaces planes 1D ou 2D.

Perspectives

Les propriétés macroscopiques de diffusion au sein d'un aliment peuvent être désormais calculées à tous les stades de sa transformation et de sa digestion sans recourir à une discrétisation spatiale. Les propriétés peuvent être extraites d'observations en microscopie confocale laser ou de microtomographie aux rayons X et reprises dans des simulations issues de la mécanique des milieux continus. La combinaison des échelles macro et micro ouvre de nouveaux champs pour optimiser la structure et obtenir des propriétés contrôlées de barrière et de relargage.