

文章编号:1671-1513(2011)04-0061-03

塑料包装材料迁移数学模型研究

程凤林

(衡水学院 数学与计算机科学系, 河北 衡水 053000)

摘要: 食品包装安全是食品安全的重要组成部分. 介绍了塑料包装材料向食品迁移的数学模型, 同时使用数学方法对模型进行了求解, 为使用数学模型对塑料包装材料迁移进行预测提供了有力的理论依据.

关键词: 数学模型; 食品包装; 迁移

中图分类号: TS206.4

文献标志码: A

塑料包装广泛应用于食品包装中, 塑料包装主要应用于阻止光的照射, 氧气、水蒸气、二氧化碳的渗透, 微生物和其他化学物质的腐蚀, 保持食品质量和卫生, 不损失原始成分和营养, 方便储存, 可以大大提高食品货架期. 然而, 近年来, 食品安全和质量问题越来越受到人们的关注, 因此关于塑料包装安全的负面影响也受到人们的重视. 塑料包装材料内部存留的添加剂、加工助剂、聚合物单体、低聚体、分解产物等化学物会通过吸收、溶解、扩散等过程向食品发生迁移. 这不仅会降低包装材料对食品的保护功能, 还会导致食品受污染而最终危害消费者健康. 对于塑料包装材料内组分迁移的研究通常采用实验手段, 这些实验耗时一般需要数天, 有的甚至上百天. 若低浓度时, 检测起来会非常困难. 另外这些实验花费比较昂贵, 且可能会产生危害性的实验垃圾. 本文通过建立数学模型研究塑料包装材料中化学物向食品的迁移, 这样既便于研究又降低了成本.

由自由体积理论可知, 液体或固体它们的体积主要分为两部分, 一部分是“占有体积”即分子本身占有的体积; 一部分是“自由体积”也就是分子之间的空隙. 迁移物要能够发生迁移则要满足两个条件. 一个是要有足够大的空隙容纳迁移分子; 另一个是迁移分子要有足够大的能量克服周围分子的吸引而进入空隙. 即满足具有足够大自由体积的孔洞及扩

散分子留下的孔洞被另一个临近分子所填充则形成有效扩散. 足够的能量是分子迁移的活化能, 而当聚合物温度较高时, 迁移分子的活化能也越大, 分子则越容易发生迁移.

1 模型建立

塑料包装材料种类繁多, 其中的化学物更多, 向各种食品迁移的研究工作量相当烦琐. 建立相应的数学模型, 对简化研究、建立评价标准等都有很重要的指导意义.

目前包装材料向食品迁移的数学模型研究大都是基于 Fick 扩散定律的迁移模型^[1-2].

Fick 第一定律: $J = -D \frac{dC}{dx}$, 该式描述了一种稳

态扩散, 即污染物浓度不随时间而变化. 大多数扩散过程是非稳态扩散过程, 即材料中某一点的浓度是随时间而变化的. 因此要考虑 Fick 第二定律:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right). \quad (1)$$

通常认为迁移仅发生在包装材料厚度方向上, 因此可用一维的二阶偏微分方程式(1)来描述. 当扩散系数 D 与浓度无关时, (1)式简化为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (2)$$

2 模型求解与分析

为简化过程,通常使用如下假设条件:1)初始时刻,化学物于包装材料均匀接触;2)食品中的化学物分布均匀;3)在整个迁移过程中,扩散系数 D 和分配系数 K 为常数;4)迁移物从包装材料一侧进入食品;5)整个迁移过程符合 Fick 定律;6)迁移过程的任何时刻,扩散都是平衡的;7)忽略包装材料边界效应。

在迁移模型中,包装材料的尺寸一般都视为有限体积,而食品的体积则可以根据情形分为以下两种。1)无限食品,即包装材料的体积远小于食品的体积;2)有限食品,即包装材料的体积与食品的体积相差不大^[3-4]。

2.1 有限包装有限食品的迁移模型

在初始时刻,假定迁移物在包装材料中分布均匀,而食品中不含任何迁移物故食品中迁移物的初始浓度 $C_{F,0} = 0$,但经过某一段时间,迁移过程结束后,迁移物浓度将趋于某一平衡值 $C_{F,e}$ 。

初始条件: $t = 0, 0 < x < L_p, C_{x,t} = C_{P,0}$,

边界条件: $x = L_p, t > 0, C_{x,t} = C_{P,L} = C_{F,0}/K_{F/P}$,

$$x = 0, t > 0, \frac{\partial C_{x,t}}{\partial x} = 0,$$

其中 $C_{P,L}$ 表示包装材料和食品接触面上,包装材料中迁移物浓度。

使用傅里叶级数法可求得:

$$\frac{C_{x,t} - C_{P,0}}{C_{P,e}} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(1+\alpha)\exp(-Dq_n^2 t) \cos\left(\frac{q_n x}{L_p}\right)}{1+\alpha+\alpha^2 q_n^2 \cos(q_n)},$$

整理并引入 $M_{F,t}, M_{F,e}$ 得:

$$\frac{M_{F,t}}{M_{F,e}} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\alpha(1+\alpha)}{1+\alpha+\alpha^2 q_n^2} \exp\left(\frac{-Dq_n^2 t}{L_p^2}\right), \quad (3)$$

公式(3)中, $\alpha = \frac{V_F}{V_P} K_{F,P}$ 为平衡时,食品中的迁移物与塑料包装材料中的迁移物的质量比,其中 $K_{F,P}$ 为食品和包装材料间的分配系数,是常数, V_F, V_P 分别表示食品的体积和塑料包装的体积; $M_{F,t}$ 是 t 时刻食品中迁移物的量; $M_{F,e}$ 为平衡时,食品中迁移物的量; L_p 为塑料包装薄膜厚度; q_n 为 $\tan q_n = -\alpha q_n$ 的正根。

时间 t 较大时,公式(3)能够较快收敛,而当时间 t 较小时,则其等价形式公式(4)更易于收敛。

$$\frac{M_{F,t}}{M_{F,e}} = (1+\alpha) [1 - e^{-\omega} \operatorname{erfc}(\omega^{0.5})], \quad (4)$$

$$\text{其中 } \omega = \frac{Dt}{\alpha^2 L_p^2}.$$

2.2 有限包装无限食品的迁移模型

代入有限包装有限食品迁移模型使用的初始条件和边界条件,使用傅里叶级数法可求得:

$$\frac{C_{x,t} - C_{P,0}}{C_{P,L} - C_{P,0}} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \operatorname{erfc}\left[\frac{(2n+1)L_p - x}{2(Dt)^{0.5}}\right] + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \operatorname{erfc}\left[\frac{(2n+1)L_p + x}{2(Dt)^{0.5}}\right].$$

从零时刻到 t 时刻,迁移物进入食品中的量与迁移平衡时迁移量之比为:

$$\frac{M_{F,t}}{M_{F,e}} = 2 \left(\frac{Dt}{L_p^2}\right)^{0.5} \left\{ \frac{1}{\pi^{0.5}} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \operatorname{ierfc}\left[\frac{nL_p}{(Dt)^{0.5}}\right] \right\}. \quad (5)$$

长时间迁移,公式(5)可等价于:

$$\frac{M_{F,t}}{M_{F,e}} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{8}{(2n+1)^2 \pi^2} \exp\left[\frac{-D(2n+1)^2 \pi^2}{4L_p^2}\right]. \quad (6)$$

当 $t \rightarrow \infty$ 时, $\operatorname{ierfc}\left[\frac{nL_p}{(Dt)^{0.5}}\right] \rightarrow 0$, 则(5)式等价于:

$$\frac{M_{F,t}}{M_{F,e}} = 2 \left(\frac{Dt}{L_p^2}\right)^{0.5}. \quad (7)$$

3 结论

食品包装安全是食品安全的重要组成部分。本文通过建立数学模型研究塑料包装材料中化学物向食品的迁移,通过使用数学方法对模型进行求解,这更便于对塑料包装材料中化学物向食品迁移的研究。

参考文献:

- [1] 李波平,林勤保. PVC 包装材料中化学物向食品迁移的研究[J]. 食品工业科技, 2007, 28(8): 197-200.
- [2] 王志伟,孙彬青,刘志刚. 包装材料化学物迁移研究[J]. 包装工程, 2004, 25(5): 1-5.
- [3] Chung D, Papa S E, Yam K L. Simple models for assessing migration from food-packaging films [J]. Food Additives & Contaminants, 2002, 19(6): 611-617.
- [4] Hanjk, Selkese, Downestw. Application of a computer model to evaluate the ability of plastics to act as functional

barriers [J]. *Packaging Technology and Science*, 2003,

16(3): 107-118.

Research of Mathematical Model for Plastic Packaging Materials Migration

CHENG Feng-lin

(*Department of Mathematic and Computer Science, Hengshui University, Hengshui 053000, China*)

Abstract: Food packaging safety is an important part of food safety. A mathematical model for plastic packaging materials migration was presented in this paper. And mathematical methods were used to solve the model. The mathematical model provided a strong theoretical basis to predict the migration of plastic packaging materials.

Key words: mathematical model; food packaging; migration

(责任编辑:王 宽)

(上接第 60 页)

参考文献:

- [1] 李永旭,刘钊,李小江. 平面连杆机构计算机建模与通用分析软件的开发[J]. *机械设计*,2006,23(5):58-60.
- [2] 安宁,尹业宏,刘小鹏. Pro/ENGINEER 的行为建模技术[J]. *湖北工业大学学报*,2005,20(1):14-17.
- [3] 申永胜. *机械原理教程*[M]. 北京:清华大学出版社,2003:34-80.
- [4] 和青芳,徐征. Pro/Engineer Wildfire 产品设计与机构动力学分析[M]. 北京:机械工业出版社,2004:271-280.
- [5] 祝凌云,李斌. Pro/Engineer 运动仿真和有限元分析[M]. 北京:人民邮电出版社,2004:50-80.

Optimal Design of Linkage Mechanism in Food Packaging Machinery Based on Pro/E

BAI Qiao, TAO Chun-sheng, MA Song-bai

(*School of Material and Mechanical Engineering, Beijing Technology and Business University, Beijing 100048, China*)

Abstract: The application of behavioral modeling technology in the optimization design for ordinary planar link mechanism was introduced in the aspects of kinematic analysis, dynamic analysis and behavioral modeling analysis, based on behavioral modeling module of Pro/E, with a vacuum packaging machine for example. The behavioral modeling technology could improve design efficiency and provided a completely new design view for mechanism design.

Key words: behavioral modeling; optimization design; link mechanism; Pro/Engineer

(责任编辑:檀彩莲)