การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อศึกษาผลของอุณหภูมิ ความชื้น และค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซของฟิล์มพอลิเมอร์ ต่อบรรยากาศดัดแปรภายในบรรจุภัณฑ์สำหรับผักและผลไม้สด

นาย ยิ่งศักดิ์ บุญชำนาญ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2543

ISBN 974-346-457-3

MATHEMATICAL MODELING FOR INVESTIGATING THE IMPACT OF TEMPERATURE, HUMIDITY, AND POLYMER FILM PERMEABILITY ON MODIFIED ATMOSPHERE IN A PACKAGE FOR FRESH PRODUCE

Mr. Yingsak Boonchamnan

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering
Department of Chemical Engineering
Faculty of Engineering
Chulalongkorn University
Academic Year 2000
ISBN 974-346-457-3

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อศึกษาผลของอุณหภูมิ ความชื้น และค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซของฟิล์มพอลิเมอร์ต่อบรรยากาศดัดแปรภายในบรรจุภัณฑ์สำหรับผักและผลไม้สด
โดย	นาย ยิ่งศักดิ์ บุญชำนาญ
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา	อาจารย์ ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

..... คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์

(ศาสตราจารย์ ดร. สมศักดิ์ ปัญญาแก้ว)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตัณฑะพานิชกุล)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา

(อาจารย์ ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์)

..... กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช)

ยิ่งศักดิ์ บุญชำนาญ : การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อศึกษาผลของอุณหภูมิ ความชื้น และค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซของฟิล์มพอลิเมอร์ต่อบรรยากาศดัดแปรภายในบรรจุภัณฑ์สำหรับผักและผลไม้สด (MATHEMATICAL MODELING FOR INVESTIGATING THE IMPACT OF TEMPERATURE, HUMIDITY, AND POLYMER FILM PERMEABILITY ON MODIFIED ATMOSPHERE IN A PACKAGE FOR FRESH PRODUCE) อ. ที่ปรึกษา : ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์ , 176 หน้า ISBN 974-346-457-3.

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของบรรจุภัณฑ์แบบบรรยากาศดัดแปร (Modified Atmosphere Packaging, MAP) ซึ่งประกอบด้วยสมการดุลมวลของก๊าซออกซิเจน ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ ก๊าซไนโตรเจน และไอน้ำ ได้ถูกพัฒนาขึ้น สมการดุลมวลประกอบไปด้วยพจน์อัตราการซึมผ่านเข้าออกชั้นฟิล์มพอลิเมอร์ของก๊าซและพจน์ของอัตราการผลิตหรือใช้ก๊าซเนื่องจากการหายใจหรือการคายน้ำของผักและผลไม้สด ค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซผ่านฟิล์มพอลิเมอร์ในสมการเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิแบบอาเรเนียสและตามความชื้นสัมพัทธ์ภายในบรรจุภัณฑ์แบบเส้นตรง สมการอัตราการหายใจแบบไมเคิลลิสเมนเทนชนิดมีการยับยั้งแบบอันคอมเพททิทีฟ (Michaelis-Menten Uncompetitive Type) ซึ่งเปลี่ยนแปลงตามอุณหภูมิแบบอาเรเนียสถูกนำมาใช้ อัตราการคายน้ำในสมการเป็นฟังก์ชันของอุณหภูมิและเปลี่ยนแปลงตามความชื้นสัมพัทธ์ภายในบรรจุภัณฑ์แบบเส้นตรง โปรแกรม MAP 2000 ถูกเขียนขึ้นด้วยโปรแกรมไมโครซอฟต์วิชวลเบสิกเพื่อคำนวณหาความดันย่อยของก๊าซต่าง ๆ ภายในบรรจุภัณฑ์ ณ เวลาใด ๆ จากแบบจำลองทางคณิศาสตร์ด้วยวิธีคำนวณเชิงตัวเลขแบบรังกัตตากิลอันดับที่สี่

โปรแกรม MAP 2000 ที่พัฒนาขึ้นสามารถคำนวณค่าความดันย่อยของก๊าซต่าง ๆ ณ เวลาใด ๆ ภายในบรรจุภัณฑ์แบบบรรยากาศดัดแปรได้อย่างถูกต้องและสอดคล้องกับผลการทดลอง 4 ชุดที่ได้รวบรวมจากงานวิจัยอื่น ๆ ที่ผ่านมา (ค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจ R^2>0.90) และสำหรับกรณีตัวอย่างที่ได้ศึกษาพบว่า (ก) เมื่ออุณหภูมิในการเก็บรักษา (T) สูงขึ้น ความดันย่อยของก๊าซออกซิเจนที่ภาวะคงตัวมีแนวโน้มลดลง ในขณะที่ความดันย่อยของก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์และไอน้ำที่ภาวะคงตัวมีแนวโน้มเพิ่มขึ้น ส่วนเวลาในการเข้าสู่ภาวะคงตัวมีแนวโน้มลดลง โดยในช่วงอุณหภูมิต่ำจะมีอัตราการลดลงสูงกว่าช่วงอุณหภูมิสูง (ข) เมื่อความชื้นสัมพัทธ์ในการเก็บรักษา (%RH) สูงขึ้น (สำหรับพอลิเมอร์ที่ความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซเพิ่มสูงขึ้นตามความชื้นสัมพัทธ์) ความดันย่อยที่ภาวะคงตัวของก๊าซออกซิเจนและก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์จะเพิ่มสูงขึ้น (ค) เมื่อความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซออกซิเจนของฟิล์มพอลิเมอร์ (P_{O2}) เพิ่มสูงขึ้น ความดันย่อยที่ภาวะคงตัวของก๊าซออกซิเจนและก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์มีแนวโน้มเพิ่มขึ้น (ง) เมื่อความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ของฟิล์มพอลิเมอร์ (P_{CO2}) เพิ่มสูงขึ้น ความดันย่อยที่ภาวะคงตัวของก๊าซออกซิเจนและก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์มีแนวโน้มลดลง (จ) สภาวะในการบรรจุมีผลกระทบต่อบรรยากาศดัดแปรที่เกิดขึ้นในบรรจุภัณฑ์น้อยกว่าสภาวะในการเก็บรักษา (ฉ) ความเข้มข้นเริ่มต้นของก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ภายในบรรจุภัณฑ์ไม่มีผลกระทบต่อบรรยากาศดัดแปรที่ภาวะคงตัวและเวลาในการเข้าสู่ภาวะคงตัว นอกจากนี้ยังได้แสดงแนวทางการคำนวณหาเงื่อนไขที่เหมาะสมของ $P_{O2}A/dW$ และ $P_{CO2}A/dW$ (A=พื้นที่ผิวของบรรจุภัณฑ์ที่สัมผัสกับบรรยากาศ, d=ความหนาของฟิล์มที่ใช้ทำบรรจุภัณฑ์ และ W=น้ำหนักของผักและผลไม้สดที่บรรจุ) ของบรรจุภัณฑ์แบบบรรยากาศดัดแปรสำหรับบรอคโคลี่และกะหล่ำปลี

ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี	ลายมือชื่อนิสิต ยิ่งศักดิ์ บุญชำนาญ
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....
ปีการศึกษา	2543	ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

4170468821 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD : MODIFIED ATMOSPHERE / FRESH PRODUCES / MODELING / TEMPERATURE / HUMIDITY

YINGSAK BOONCHAMNAN : MATHEMATICAL MODELING FOR INVESTIGATING THE IMPACT OF TEMPERATURE, HUMIDITY, AND POLYMER FILM PERMEABILITY ON MODIFIED ATMOSPHERE IN A PACKAGE FOR FRESH PRODUCE. THESIS ADVISOR : VARUN TAEPAISITPHONGSE, Ph.D. 176 pp. ISBN 974-346-457-3.

The mathematical model of modified atmosphere package (MAP) which contains 4 mass balance equations for oxygen, carbon dioxide, nitrogen and water vapor was developed. Each mass balance equation composed of the term for rate of permeation of gases through the polymeric film and the term for rate of consumption or production of gas from respiration or transpiration of fresh produce. The gas permeabililty of polymeric film, that changed with temperature according to Arrhenius' law and changed linearly with relative humidity inside the package, was used. The respiration term of Michaelis-Menten uncompetitive type, which changed with temperature according to Arrhenius' law, was employed. The transpiration rate, which was the function of temperature and changed linearly with relative humidity inside the package, was used. The MAP 2000 – a computer program for calculating the partial pressure of each gas inside the package as a function of time – was written under Microsoft Visual Basic program and used the 4th order Runge-Kutta-Gill numerical method to solve the above mass balance equations simultaneously.

It was found that the calculated results obtained from MAP 2000 were in good agreement with 4 experimental results available in the journals ($R^2 > 0.90$). For the cases studied, it was found that when storage temperature (T) was increased, the steady state partial pressure of oxygen was decreased but carbon dioxide and water vapor were increased. Also, the time to reach steady state was decreased with a higer rate at low temperature range than at higher temperature range. When initial relative humidity (%RH) of storage atmosphere was increased (for the case that the gas permeability increases with increasing humidity), the steady state partial pressure of oxygen and carbon dioxide were increased. When permeability of oxygen (P_{O2}) were increased, the steady state partial pressure of oxygen and carbon dioxide were increased. However, when permeability of carbon dioxide (P_{CO2}) were increased, the steady state partial pressure of oxygen and carbon dioxide were decreased. Storage condition affected the modified atmosphere inside the package more than the packing condition. Initial concentration of carbon dioxide inside the package had no effect on MAP and time to reach steady state. Additionally, the procedure to determine the proper values of $P_{O2}A/dW$ and $P_{CO2}A/dW$ (A=package surface area, d=film thickness and W=produce weight) of MAP for broccoli and cabbage were shown as examples.

Department	Chemical Engineering	Student's signature	Yingsak Boonchamnan
Field of study	Chemical Engineering	Advisor's signature	Varun Taepaisitphongse
Academic year	2000	Co-advisor's signature	.....

กิตติกรรมประกาศ

" สุวิชาโน ภวํ โหติ "

" ผู้รู้ดีเป็นผู้เจริญ "

ผู้เขียนขอกราบขอบพระคุณอาจารย์ ดร. วรัญ แต้ไพสิฐพงษ์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ที่ได้กรุณาให้คำปรึกษาแนะแนวทางการทำวิจัยและข้อคิดเห็นในการแก้ไขปัญหาต่าง ๆ ตลอดจนช่วยแก้ไขและปรับปรุงเพิ่มเติมวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ทำให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลุล่วงไปได้อย่างดียิ่ง

และขอขอบคุณคณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ซึ่งประกอบด้วย ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตัณฑะพานิชกุล ประธานกรรมการ และผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช กรรมการ ที่กรุณาให้ข้อคิดเห็นที่เป็นประโยชน์ในการทำวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ให้มีความสมบูรณ์ยิ่งขึ้น

สุดท้ายนี้ ผู้เขียนใคร่ขอกราบขอบพระคุณ บิดา มารดา และผู้มีอุปการะคุณที่ให้การสนับสนุนตลอด และเป็นกำลังใจให้ตลอดมาจนสำเร็จการศึกษา

สารบัญ

หน้า

สารบัญภาพ

หน้า

หน้า

หน้า

สารบัญตาราง

หน้า

คำอธิบายสัญญลักษณ์

สัญญลักษณ์

A	คือ	พื้นที่ของฟิล์มที่สัมผัสกับบรรยากาศ (cm^2)
a	คือ	ค่าพารามิเตอร์ของการหายใจ ขึ้นอยู่กับชนิดของผักและผลไม้ ($\frac{1}{kPa}$)
b	คือ	ค่าพารามิเตอร์ของการหายใจ ขึ้นอยู่กับชนิดของผักและผลไม้ ($\frac{mmol}{kg \cdot hr}$)
C_1	คือ	ความเข้มข้นของซับสเตรท (substrate)
C_2	คือ	ความเข้มข้นของตัวยับยั้ง (inhibitor)
D	คือ	ค่าความสามารถในการแพร่ (diffusivity)
d	คือ	ความหนาของฟิล์มพอลิเมอร์ (mm)
E_a	คือ	พลังงานก่อกัมมันต์ (activation energy) ของค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซ ($\frac{kJ}{mol}$)
E_{af}	คือ	พลังงานก่อกัมมันต์ (activation energy) ของการหายใจของผลิตผลสด ($\frac{kJ}{mol}$)
E_{coh}	คือ	พลังงานในการยึดเกาะ (cohesive energy)
h	คือ	ค่าคงที่ของแพลงก์ (Planck's constant) มีค่าเท่ากับ 3.976×10^{-32} $\frac{m^2 \cdot kg}{hr}$
I	คือ	ความเข้มข้นของตัวยับยั้งในสมการการหายใจแบบไมเคิลลิสเมนเทน
i	คือ	ค่าพารามิเตอร์ของการหายใจ ขึ้นอยู่กับชนิดของผักและผลไม้ ($\frac{1}{kPa}$)
J	คือ	อัตราการคายน้ำ ($\frac{mmol}{hr}$)

K คือ สัมประสิทธิ์การคายน้ำ (transpiration coefficient, $\frac{mmol}{kg \cdot hr \cdot kPa}$)

K_i คือ ค่าคงที่ของสมการการหายใจแบบไมเคิลลิสเมนเทน

K_{i-O_2} คือ ค่าคงที่ของการยับยั้งของก๊าซออกซิเจน

K_{i-CO_2} คือ ค่าคงที่ของการยับยั้งของก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์

K_m คือ ค่าคงที่ของสมการการหายใจแบบไมเคิลลิสเมนเทน

k คือ ค่าคงที่ของโบลต์ซมันน์ (Boltzmann's constant) มีค่าเท่ากับ

$$4.97 \times 10^{-20} \frac{m^2 \cdot kg}{hr^2 \cdot K}$$

L คือ ค่าคงที่ของอะโวกาโดร (Avogadro's constant) มีค่าเท่ากับ

$$6.022 \times 10^{20} \frac{molecules}{mmol}$$

N คือ จำนวนแหล่งกัมมันต์สำหรับยึดก๊าซออกซิเจน ($\frac{molecules}{kg}$)

n คือ จำนวนโมลของก๊าซ (mmol)

n คือ ค่าความชันของการเปลี่ยนแปลงค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซเทียบกับความชื้นสัมพัทธ์ (คงที่ที่ทุกอุณหภูมิ, $\frac{mmol \cdot mm}{cm^2 \cdot hr \cdot kPa \cdot \%RH}$)

n คือ จำนวนข้อมูลที่นำมาพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจ

m คือ อัตราการคายน้ำของผักและผลไม้สด (transpiration rate, $\frac{mmol}{hr \cdot kg}$)

P คือ ค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซผ่านฟิล์มพอลิเมอร์ (permeability, $\frac{mmol \cdot mm}{cm^2 \cdot hr \cdot kPa}$)

P_n คือ ค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซชนิด n ผ่านฟิล์มพอลิเมอร์ ($\frac{mmol \cdot mm}{cm^2 \cdot hr \cdot kPa}$)

P_o คือ ค่าความสามารถในการซึมผ่านของก๊าซผ่านฟิล์มพอลิเมอร์ที่อุณหภูมิอนันต์ ($\frac{mmol \cdot mm}{cm^2 \cdot hr \cdot kPa}$)

p คือ ความดัน (kPa)

p_n คือ ความดันย่อยของก๊าซ n (kPa)

Q	คือ	ปริมาณของสารที่ซึมผ่านฟิล์มพอลิเมอร์ ($\frac{mmol}{hr}$)
Q_{10}	คือ	อัตราส่วนอุณหภูมิ (temperature quotient)
R	คือ	อัตราการหายใจของผักและผลไม้สด (respiration rate, $\frac{mmol}{hr \cdot kg}$)
R	คือ	ค่าคงที่ของก๊าซ (gas constant)
R	คือ	ความต้านทานการเคลื่อนที่ของไอน้ำ
R^2	คือ	ค่าสัมประสิทธิ์การตัดสินใจ
RH	คือ	ความชื้นสัมพัทธ์
r	คือ	อัตราการเกิดปฏิกิริยาการหายใจแบบไมเคิลลิสเมนเทน
r_O	คือ	ค่าพารามิเตอร์พรีเอกซ์โพเนนเชียล (pre-exponential parameter) ของการหายใจ
S	คือ	ค่าความสามารถในการละลาย (solubility)
s	คือ	ความเข้มข้นของซับสเตรทในสมการการหายใจแบบไมเคิลลิสเมนเทน
T	คือ	อุณหภูมิสัมบูรณ์ (absolute temperature, K)
T_g	คือ	อุณหภูมิเปลี่ยนสถานะแก้ว (gas transition temperature)
t	คือ	เวลาในการเก็บรักษา (ชั่วโมง)
V	คือ	ปริมาตรของช่องว่างภายในบรรจุภัณฑ์
V_m	คือ	ค่าคงที่ของสมการการหายใจแบบไมเคิลลิสเมนเทน
V_f	คือ	ปริมาตรอิสระ (free volume, cm^3)
Y_i	คือ	ค่าข้อมูลที่ i ที่คำนวณได้จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์
$\hat{Y}_i$	คือ	ค่าข้อมูลที่ i ที่ได้จากการทดลอง
ΔG	คือ	ค่าพลังงานกระตุ้นของกิ๊บส์สำหรับการยึดก๊าซออกซิเจน ($\frac{m^2 \cdot kg}{hr \cdot mmol}$)
Δp	คือ	ผลต่างของความดันระหว่างภายนอกและภายในบรรจุภัณฑ์ (kPa)
δ_p	คือ	ความสามารถในการในการละลายของพอลิเมอร์ (solubility parameter of polymer)
δ_w	คือ	ความสามารถในการในการละลายของไอน้ำ (solibility parameter of water vapor)

ตัวยก

ext	คือ	ภายนอกบรรจุภัณฑ์
pkg	คือ	ภายในบรรจุภัณฑ์
pro	คือ	บริเวณพื้นผิวของผักและผลไม้สด
ref	คือ	ค่าอ้างอิง
sat	คือ	สภาวะอิ่มตัว

ตัวห้อย

CO_2	คือ	ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์
H_2O	คือ	ไอน้ำ
N_2	คือ	ก๊าซไนโตรเจน
O_2	คือ	ก๊าซออกซิเจน
P	คือ	พอลิเมอร์
ss	คือ	ภาวะคงตัว (steady state)
total	คือ	รวมทั้งหมด