ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
E46977

MATHEMATICAL MODELING OF RELEASE OF ANTIOXIDANTS FROM CHITOSAN FILMS

MISS PHATSORN WAISAYAWAN

A SPECIAL RESEARCH PROJECT SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF MASTER OF ENGINEERING (CHEMICAL ENGINEERING)
FACULTY OF ENGINEERING
KING MONGKUT'S UNIVERSITY OF TECHNOLOGY THONBURI
2010

b00216647

ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
E46977

Mathematical Modeling of Release of Antioxidants from Chitosan Films

Miss Phatsorn Waisayawan B.Eng. (Chemical Engineering)

A Special Research Project Submitted in Partial Fulfillment
of the Requirements for
the Degree of Master of Engineering (Chemical Engineering)
Faculty of Engineering
King Mongkut's University of Technology Thonburi
2010

THE NATIONAL RESEARCH COUNCIL OF THAILAND
RESEARCH LIBRARY

Special Research Project Committee

.... (Assoc. Prof. Somkiat Prachayawarakorn, Ph.D.)	Chairman of Special Research Project Committee
.... (Assoc. Prof. Sakamon Devahastin, Ph.D.)	Member and Special Research Project Advisor
.... (Lect. Saowakon Wongsasulak, D.Eng.)	Member

Copyright reserved

Special Research Project Title	Mathematical Modeling of Release of Antioxidants from Chitosan Films
Special Research Project Credits	6
Candidate	Miss Phatsorn Waisayawan
Special Research Project Advisor	Assoc. Prof. Dr. Sakamon Devahastin
Program	Master of Engineering
Field of Study	Chemical Engineering
Department	Chemical Engineering
Faculty	Engineering
B.E.	2553

E46977

Abstract

Antioxidants are nowadays added to many types of food packagings, especially packaging films, to enhance their effectiveness in protecting food from an environment. This positive action is possible due to the release of the agents from the film matrix into food to reduce oxidation, thus extending the product shelf life. For effective design of antioxidant-added films, the release characteristics of antioxidants from the films under various conditions need to be known. The aim of this study was to test various simple mathematical models for prediction of the release of antioxidants from edible chitosan films into distilled water at room temperature; chitosan films were prepared via hot air drying, vacuum drying and low-pressure superheated steam drying. The models with different expressions of the effective diffusivity were tested. The model equations were solved numerically using the finite element method via COMSOL Multiphysics™ software (version 3.5). The prediction efficiency of the models was verified by comparing the predicted release kinetics of the antioxidants, in terms of the total phenolics content (TPC), with the experimental data of Mayachiew et al. (2010). It was found that the model assuming the effective diffusivity as a function of the phenolics concentration gave the best agreement with the experimental results.

Keywords: Antioxidant / Chitosan Films / Diffusion / Distilled water / Effective Diffusivity / Mathematical Model

หัวข้อโครงการศึกษาวิจัย	แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการปลดปล่อยสารต้านอนุมูลอิสระจากฟิล์มไคโตซาน
หน่วยกิต	6
ผู้เขียน	นางสาวภัสสร ไวยศยะวรรณ์
อาจารย์ที่ปรึกษา	รศ. ดร.สักกมน เทพหัสดิน ณ อยุธยา
หลักสูตร	วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
คณะ	วิศวกรรม
พ.ศ.	2553

E46977

บทคัดย่อ

ปัจจุบันมีการเติมสารต้านอนุมูลอิสระชนิดต่างๆ ลงในบรรจุภัณฑ์สำหรับอาหาร โดยเฉพาะอย่างยิ่งฟิล์มห่อหุ้มอาหาร เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในการปกป้องอาหารจากสิ่งแวดล้อม ทั้งนี้สารต้านอนุมูลอิสระที่เติมลงไปจะแพร่จากเนื้อฟิล์มไปยังอาหารและช่วยลดการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันในอาหาร จึงสามารถยืดอายุการเก็บรักษาของอาหารนั้นได้ ในการออกแบบฟิล์มที่มีการเติมสารต้านอนุมูลอิสระอย่างมีประสิทธิภาพนั้นจำเป็นต้องทราบพฤติกรรมการปลดปล่อยของสารต้านอนุมูลอิสระจากฟิล์มภายใต้สภาวะต่างๆ งานวิจัยนี้จึงมีวัตถุประสงค์เพื่อทดสอบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์อย่างง่ายสำหรับทำนายคุณลักษณะการปลดปล่อยของสารต้านอนุมูลอิสระจากฟิล์มไคโตซานไปยังน้ำกลั่นที่อุณหภูมิห้อง ซึ่งฟิล์มไคโตซานเตรียมโดยการอบแห้งแบบลมร้อน สุญญากาศ และไอน้ำร้อนยวดยิ่งที่สภาวะความดันต่ำ ทั้งนี้ทำการแก้สมการของแบบจำลองที่ใช้สมการสำหรับทำนายค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ยังผลที่แตกต่างกันโดยระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ผ่านโปรแกรมสำเร็จรูป COMSOL Multiphysics™ เวอร์ชัน 3.5 จากนั้นจึงนำผลการจำลองที่ได้มาเปรียบเทียบกับผลการทดลองเพื่อเปรียบเทียบประสิทธิภาพการทำนายของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ต่างๆ ที่ทำการทดสอบ ทั้งนี้ทำการเปรียบเทียบผลการจำลองกับผลการทดลองในแง่ของปริมาณสารฟีนอลิกทั้งหมด (TPC) (Mayachiew et al., 2010) จากผลการเปรียบเทียบพบว่าแบบจำลองที่สมมติให้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ยังผลเป็นฟังก์ชันของความเข้มข้นของปริมาณสารฟีนอลิกทั้งหมดให้ผลใกล้เคียงกับผลการทดลองมากที่สุด

E46977

คำสำคัญ: การแพร่ / สัมประสิทธิ์การแพร่ยังผล / น้ำกลั่น / ฟิล์มไคโตซาน / แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ / สารต้านอนุมูลอิสระ

ACKNOWLEDGEMENTS

This project would not have been possible without direct and indirect assistance of many persons. First, I would like to express my gratitude to the advisor of this project, Assoc. Prof. Dr. Sakamon Devahastin, for the technical support, valuable guidance and encouragement. My appreciation also goes to the committee members of this project, Assoc. Prof. Dr. Somkiat Prachayawarakorn and Dr. Saowakon Wongsasulak, for their technical suggestions and comments.

I would like to express my special thanks to Ms. Wasina Thakhiew who gave many good advices on the experimental procedure. Thanks are also due to Mrs. Chadaporn Dammunee, staff of the Chemical Engineering Practice School (ChEPS), who helped with the communication and provided much important information leading to the success of this project. Lastly, this project would not have been completed without tremendous support from my family and friends to whom I sincerely express my appreciation.

CONTENTS

LIST OF TABLES

LIST OF FIGURES

LIST OF SYMBOLS

a_1, a_2	=	Constants
c	=	Concentration (mg/g film)
c_a	=	Additive concentration (mg/g film)
c_{TPC}	=	Concentration of phenolics in chitosan film (mg/g dried film)
c_{TPC0}	=	Initial concentration of phenolics (mg/g dried film)
c_w	=	Water concentration (g/g dried film)
c_{w0}	=	Initial concentration of water (g/g dried film)
D	=	Diffusion coefficient (m^2/s)
D_{eff}	=	Effective diffusion coefficient (m^2/s)
j	=	Mass flux (mg/m^2s^2)
k	=	Constant
$L(t)$	=	Half of film thickness (μm)
M_t	=	Amount of released solute at time t (mg/g dried film)
M_∞	=	Amount of released solute at equilibrium (mg/g dried film)
n	=	Constant
t	=	Time (s or h)
u	=	Additive volume fraction in swollen region
v	=	Velocity of the glassy/rubbery interface (m/s)
x	=	Distance along the film thickness (μm)

GREEK SYMBOLS

δ	=	Film thickness (μm)
δ_r	=	Thickness of swollen layer (μm)
λ	=	Relaxation time (s)
θ	=	Water diffusion time (s)

ABBREVIATIONS

De	=	Deborah number
MSE	=	Mean square error
R^2	=	Correlation coefficient
S_w	=	Swelling interface number