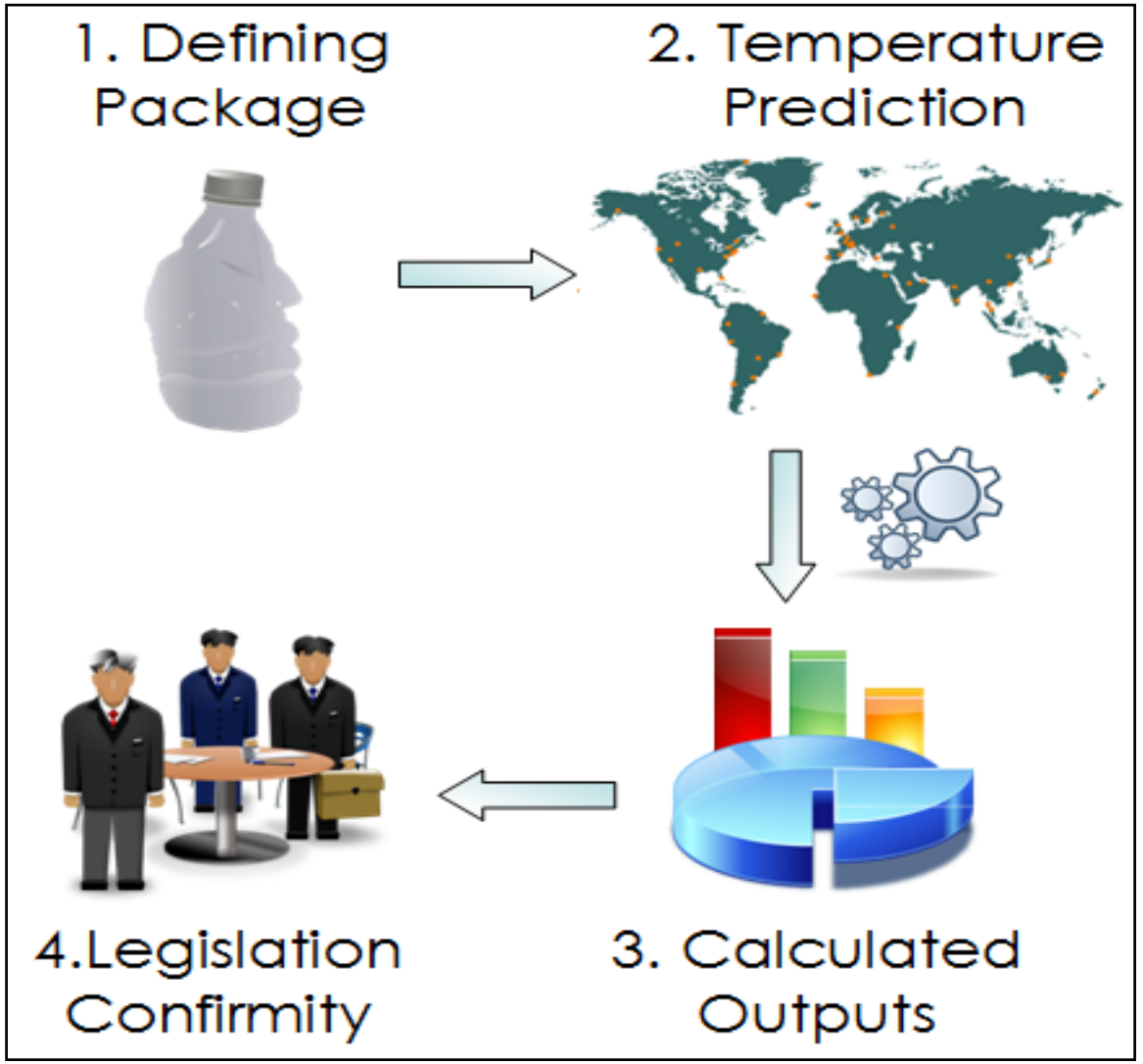
SML5によるシミュレーション操作例の説明

PETのAp-ValueはEU規制のガイドラインに沿って、Tg点温度前後の70℃以下と70℃以上の2種類から選択可能　Version　5.09より対応可能
ただしデータベースのAp-Valueは1種類につき、手動で操作する。

作成　2018-02-21　　Ver. 5.231
AKTS日本総代理店　　(株)パルメトリクス

1：溶出試験条件の設定

2：環境温度での溶出量予測



4：規制に従っているか？

3：予測（計算）結果の出力

SML5の9ステップ操作手順

① Package（食品包装物）形状を設定　　SML geometry

② ポリマー（Layer)数を定義　　Max　n=10

③ ポリマーの種類を定義　　SML5 database
　ポリマーの厚さ （μm単位）

④ 食品接触材料（Contact medium）を定義　　SML5 database

⑤ 移行物質（Substance）を定義　　SML5 database
　Substanceの濃度（ppm）　n=10

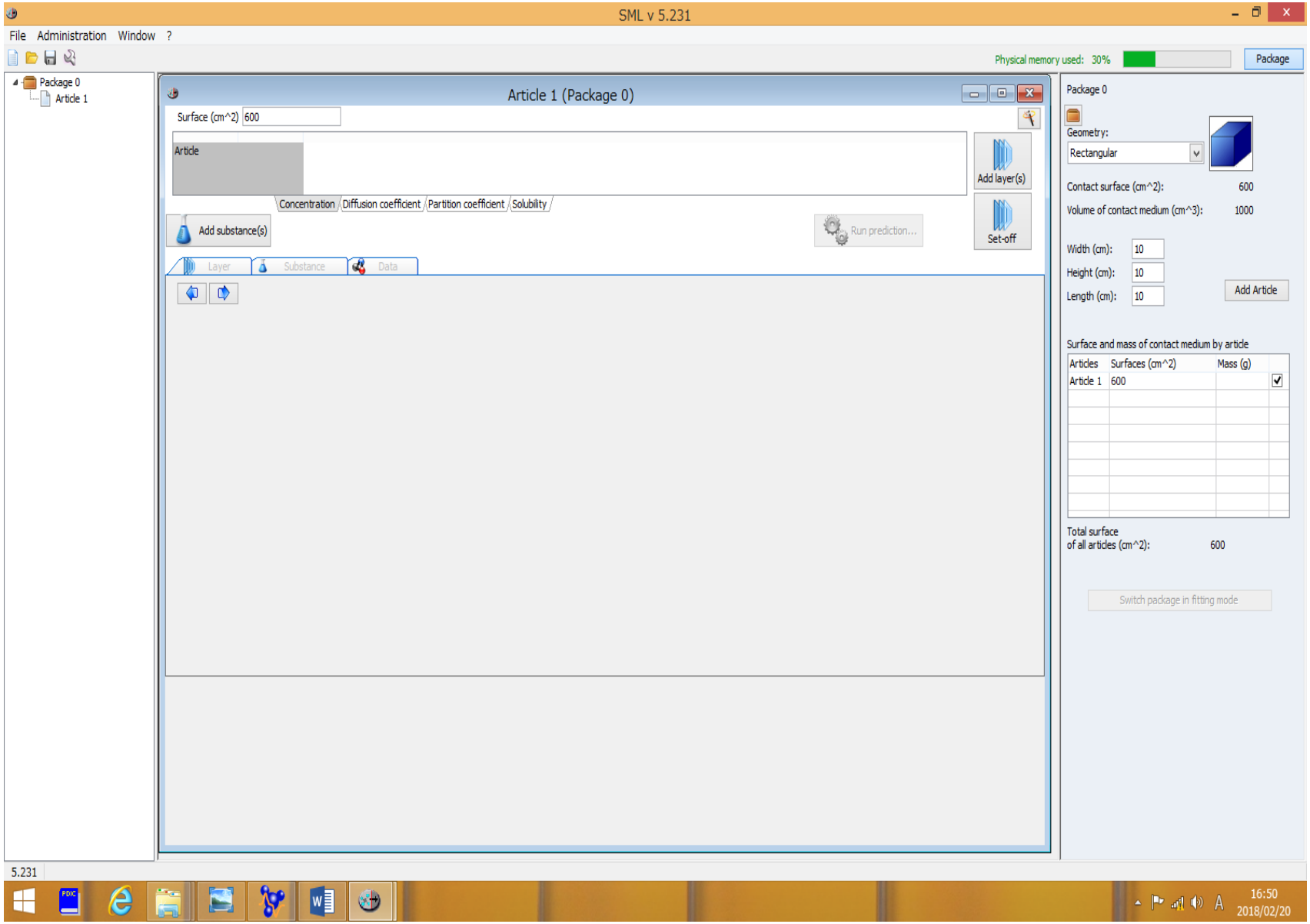
⑥ 拡散定数の設定（選択）　　Ap-Value, Tg,Bransdsch,

⑦ 分配係数の設定　　Solibility, Pow ,Kp=1,

⑧ 溶出試験条件の温度条件設定

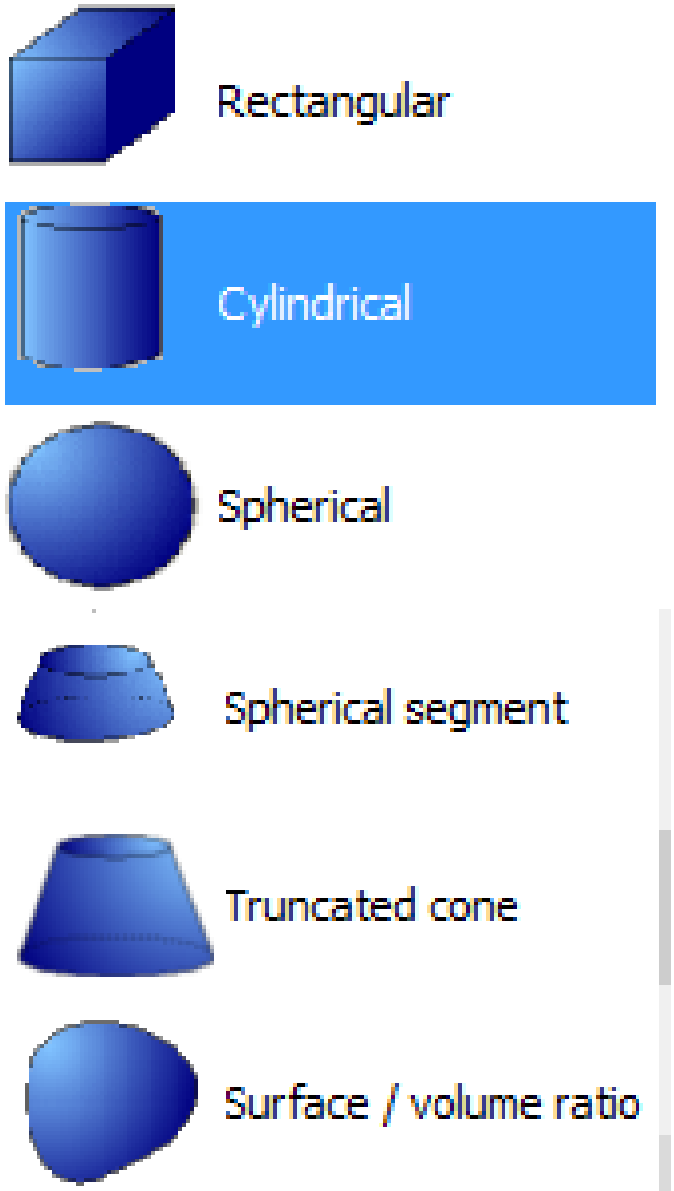
⑨ SML5によるシミュレーション　　計算実行

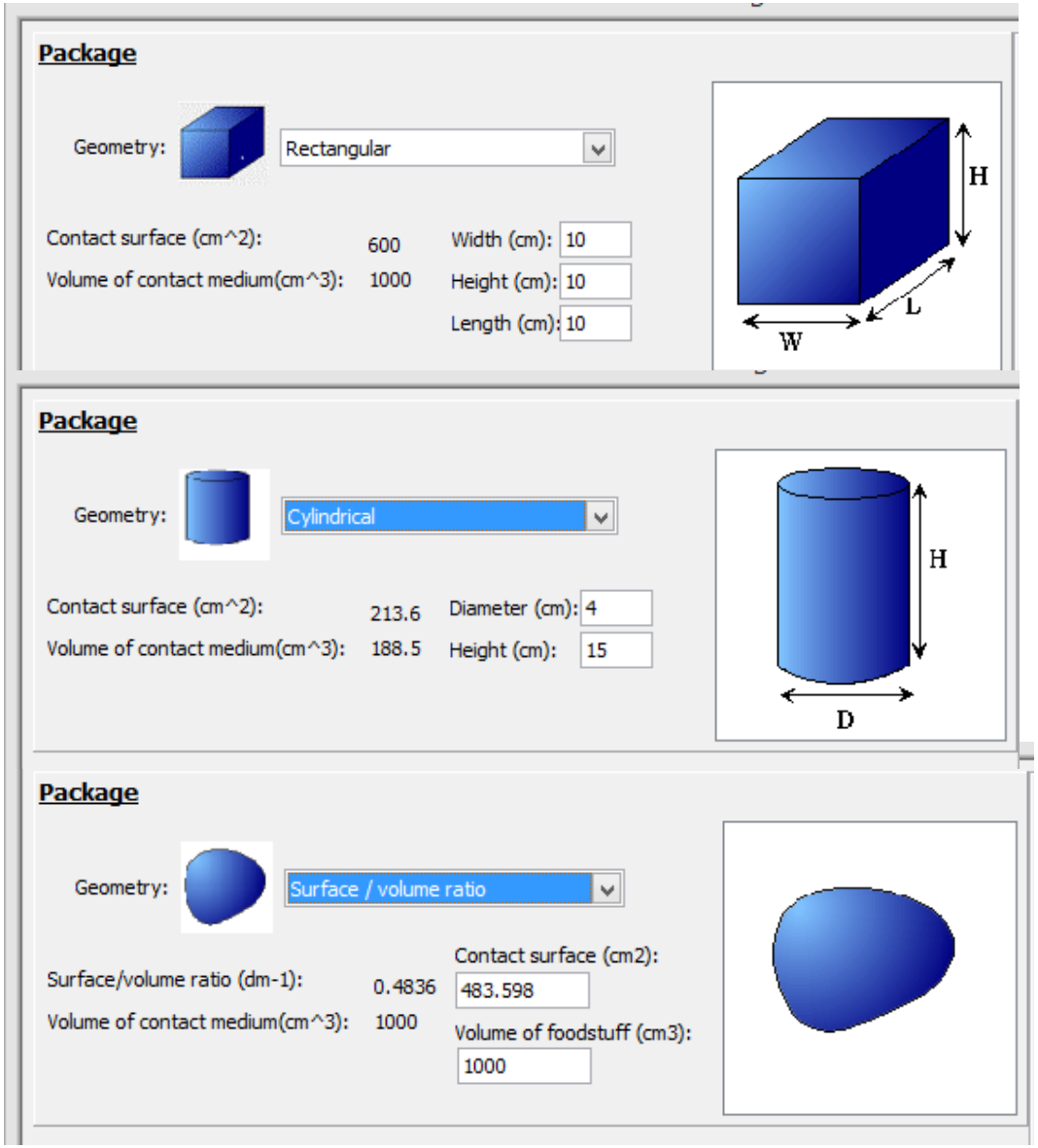
Version_5.231の画面　この操作説明にはVersion　5.09も混在していますが基本操作は同じです。
Wizard機能をOFFとした場合の表示例となっています。



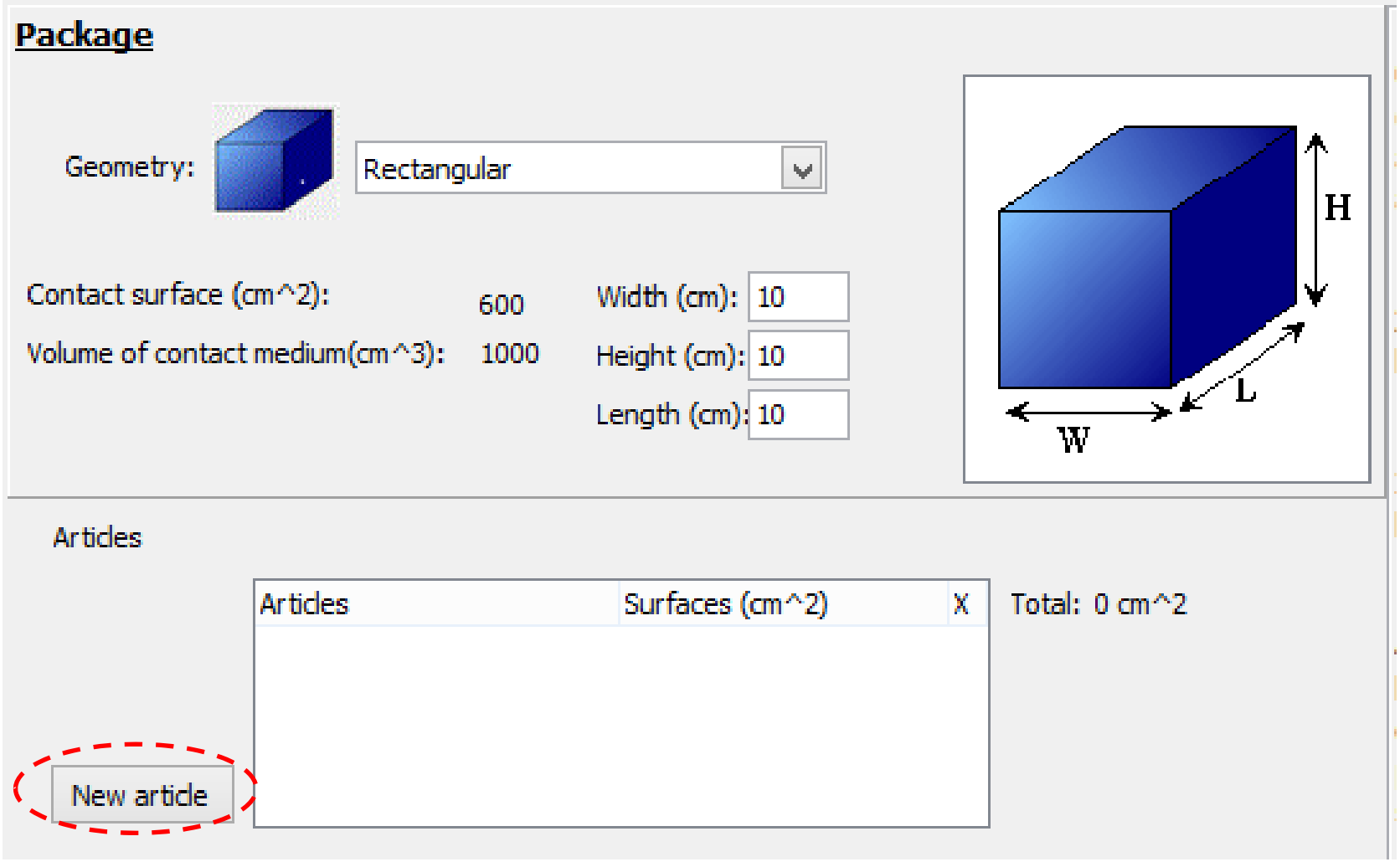
① Package（食品包装物）形状を設定

Packageの形状の種類を選択（前頁右端の画面のみ抽出）



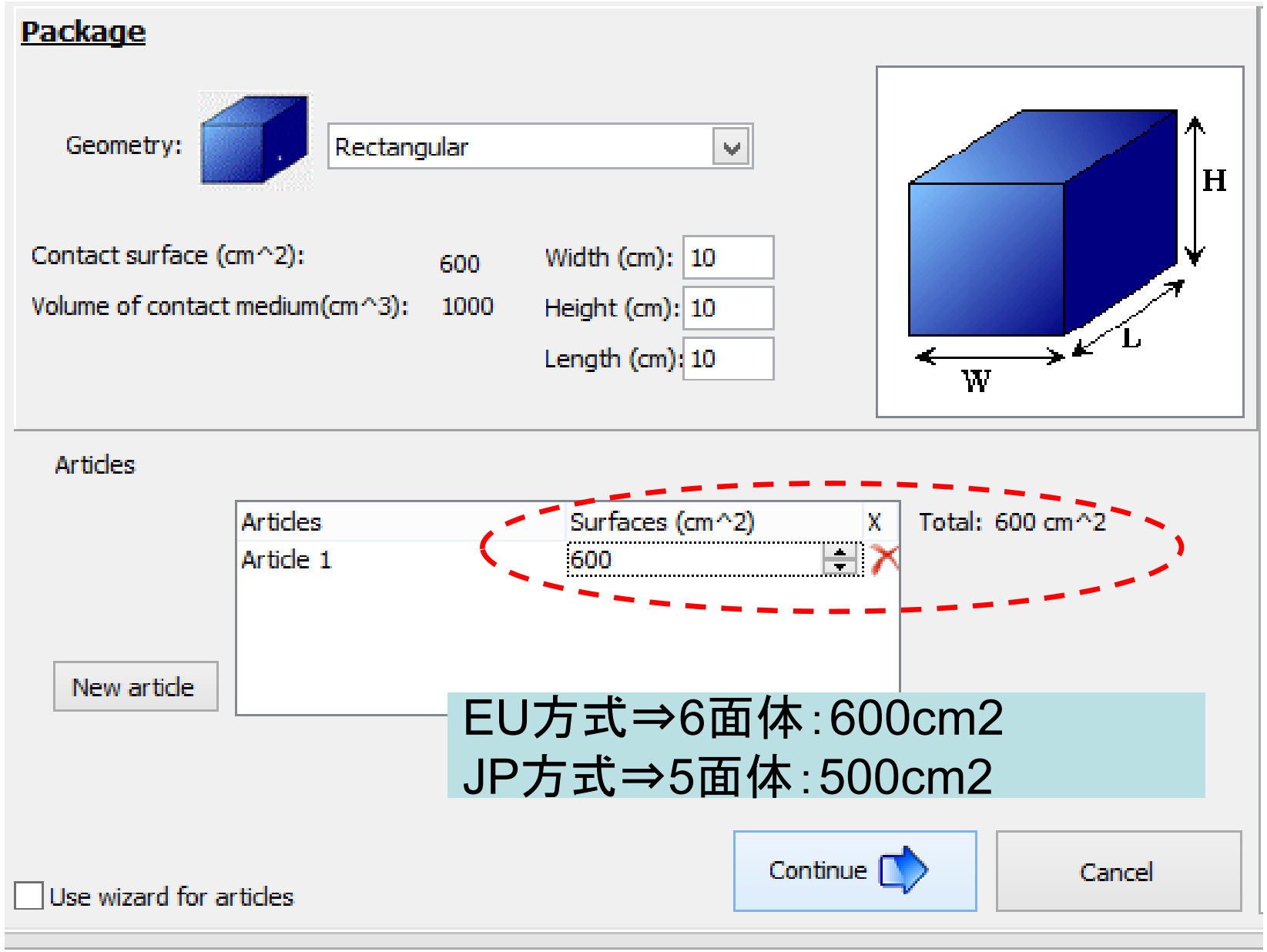


① Package（食品包装物）形状を設定
直方体 **W/L/H** 寸法 ＆ 表面積 cm^2

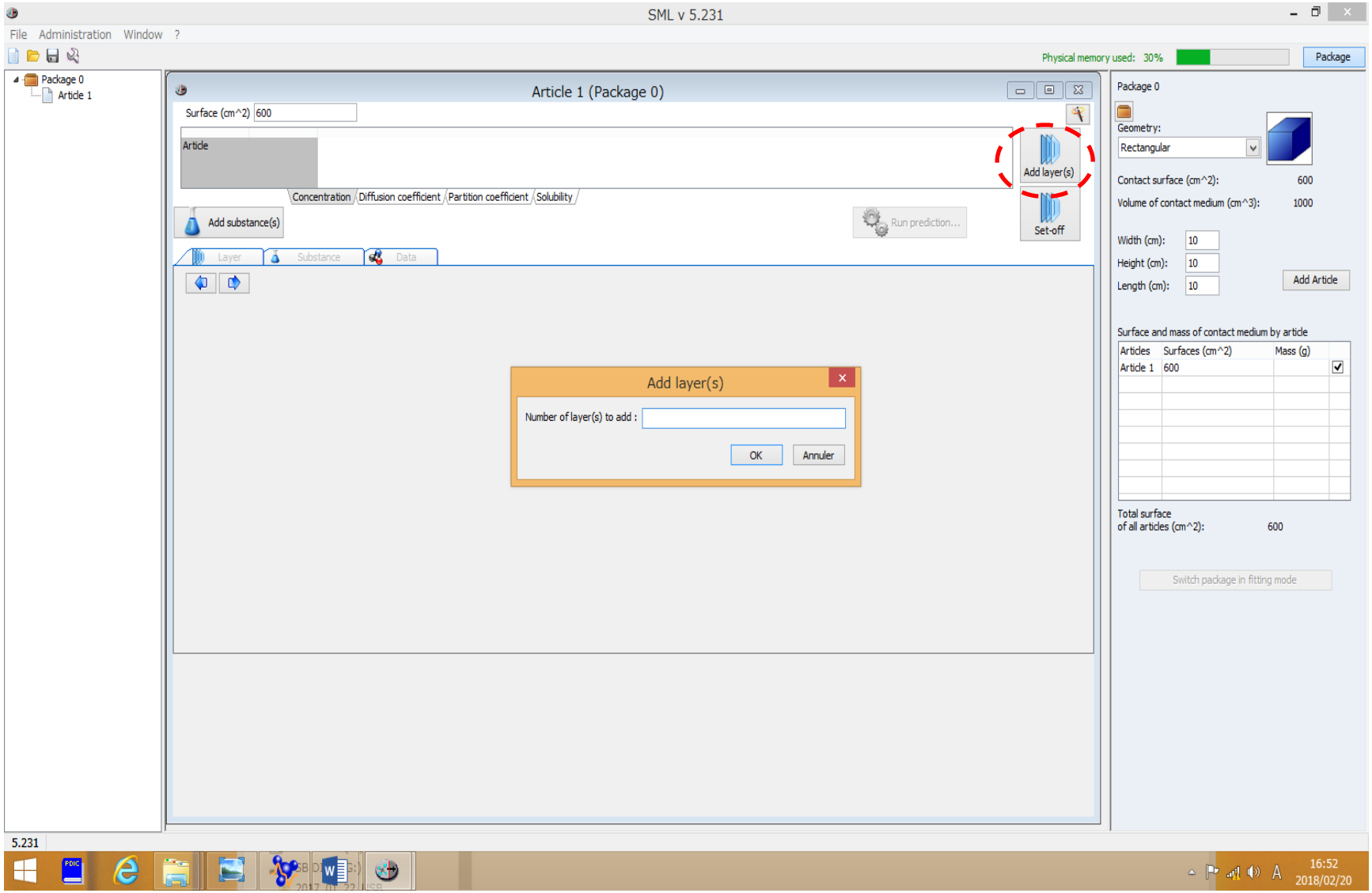


New Article　をクリックしてSurfaceを入力する。

① Package（食品包装物）形状を設定

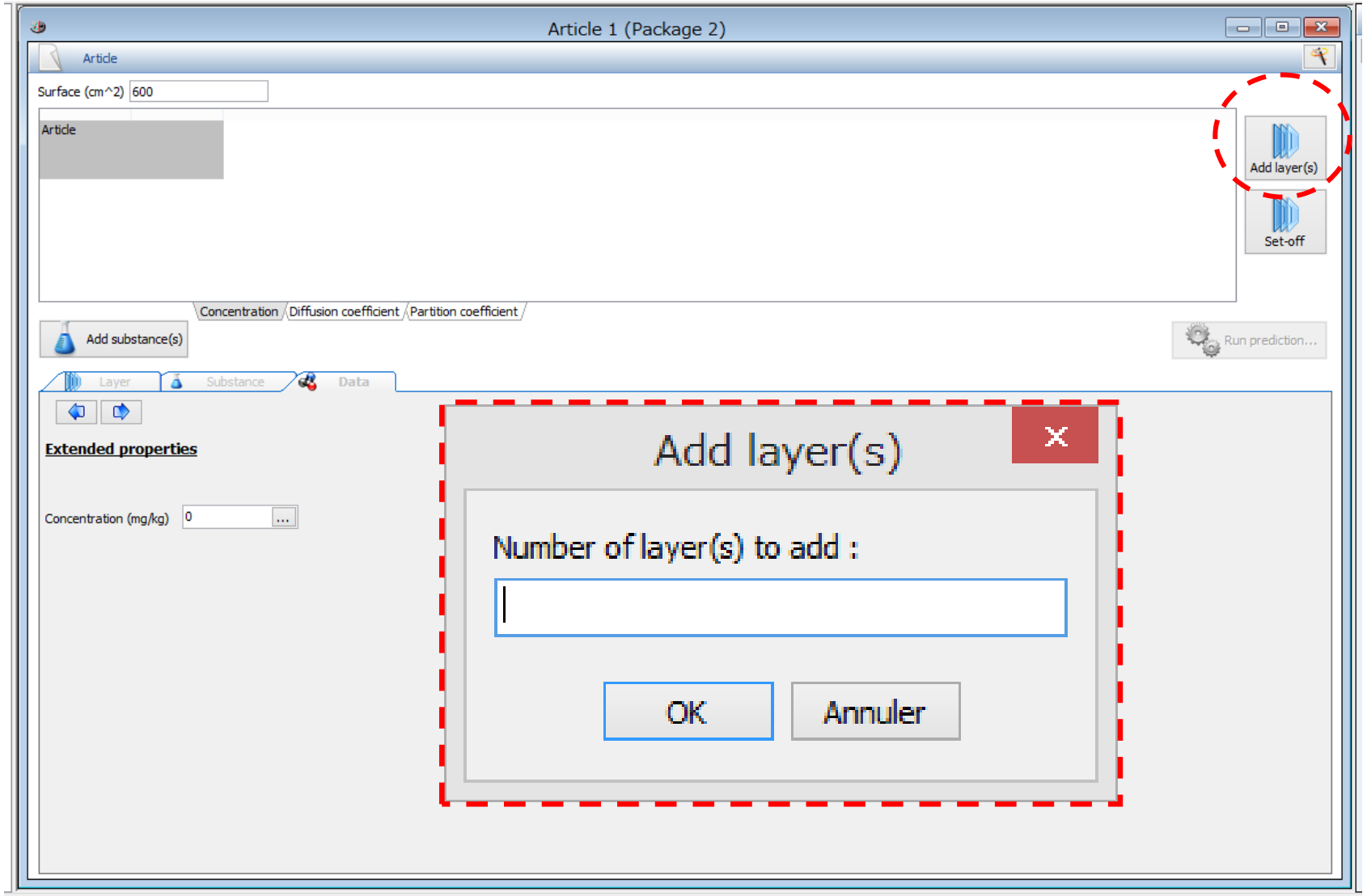


② ポリマー(Layer)数を定義　最大 n=10

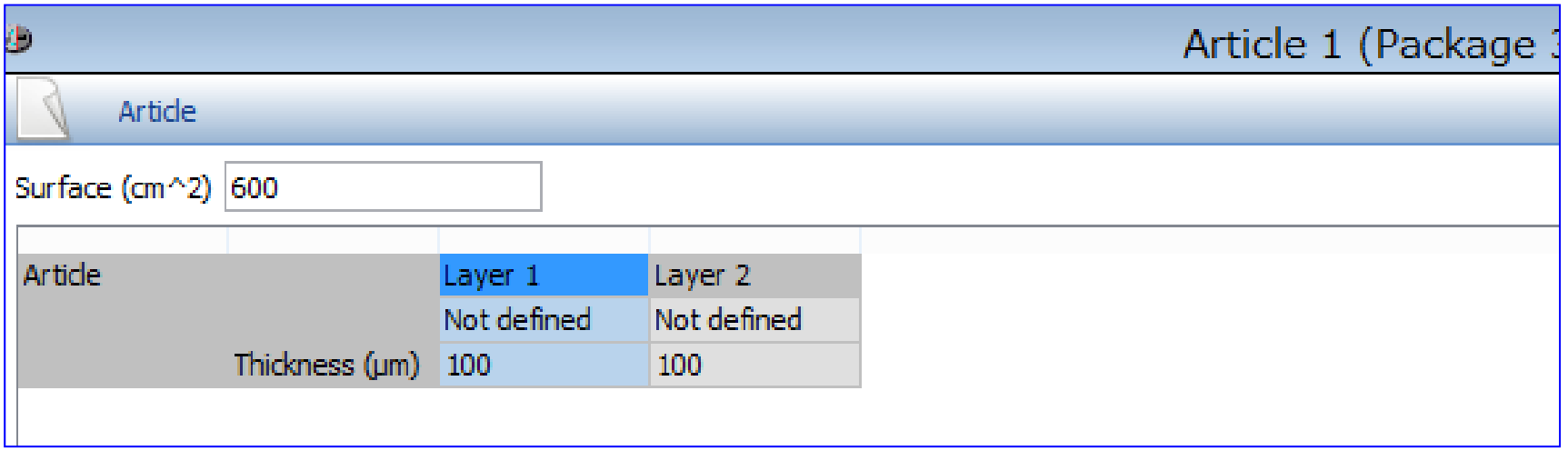


② ポリマー(Layer)数を定義　最小n=2　最大 n=10

Add layerのコマンドをクリックすると赤破線枠が表示されます。



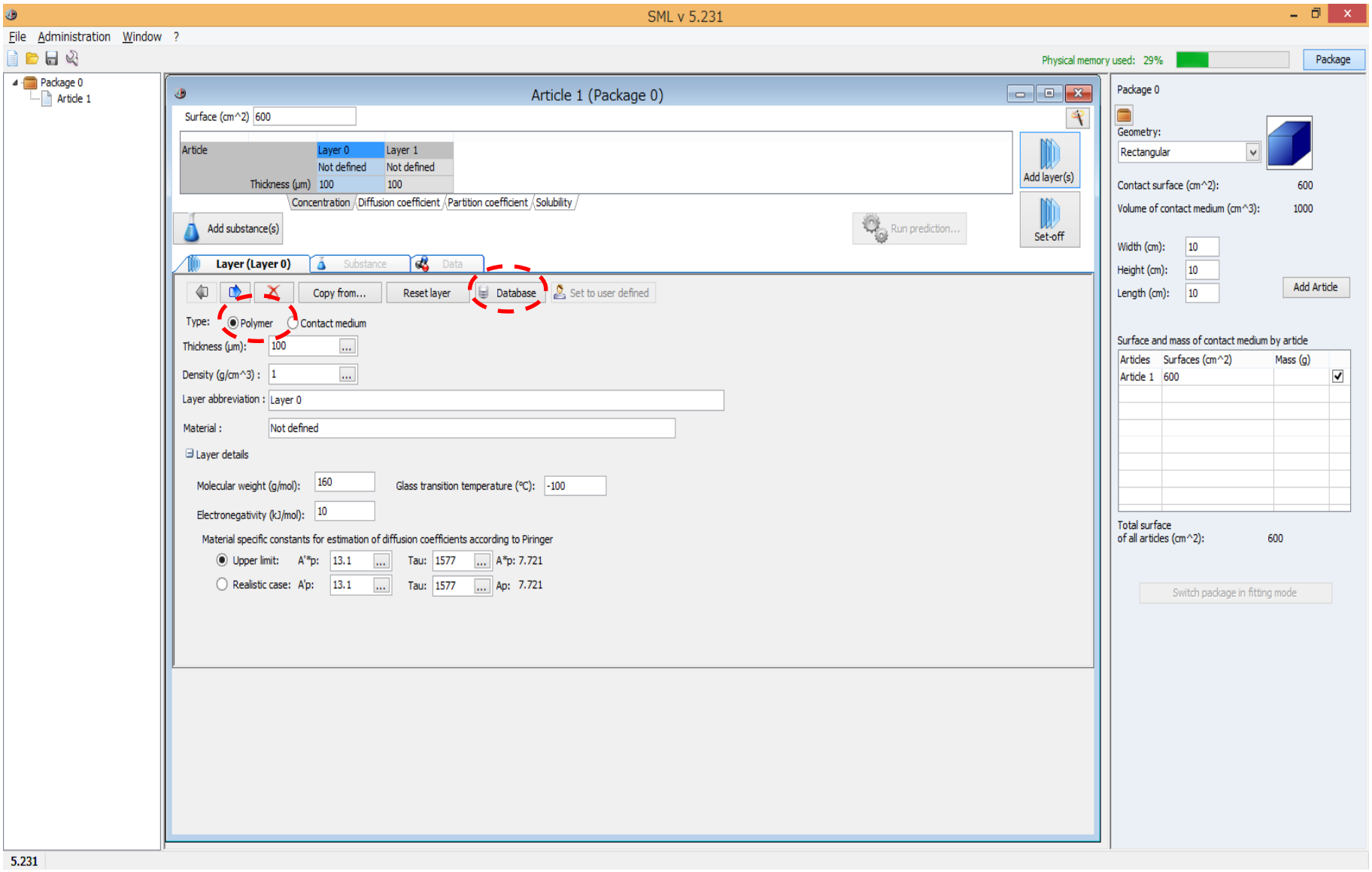
② ポリマー(Layer)数を定義　最大 n=10
Setoffの計算 n=∞

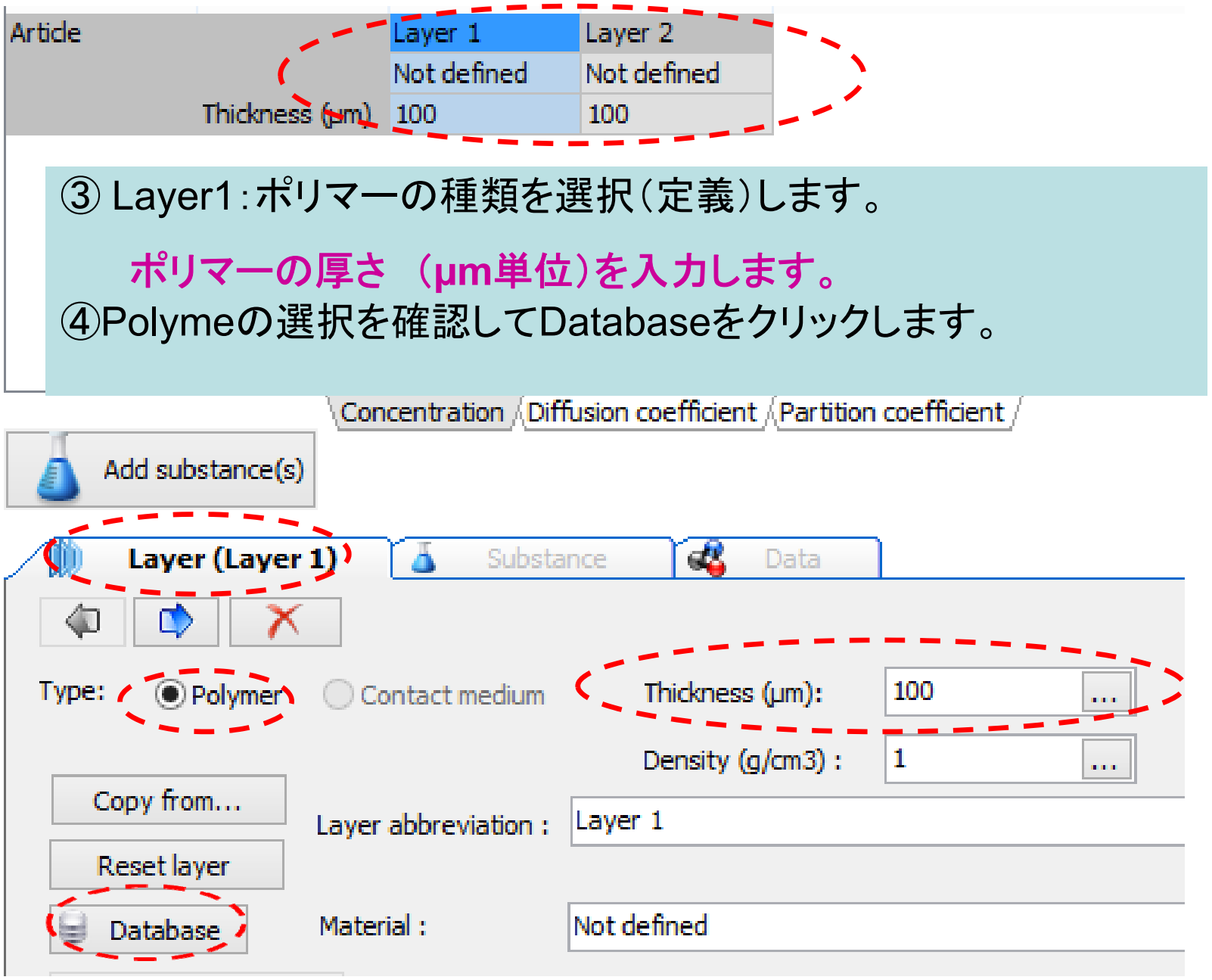


単層フィルムの場合

Layer1はポリマー
Layer2は食品溶媒

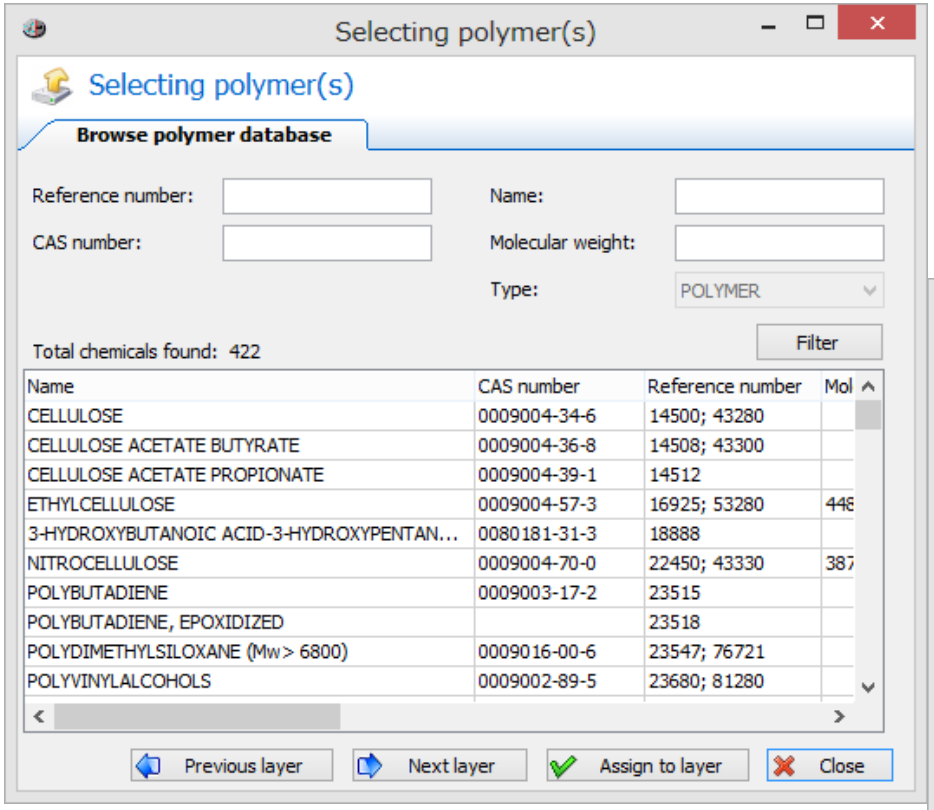
Version5.231ではLayer 0(ポリマー),
Layer1(食品溶媒)になっています。


SML v 5.231
File Administration Window ?
Physical memory used: 29%
Package
Package 0
Article 1
Article 1 (Package 0)
Surface (cm^2) 600
Article
Layer 0
Layer 1
Not defined
Not defined
Thickness (µm) 100 100
Concentration Diffusion coefficient Partition coefficient Solubility
Add substance(s)
Run prediction...
Add layer(s)
Set-off
Layer (Layer 0)
Substance
Data
Copy from...
Reset layer
Database
Set to user defined
Type: Polymer Contact medium
Thickness (µm): 100
Density (g/cm^3) : 1
Layer abbreviation : Layer 0
Material : Not defined
Layer details
Molecular weight (g/mol): 160
Glass transition temperature (°C): -100
Electronegativity (kJ/mol): 10
Material specific constants for estimation of diffusion coefficients according to Piringer
Upper limit: A'*p: 13.1 Tau: 1577 A*p: 7.721
Realistic case: A'p: 13.1 Tau: 1577 Ap: 7.721
Package 0
Geometry:
Rectangular
Contact surface (cm^2): 600
Volume of contact medium (cm^3): 1000
Width (cm): 10
Height (cm): 10
Length (cm): 10
Add Article
Surface and mass of contact medium by article
Articles Surfaces (cm^2) Mass (g)
Article 1 600
Total surface of all articles (cm^2): 600
Switch package in fitting mode
5.231

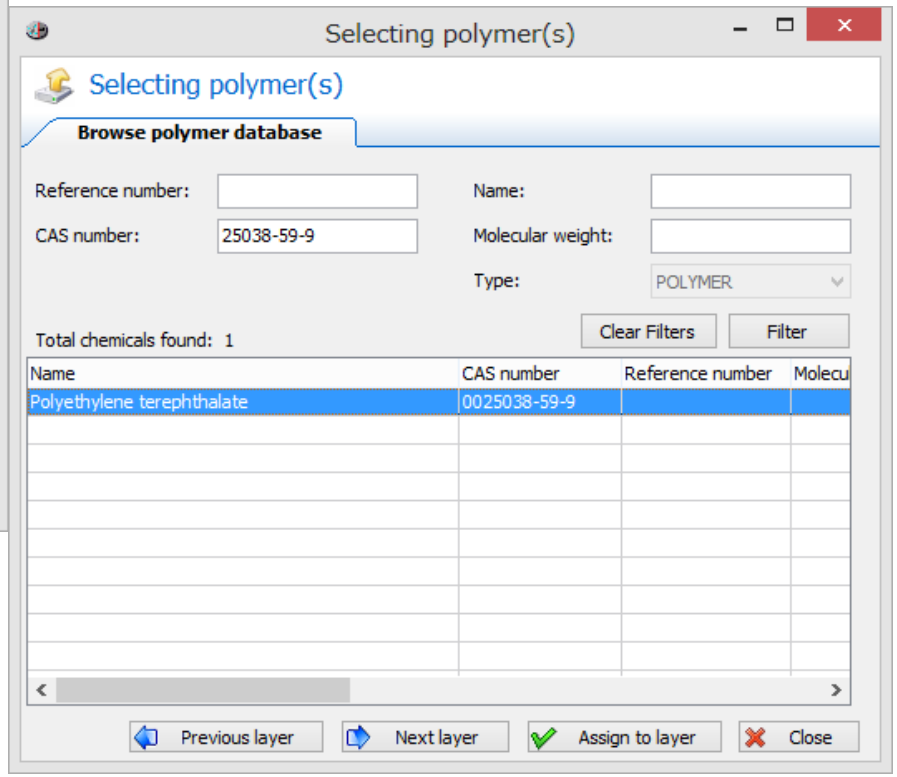

Article
Layer 1
Layer 2
Not defined
Not defined
Thickness (µm)
100
100
③ Layer1：ポリマーの種類を選択（定義）します。
ポリマーの厚さ （µm単位）を入力します。
④Polymeの選択を確認してDatabaseをクリックします。
Concentration
Diffusion coefficient
Partition coefficient
Add substance(s)
Layer (Layer 1)
Substance
Data
Type:
Polymer
Contact medium
Thickness (µm):
100
Density (g/cm3) :
1
Copy from...
Layer abbreviation :
Layer 1
Reset layer
Database
Material :
Not defined

④Database をクリックします。

polymer としてPET（Cas.No25038-59-9）を入力



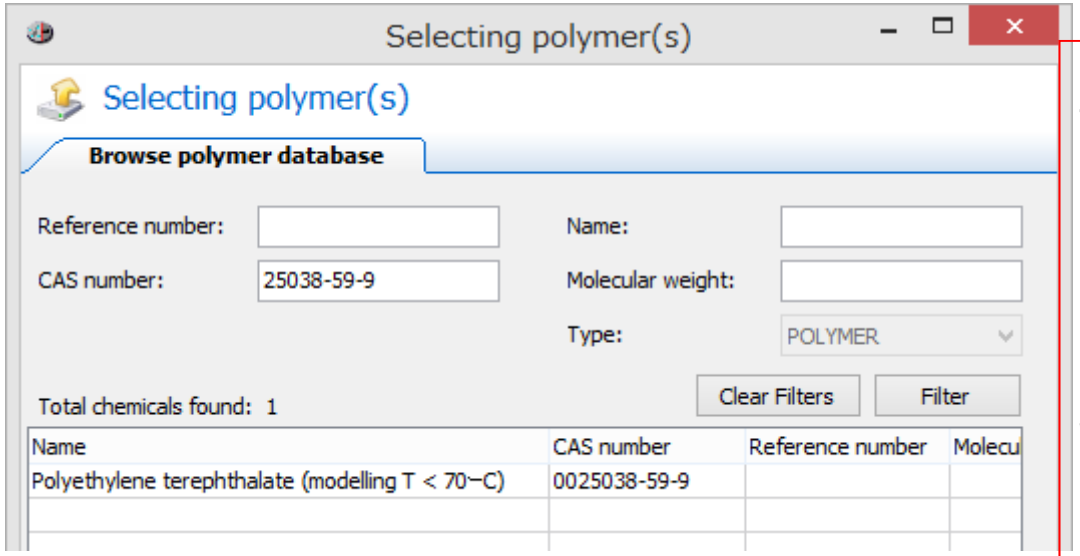
下図はVersion5.082の場合です。
Version5.231は次ページに示します。



④ Layer1：ポリマーの種類を選択（定義）します。

polymer としてPET（Cas.No25038-59-9）を入力すると

Polyethylene terephthalate (modelling T < 70−C)	0025038-59-9



PETについては溶出条件がTg温度の70℃前後で移行モデルの拡散係数の選択を行うことが必要です。

溶出条件が70℃以下の場合、databaseにあるPET　Tg＜70℃を選択します。

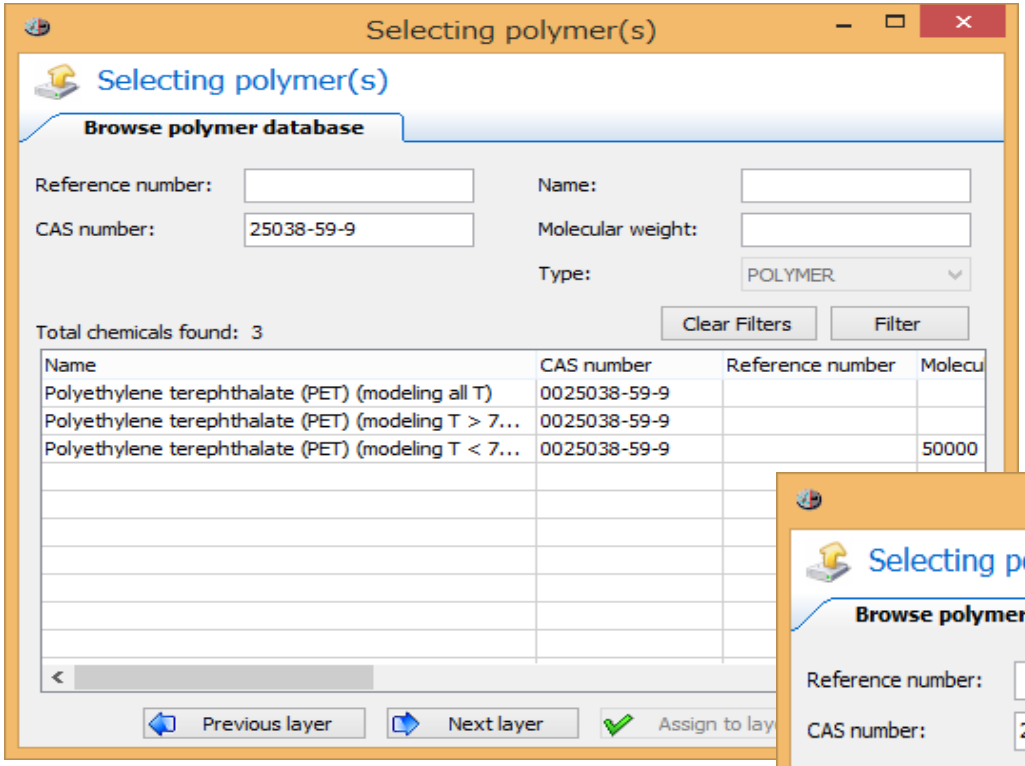
溶出条件が70℃以上の場合、Table6に示すようにAp-Valueは6.4となります。

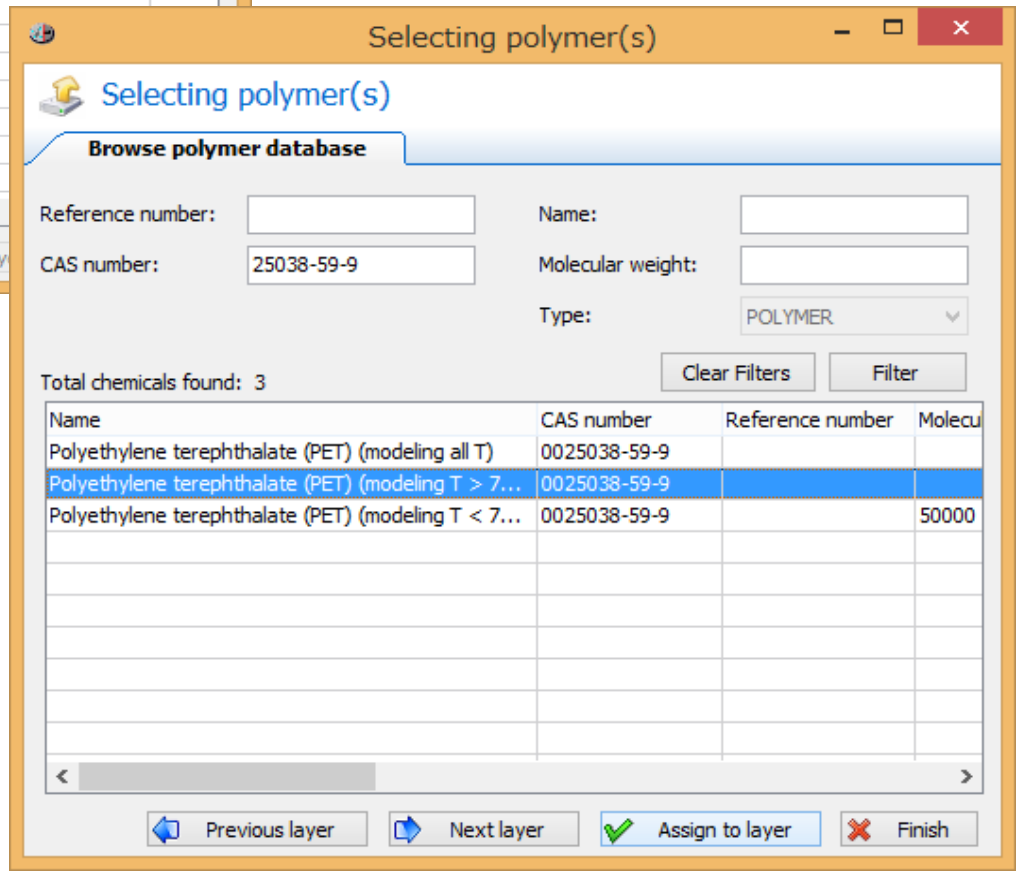
そのため、次ページに示すように
Set to user defineでAp-Valueを手動入力にて再登録します。

Polymer	A_p'*	τ
PET >Tg (70 °C)	6.4	1577
PET <Tg (70 °C)	3.1	1577
PEN	5.0	1577

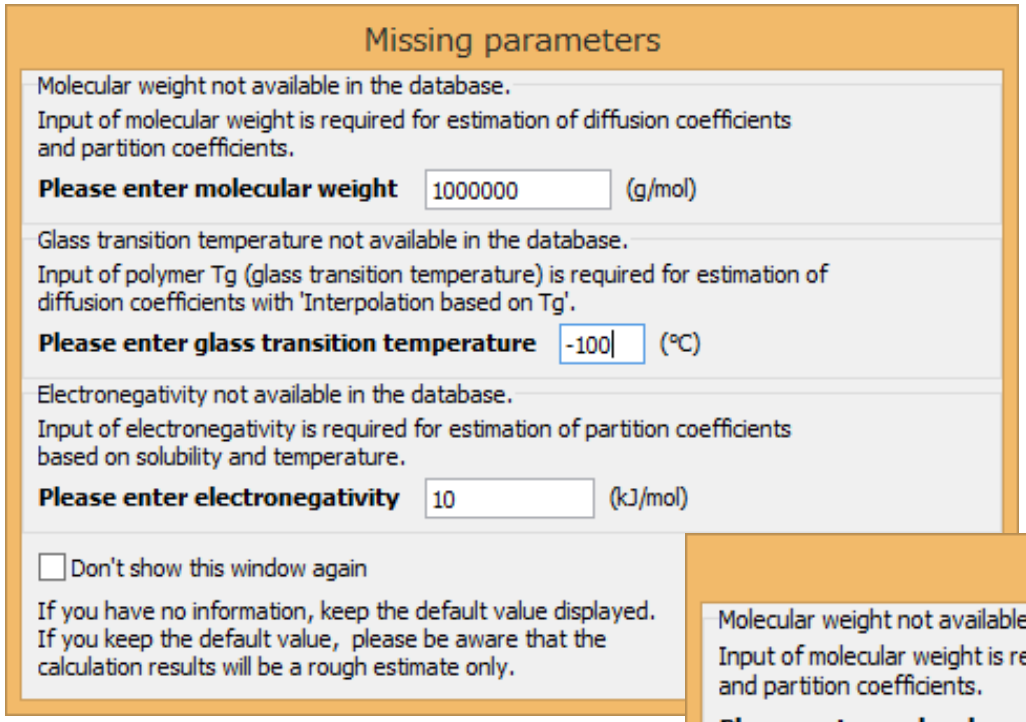
Table 6: Parameters for PET and PEN

PETの場合、注意！



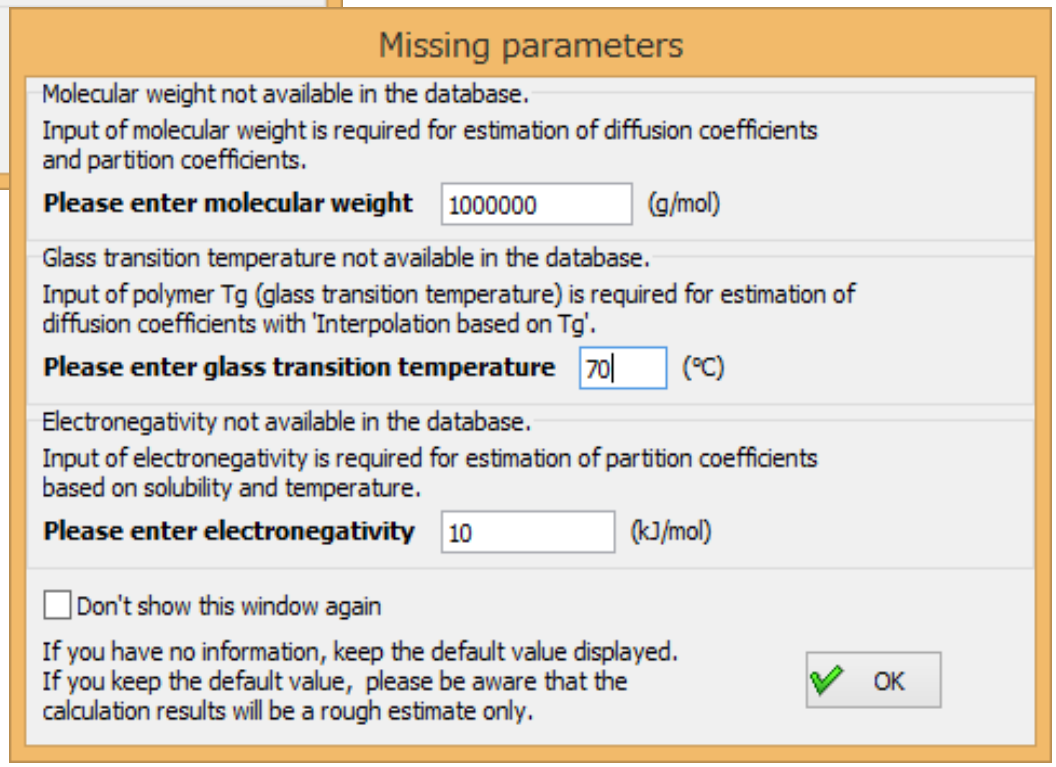


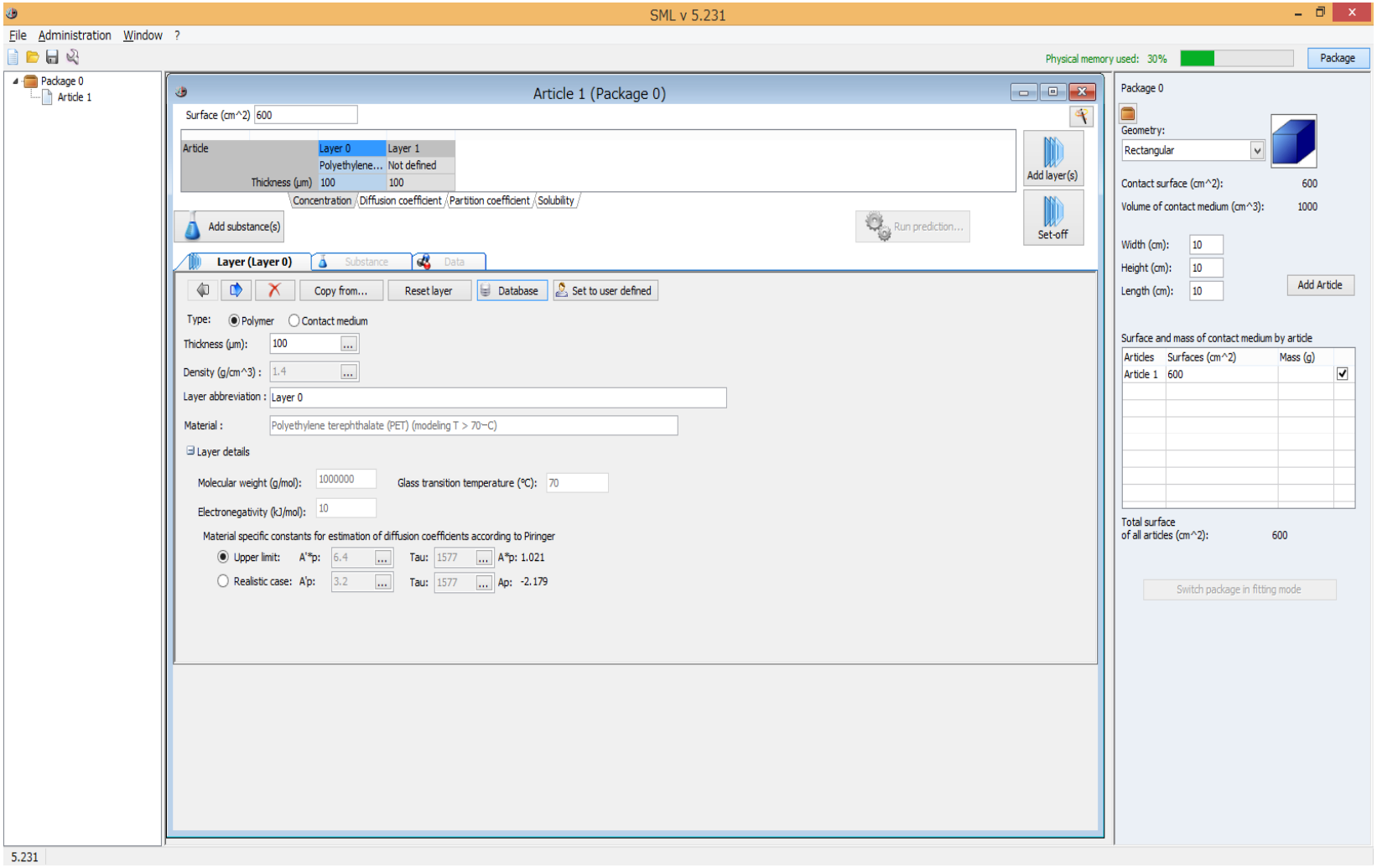
Version.5.231の画面



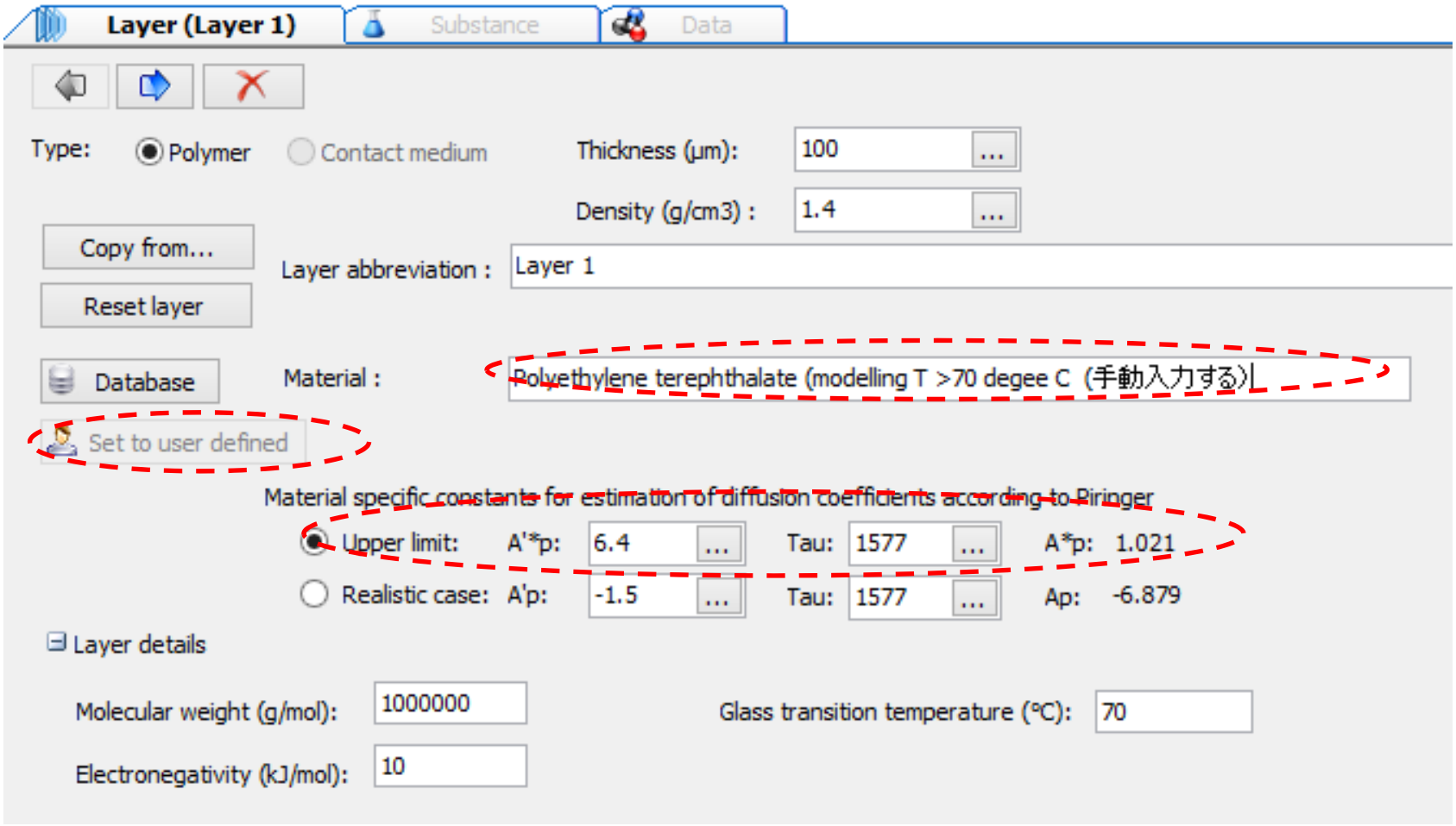
PETの場合、Tg点温度を入力すること

数値を入力して
かつ
確認ボタンをクリックすることが必要

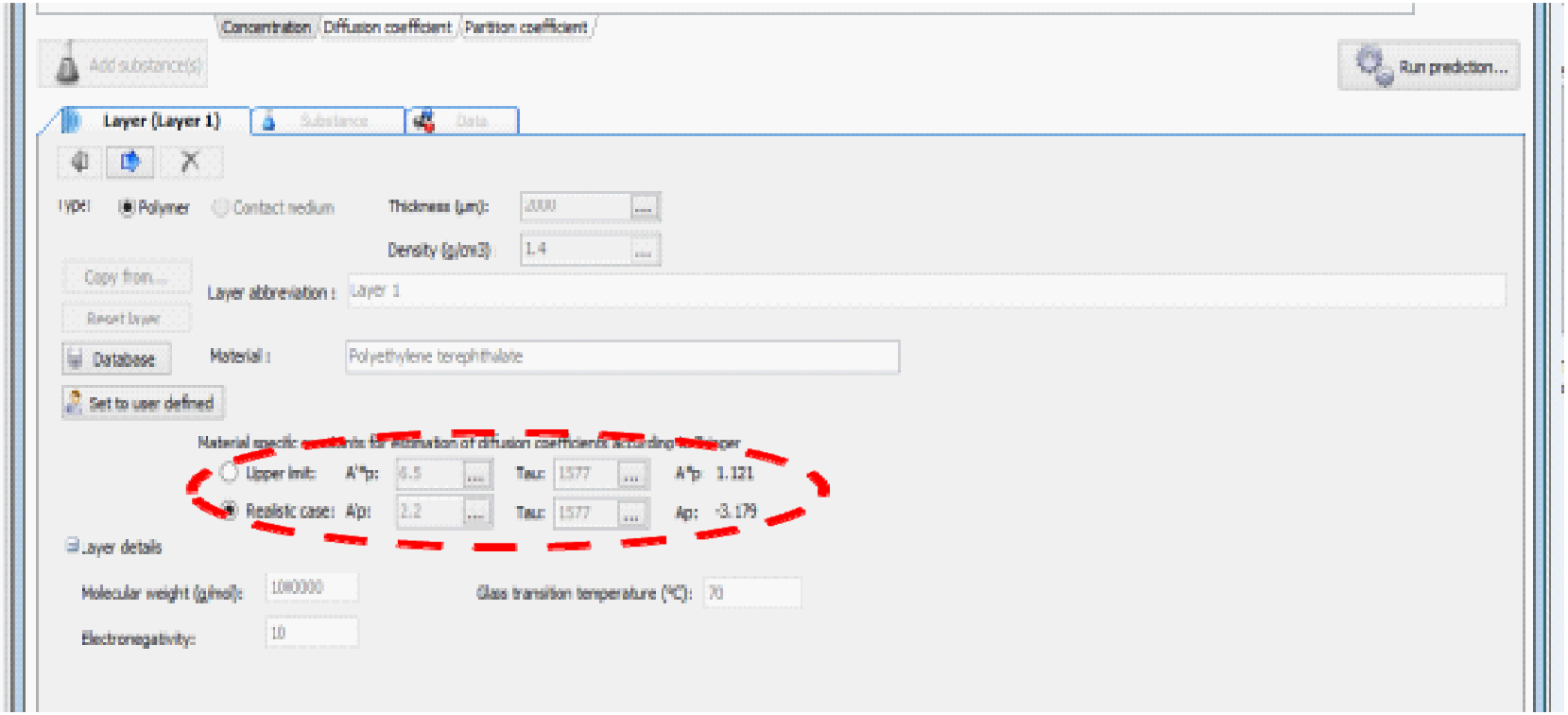



SML v 5.231
File Administration Window ?
Physical memory used: 30%
Package
Package 0
Article 1
Article 1 (Package 0)
Surface (cm^2) 600
Article
Layer 0
Layer 1
Polyethylene...
Not defined
Thickness (µm)
100
100
Concentration
Diffusion coefficient
Partition coefficient
Solubility
Add substance(s)
Run prediction...
Add layer(s)
Set-off
Layer (Layer 0)
Substance
Data
Copy from...
Reset layer
Database
Set to user defined
Type: Polymer Contact medium
Thickness (µm): 100
Density (g/cm^3) : 1.4
Layer abbreviation : Layer 0
Material : Polyethylene terephthalate (PET) (modeling T > 70~C)
Layer details
Molecular weight (g/mol): 1000000
Glass transition temperature (°C): 70
Electronegativity (kJ/mol): 10
Material specific constants for estimation of diffusion coefficients according to Piringer
Upper limit: A'*p: 6.4 Tau: 1577 A*p: 1.021
Realistic case: A'p: 3.2 Tau: 1577 Ap: -2.179
Package 0
Geometry:
Rectangular
Contact surface (cm^2): 600
Volume of contact medium (cm^3): 1000
Width (cm): 10
Height (cm): 10
Length (cm): 10
Add Article
Surface and mass of contact medium by article
Articles
Surfaces (cm^2)
Mass (g)
Article 1
600
Total surface
of all articles (cm^2): 600
Switch package in fitting mode
5.231

Version_5.09の場合　Version5.231では改善されています。
いったんはTgが70℃以下のPETを選択してからSet to user definedをクリックしてupper limitのAp-Valueを3.1から6.4に手動入力する。Materialの欄も書き換えておくこと。 不要



より現実的な溶解曲線を求めるときは
拡散定数（Ap-Value）はrealisticを選択

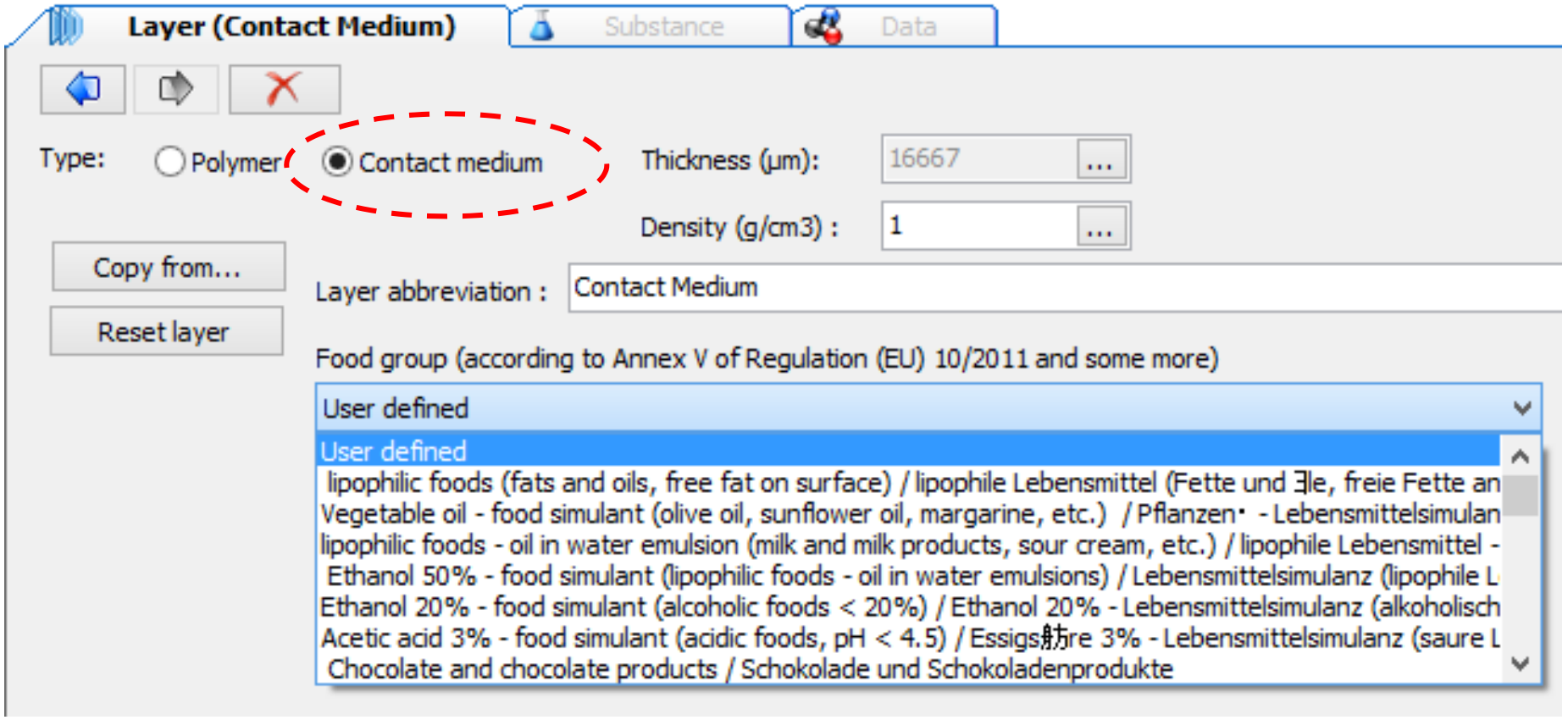


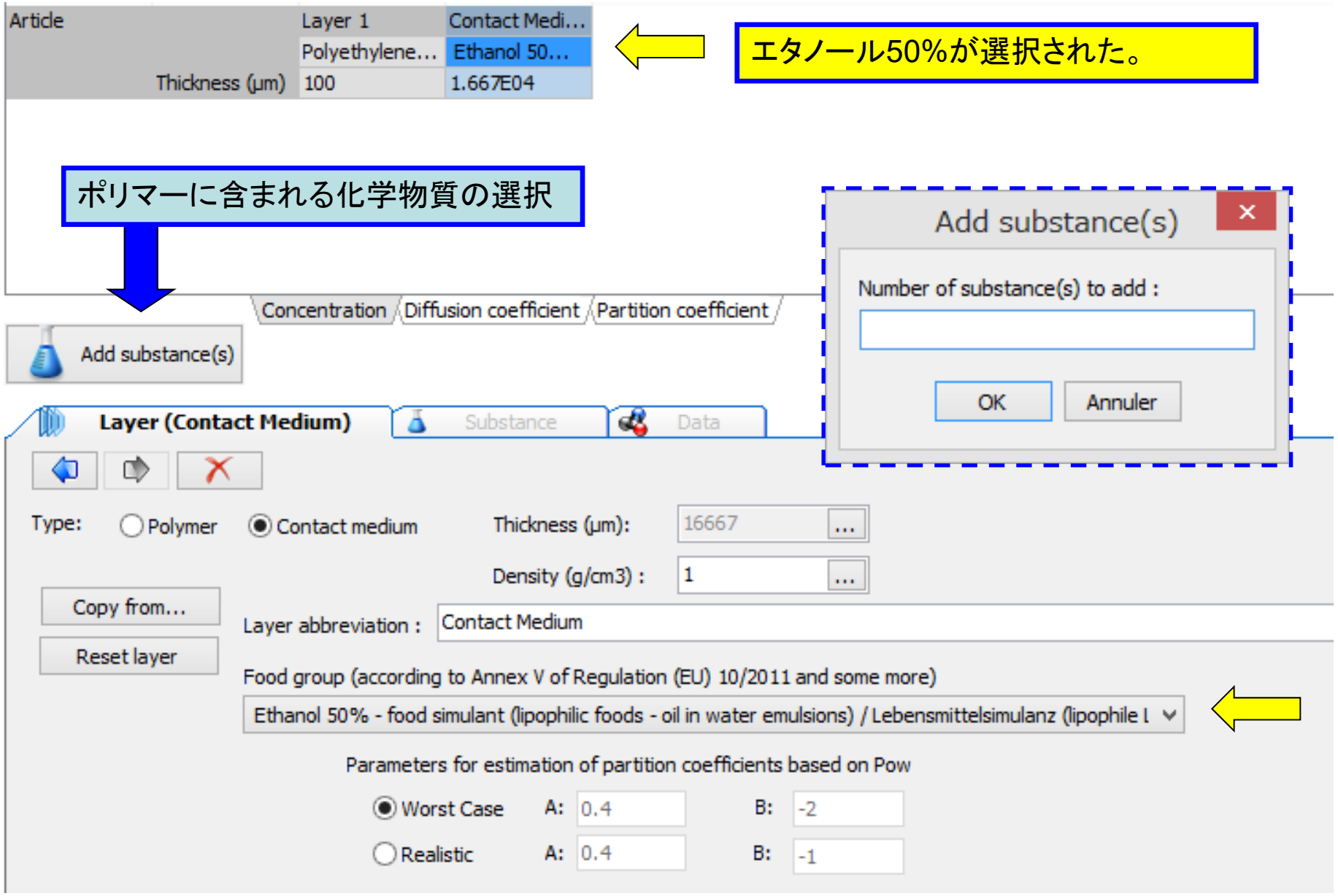
Upper と　Realisticでは濃度が1桁違うことがあります。

PETの70℃以上の温度におけるRealistic値は別途手動入力すること

④Contact Medium(食品疑似物）リストは
Annex Ⅴ of Regulation(EU)10/2011 and some more

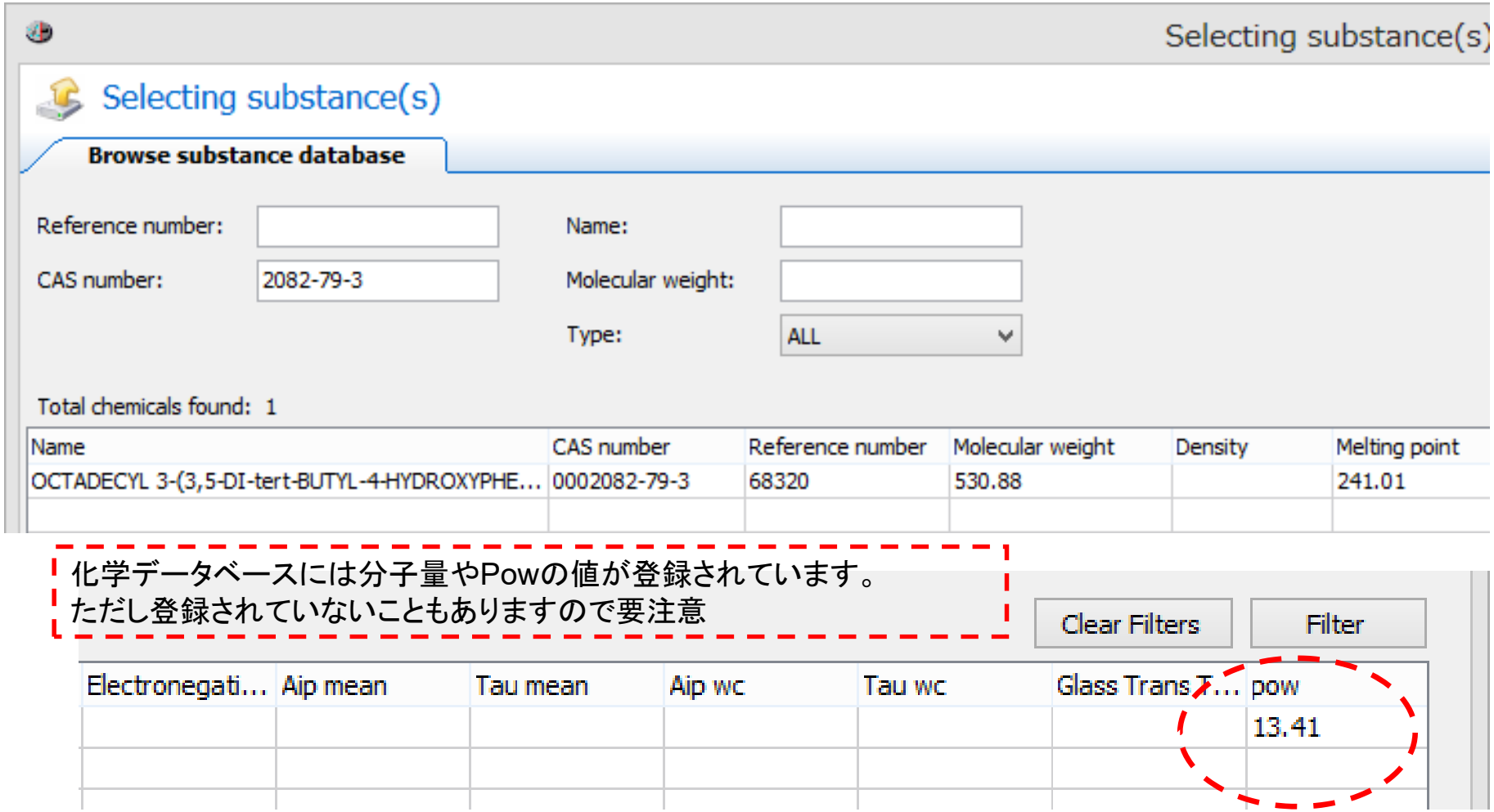
注：日本で使用される食品疑似物が追加されています。



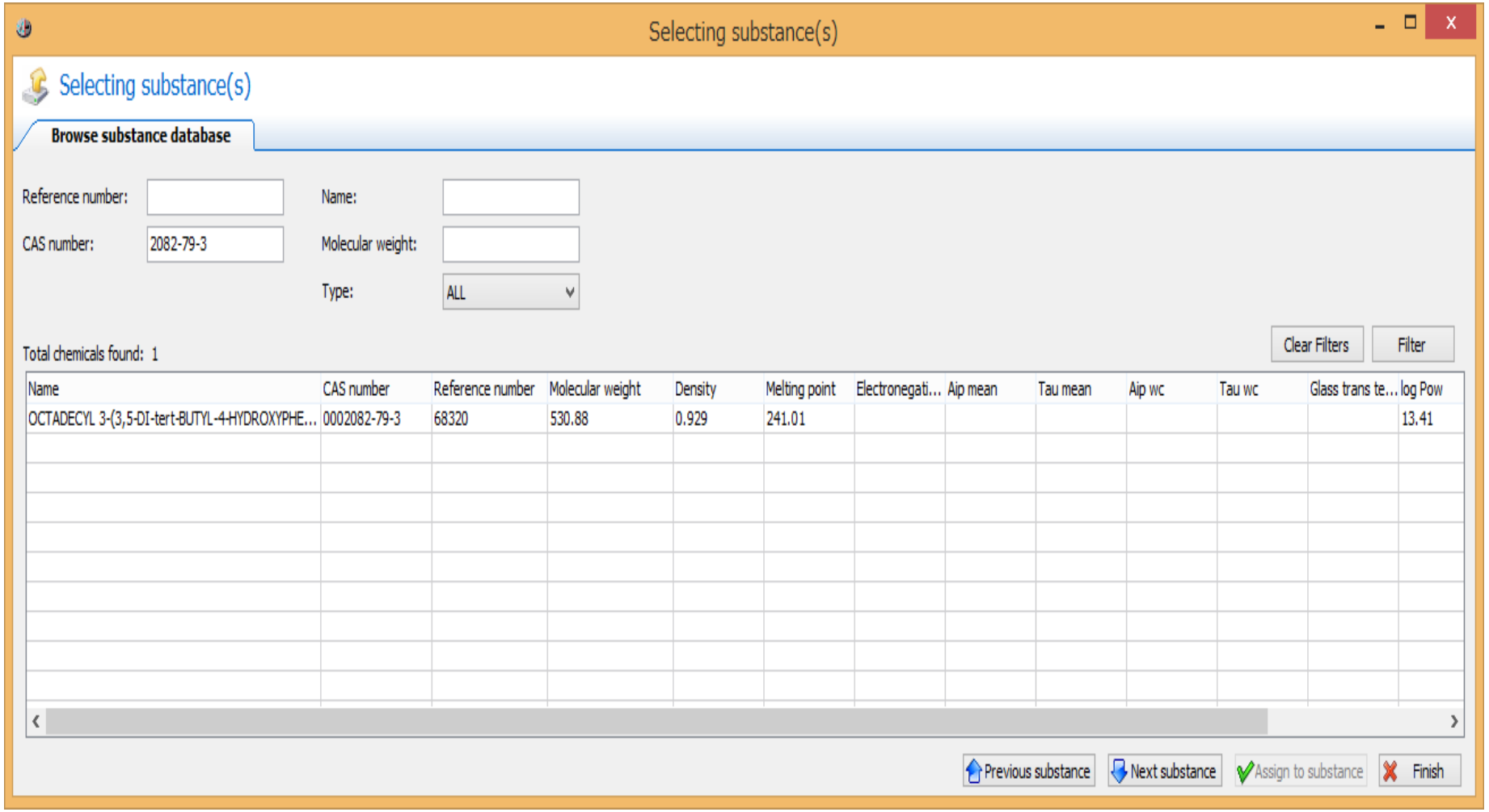

Article
Layer 1
Contact Medi...
Polyethylene...
Ethanol 50...
Thickness (µm)
100
1.667E04
エタノール50%が選択された。
ポリマーに含まれる化学物質の選択
Add substance(s)
Number of substance(s) to add :
OK
Annuler
Concentration
Diffusion coefficient
Partition coefficient
Add substance(s)
Layer (Contact Medium)
Substance
Data
Type:
Polymer
Contact medium
Thickness (µm):
16667
Density (g/cm3) :
1
Copy from...
Reset layer
Layer abbreviation :
Contact Medium
Food group (according to Annex V of Regulation (EU) 10/2011 and some more)
Ethanol 50% - food simulant (lipophilic foods - oil in water emulsions) / Lebensmittelsimulanz (lipophile l
Parameters for estimation of partition coefficients based on Pow
Worst Case
A:
0.4
B:
-2
Realistic
A:
0.4
B:
-1

⑤ 移行物質（Substance）の選択

添加剤A　　CAS NO.0002082-79-3

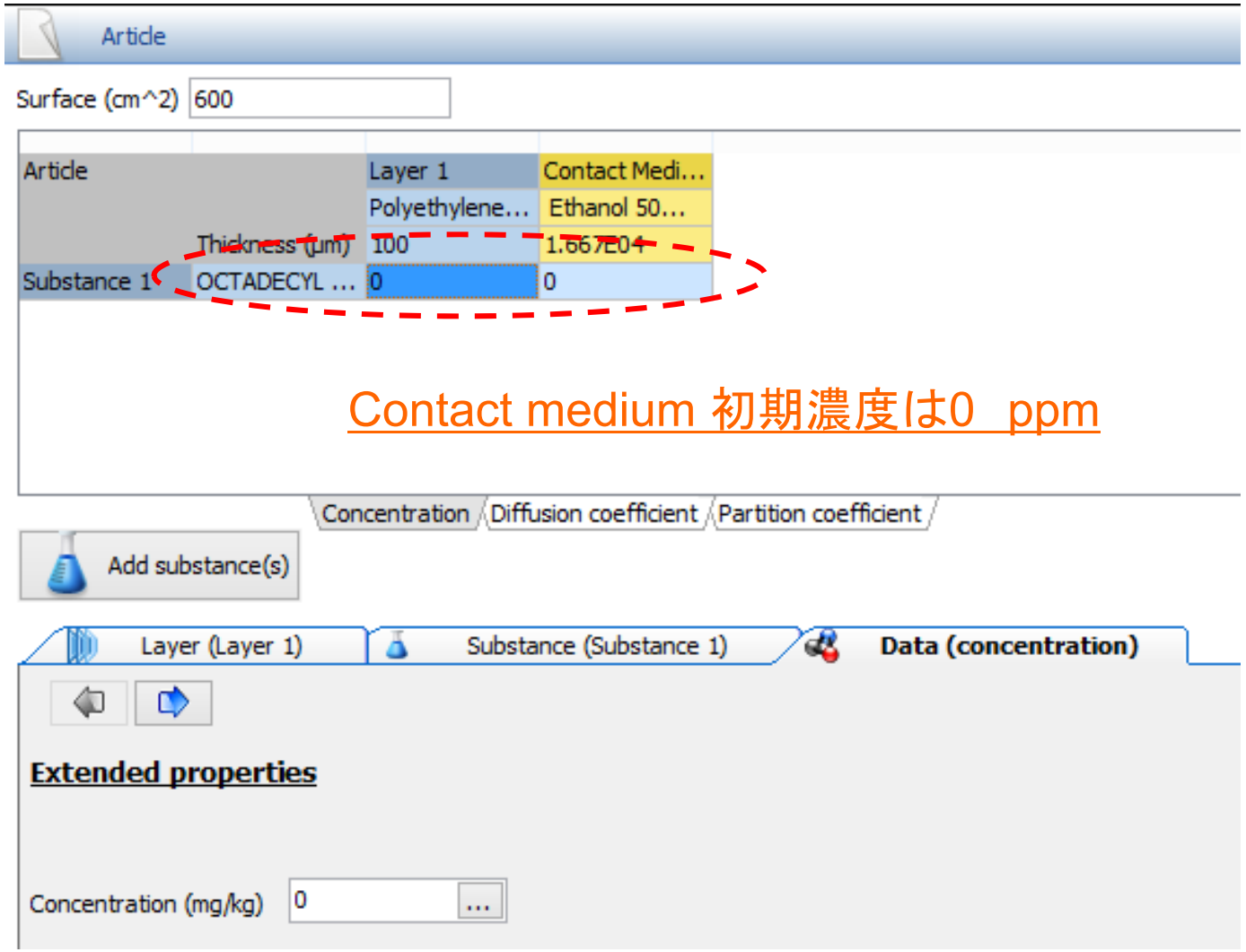


化学物質を定義する＝分子量とLog_Powを選んでいることになる。

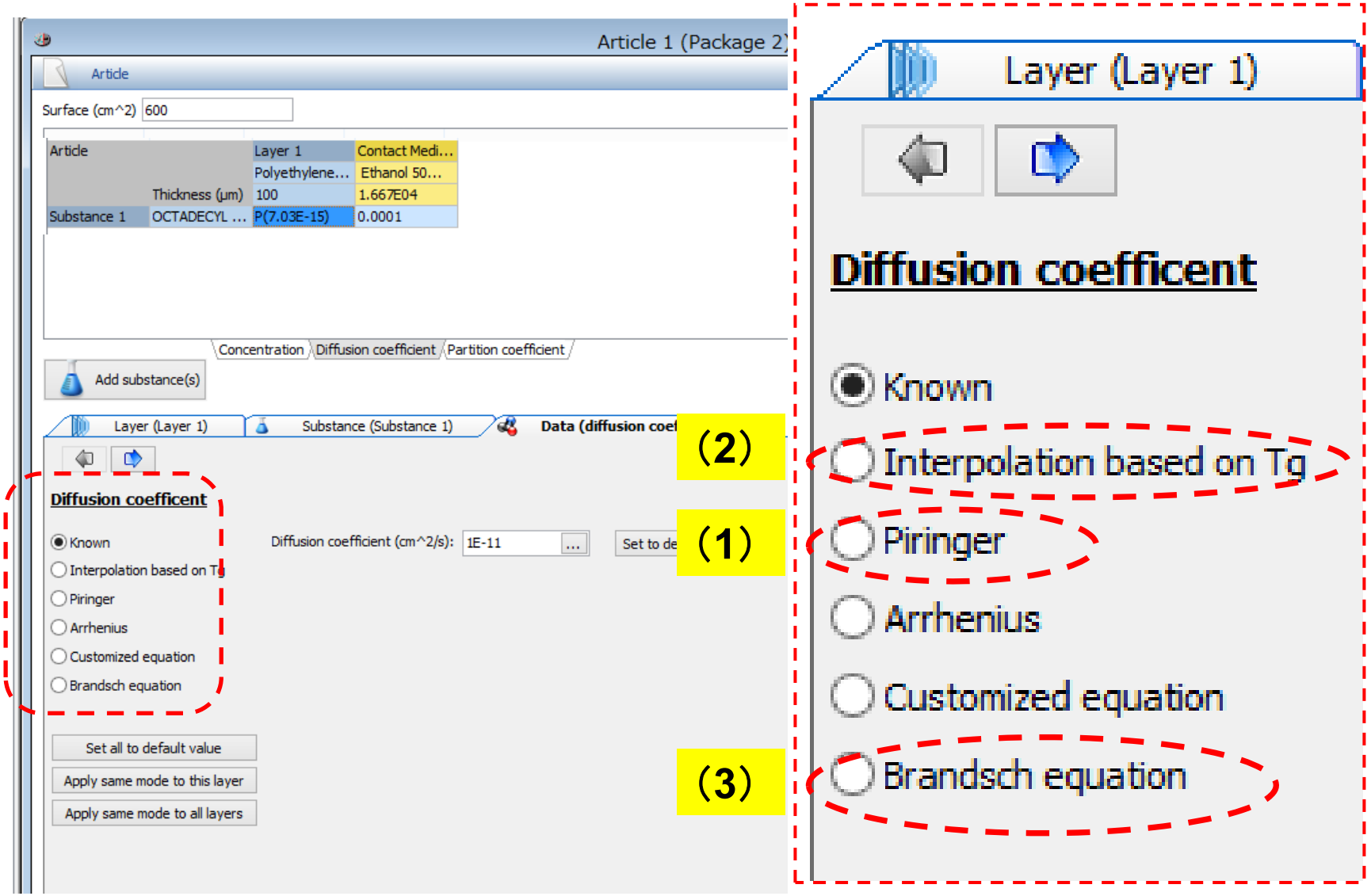


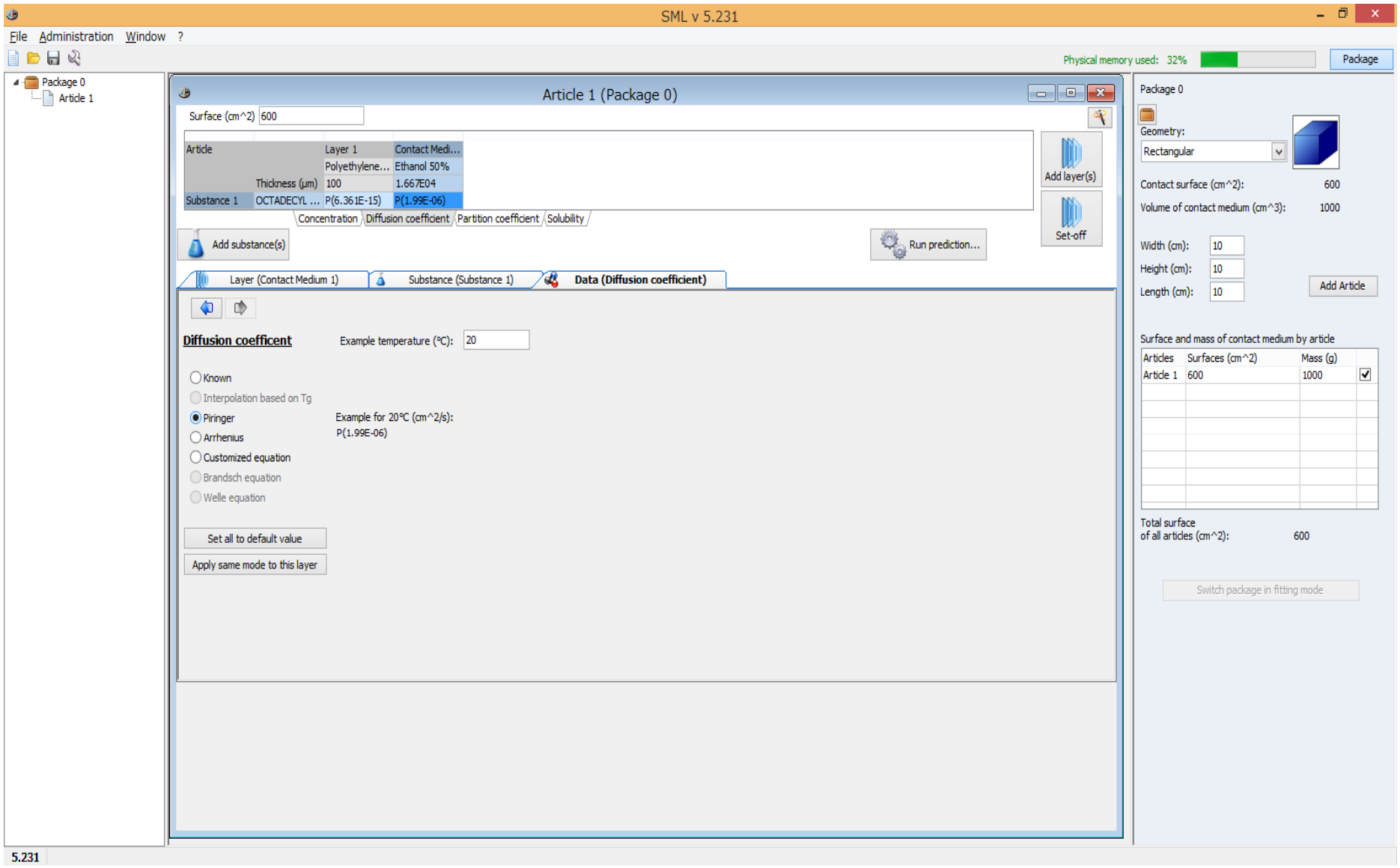
⑤ 移行物質（Substance）を定義

Substanceの濃度（ppm） 添加剤Aの濃度を記入（5000ppm）



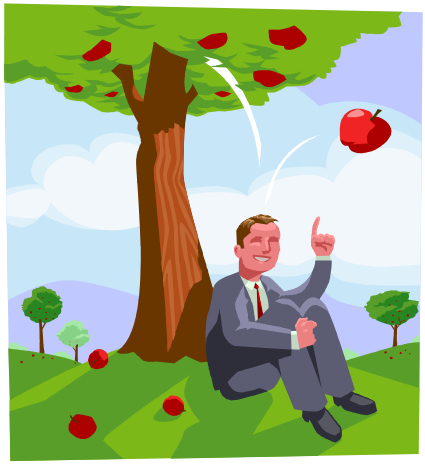
⑥ 拡散定数の設定（主な選択枝）Piringer,Tg, Bransdsch




SML v 5.231
File Administration Window ?
Physical memory used: 32%
Package
Package 0
Article 1
Article 1 (Package 0)
Surface (cm^2) 600
Article
Layer 1
Contact Medi...
Polyethylene...
Ethanol 50%
Thickness (µm)
100
1.667E04
Substance 1
OCTADECYL ...
P(6.361E-15)
P(1.99E-06)
Concentration
Diffusion coefficient
Partition coefficient
Solubility
Add layer(s)
Set-off
Add substance(s)
Run prediction...
Layer (Contact Medium 1)
Substance (Substance 1)
Data (Diffusion coefficient)
Diffusion coefficent
Example temperature (°C): 20
Known
Interpolation based on Tg
Piringer
Arrhenius
Customized equation
Brandsch equation
Welle equation
Example for 20°C (cm^2/s):
P(1.99E-06)
Set all to default value
Apply same mode to this layer
Package 0
Geometry:
Rectangular
Contact surface (cm^2): 600
Volume of contact medium (cm^3): 1000
Width (cm): 10
Height (cm): 10
Length (cm): 10
Add Article
Surface and mass of contact medium by article
Articles
Surfaces (cm^2)
Mass (g)
Article 1
600
1000
Total surface
of all articles (cm^2): 600
Switch package in fitting mode
5.231

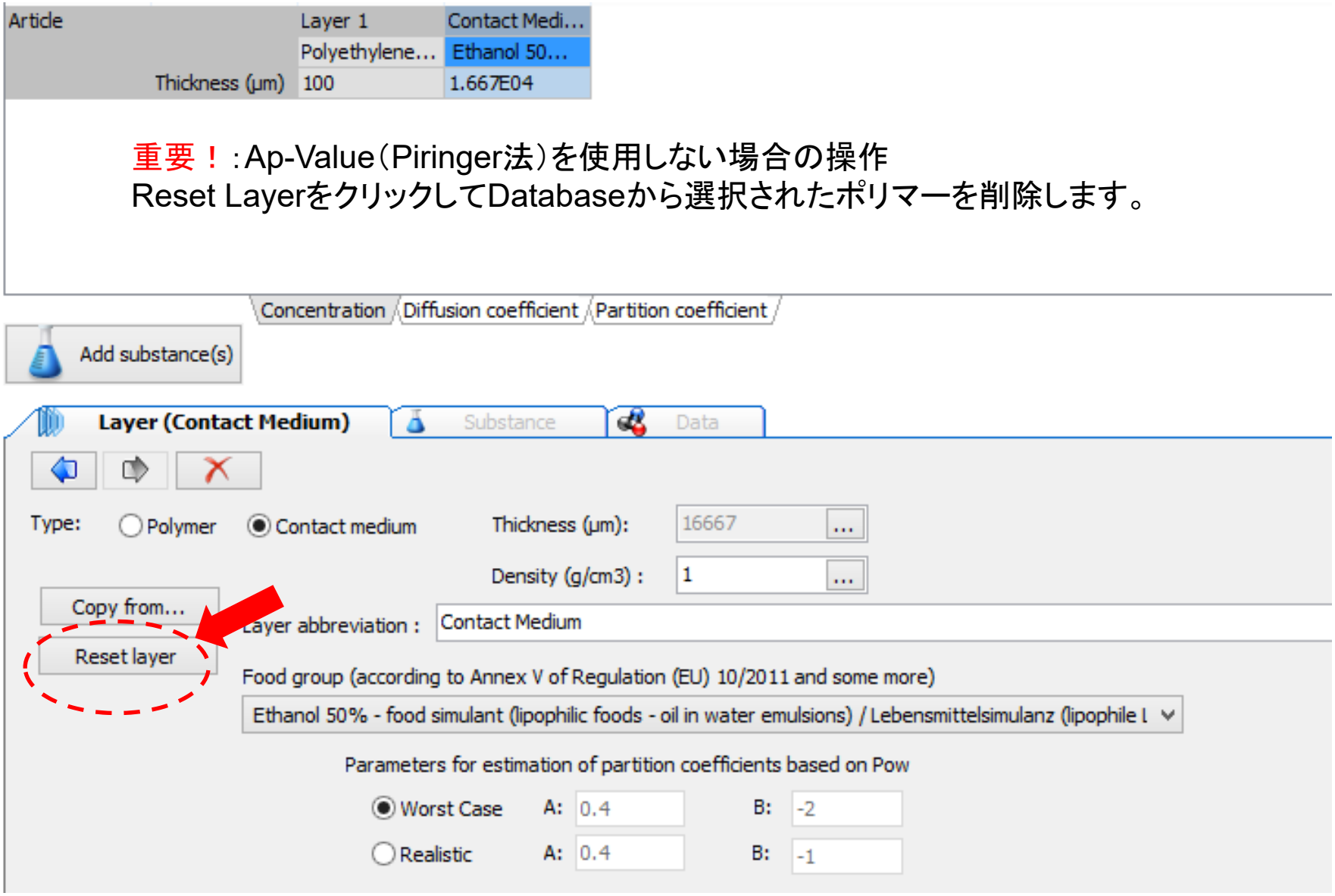
塩化ビニリデン樹脂の場合などでは
Ap-Valueがなく、Piringer法が選択できません。

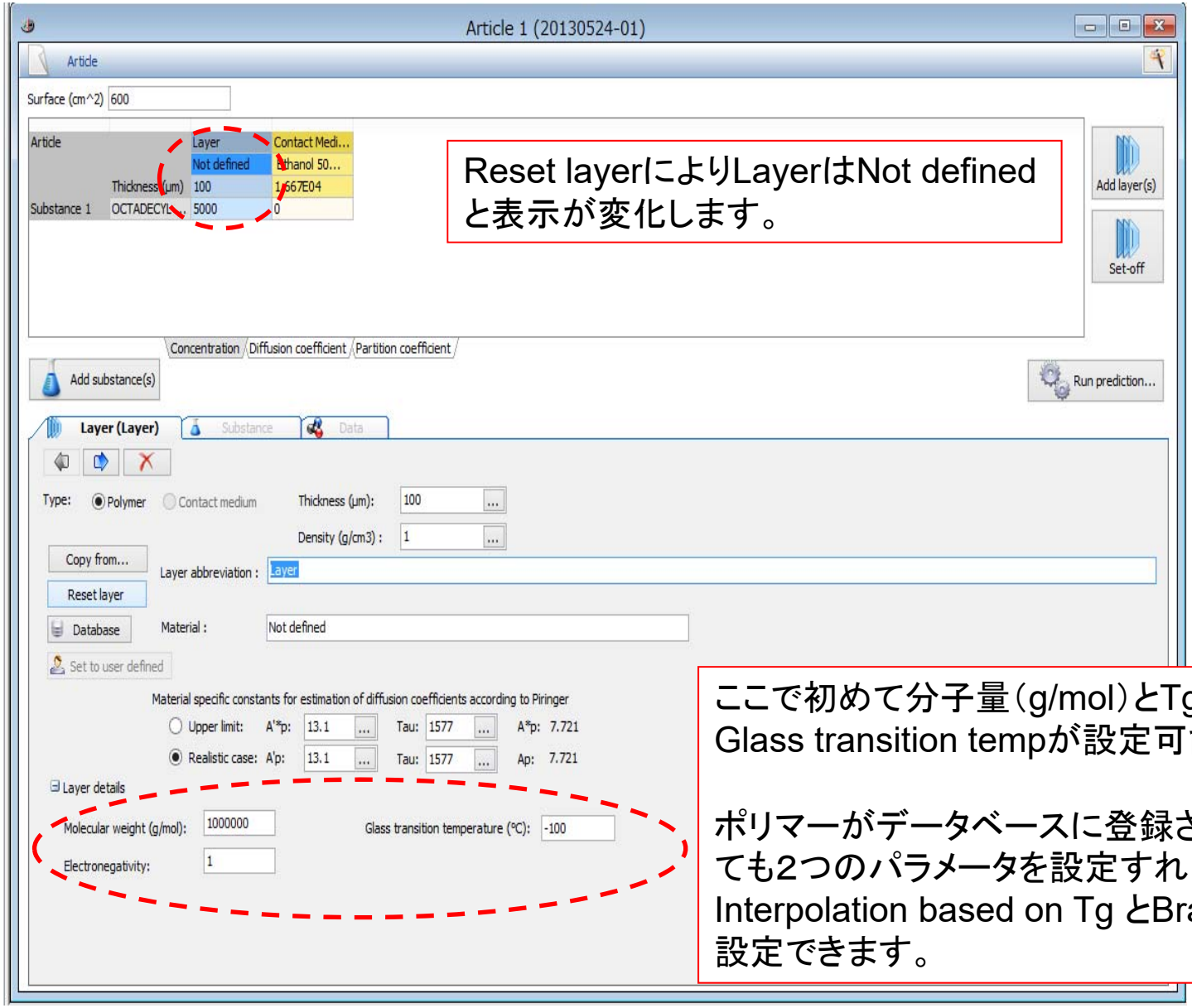
SML5では代わって



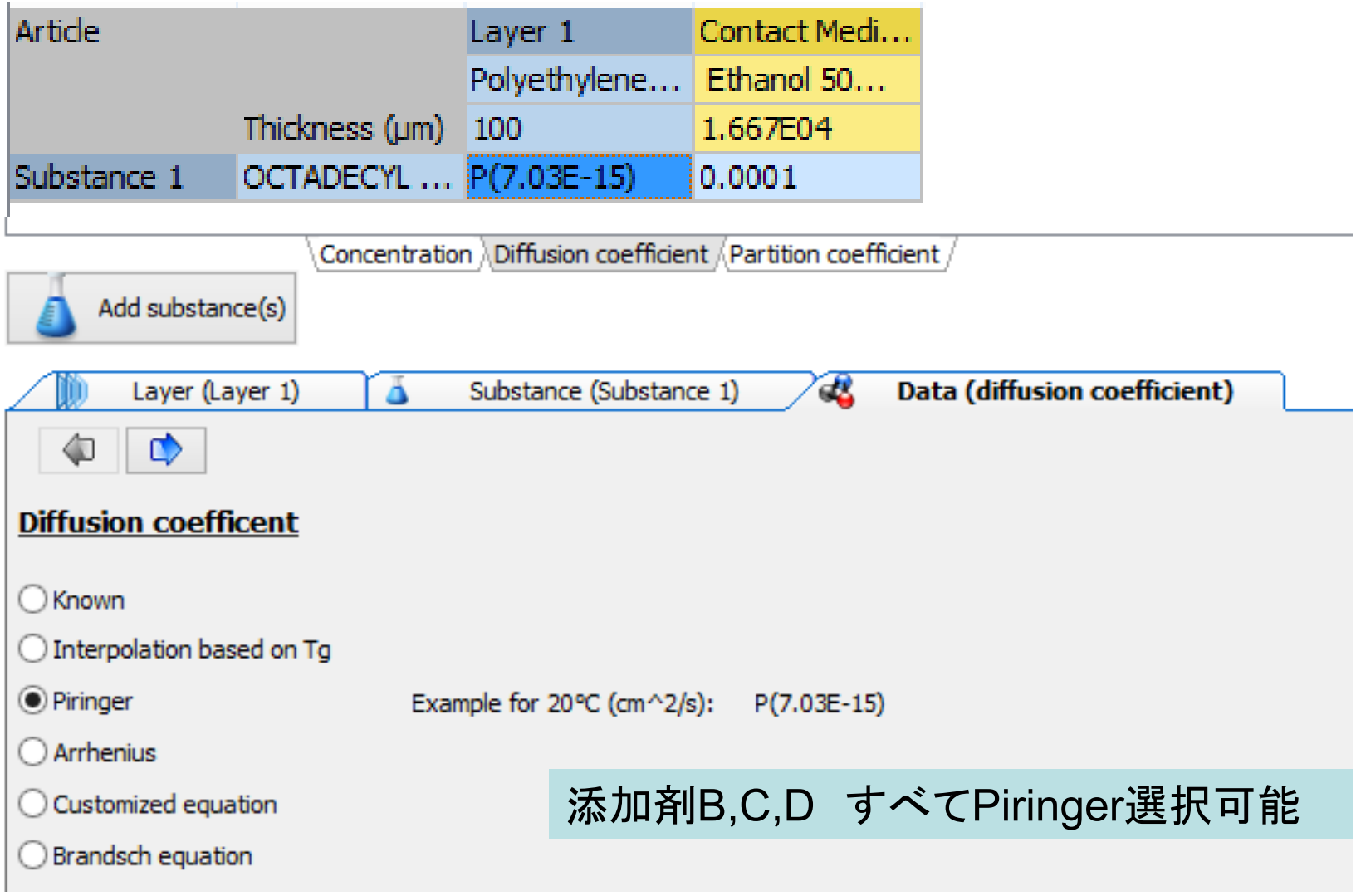
２）ポリマーのTg温度によりAp-Valueを推定

３）ポリマーのTg温度と分子量によりAP-Valueを推定


Article
Layer 1
Contact Medi...
Polyethylene...
Ethanol 50...
Thickness (µm)
100
1.667E04
重要！：Ap-Value（Piringer法）を使用しない場合の操作
Reset LayerをクリックしてDatabaseから選択されたポリマーを削除します。
Concentration
Diffusion coefficient
Partition coefficient
Add substance(s)
Layer (Contact Medium)
Substance
Data
Type:
Polymer
Contact medium
Thickness (µm):
16667
Density (g/cm3) :
1
Copy from...
Reset layer
Layer abbreviation :
Contact Medium
Food group (according to Annex V of Regulation (EU) 10/2011 and some more)
Ethanol 50% - food simulant (lipophilic foods - oil in water emulsions) / Lebensmittelsimulanz (lipophile l
Parameters for estimation of partition coefficients based on Pow
Worst Case
A:
0.4
B:
-2
Realistic
A:
0.4
B:
-1


Article 1 (20130524-01)
Article
Surface (cm^2) 600
Article
Layer
Contact Medi...
Not defined
Ethanol 50...
Thickness (µm) 100
1.667E04
Substance 1
OCTADECYL...
5000
0
Reset layerによりLayerはNot defined と表示が変化します。
Add layer(s)
Set-off
Concentration
Diffusion coefficient
Partition coefficient
Add substance(s)
Run prediction...
Layer (Layer)
Substance
Data
Type: Polymer Contact medium
Thickness (µm): 100
Density (g/cm3) : 1
Copy from...
Layer abbreviation : Layer
Reset layer
Database
Material : Not defined
Set to user defined
Material specific constants for estimation of diffusion coefficients according to Piringer
Upper limit: A'*p: 13.1 Tau: 1577 A*p: 7.721
Realistic case: A'p: 13.1 Tau: 1577 Ap: 7.721
Layer details
Molecular weight (g/mol): 1000000
Glass transition temperature (°C): -100
Electronegativity: 1
ここで初めて分子量（g/mol）とTg温度 Glass transition tempが設定可能となります。
ポリマーがデータベースに登録されていなくても2つのパラメータを設定すれば Interpolation based on Tg とBrandsch法が設定できます。

ポリマー中の移行物質の拡散定数は　優先1：Piringer式　p(7.03E-15)を選択



補足説明

Article		Layer 1	Contact Medi...
		Polyethylene...	Ethanol 50...
	Thickness (µm)	100	1.667E04
Substance 1	OCTADECYL ...	P(7.03E-15)	0.0001

- Thickness(µm) 1.667E04とは
  食品溶媒1000mL（cm^3）が600cm^2 に接触したときの
  平均厚み

  1000/600＝1.66cm＝1.66E04mm

⑦ 分配係数の設定　　Solibility, Pow ,Kp=1,

Article		Layer	Contact Medi...
		Polyethylene...	Ethanol 50...
	Thickness (µm)	100	1.667E04
Substance 1	OCTADECYL ...	0	1

Concentration | Diffusion coefficient | Partition coefficient

Add substance(s)

Layer (Contact Medium) | Substance (Substance 1) | **Data (partition coefficient)**

Partition coefficient (Kp)

添加剤A　　CAS NO.0002082-79-3

- (●) Known　1 [...]
- ( ) Solubility
- ( ) Pow

Clear Filters | Filter

Glass Trans T...	pow
	13.41

通常はPowを選択します。

⑦ 分配係数の設定　Solibility, **Pow**

Article		Layer	Contact Medi...
		Polyethylene...	Ethanol 50...
	Thickness (µm)	100	1.667E04
Substance 1	OCTADECYL ...		P(28.9)

P(28.9)

Concentration | Diffusion coefficient | Partition coefficient

Add substance(s)

Layer (Contact Medium) | Substance (Substance 1) | Data (partition coefficient)

Partition coefficient (Kp)

- ○ Known
- ○ Solubility
- ◉ Pow

Kpf = exp(B + A * log(Pow))

A [food]:	0.4
B [food]:	-2
Log(Pow) [chemical]:	13.41
Kpf:	28.9

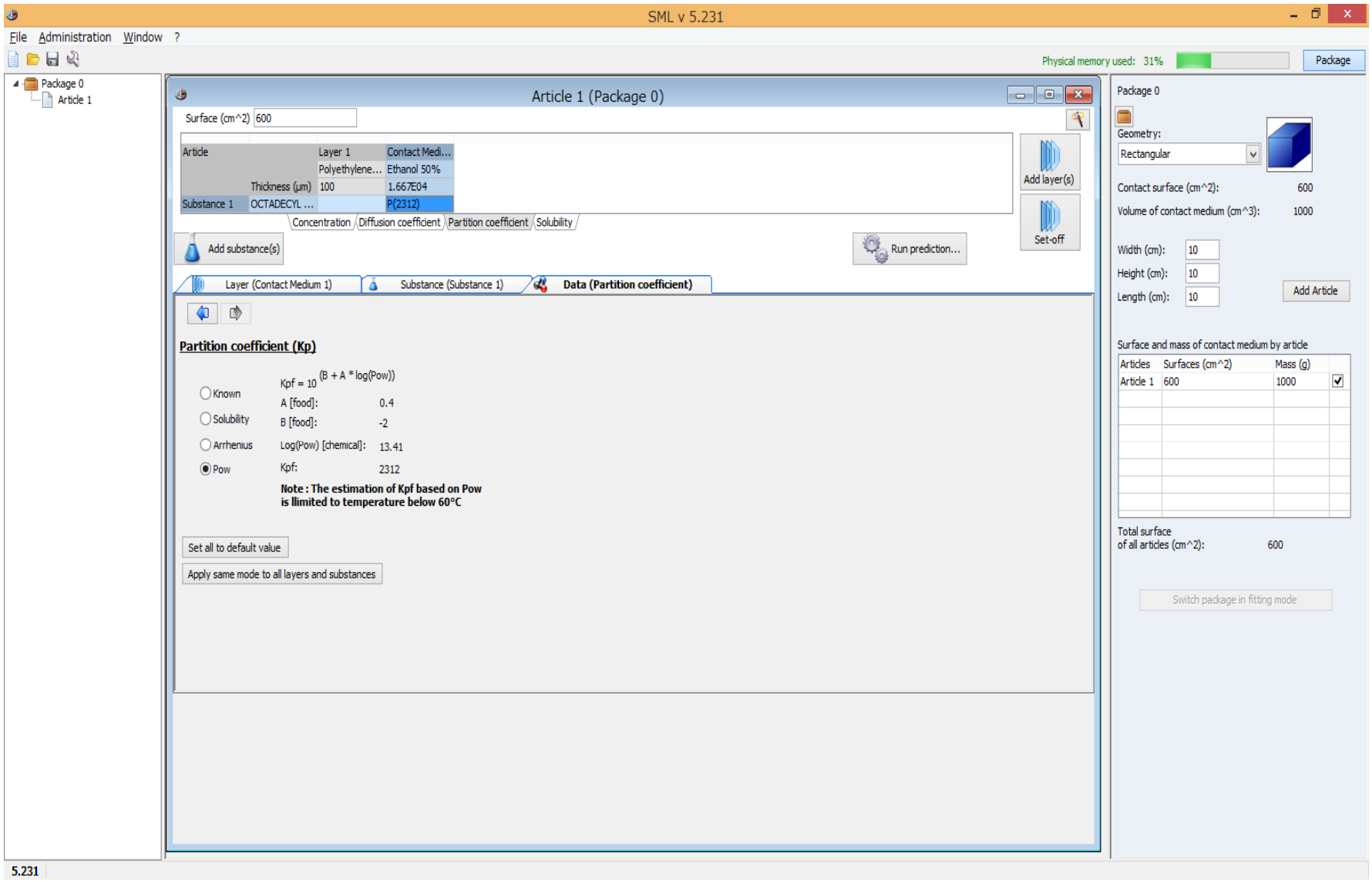
Partition coefficient (Kp)

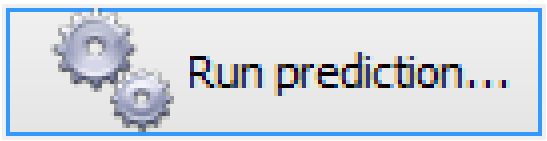
- ○ Known
- ○ Solubility
- ◉ Pow

Kpf = exp(B + A * log(Pow))

A [food]:	0.4
B [food]:	-2
Log(Pow) [chemical]:	13.41
Kpf:	28.9

P(28.9)　⇒　P(2112)となる。





⑧ 溶出温度条件の設定　121℃30min

Time max 30 min

Without statistics

Predictions

Predictions

Temperature profiles

Iso | Non-Iso | Step | Modulated | Shock | Worldwide | STANAG | Customized | Repeated use

Isothermal conditions

Temperature = 121 ℃

ΔT = 20 ℃

Number of isotherms = 1

Final Temperature = 121 ℃

Time max 30 min

Without statistics

Monte Carlo runs

Number of Runs 10

Include Sobol Runs

Fast distribution

Save... Load...

OK Cancel

Isothermal conditions

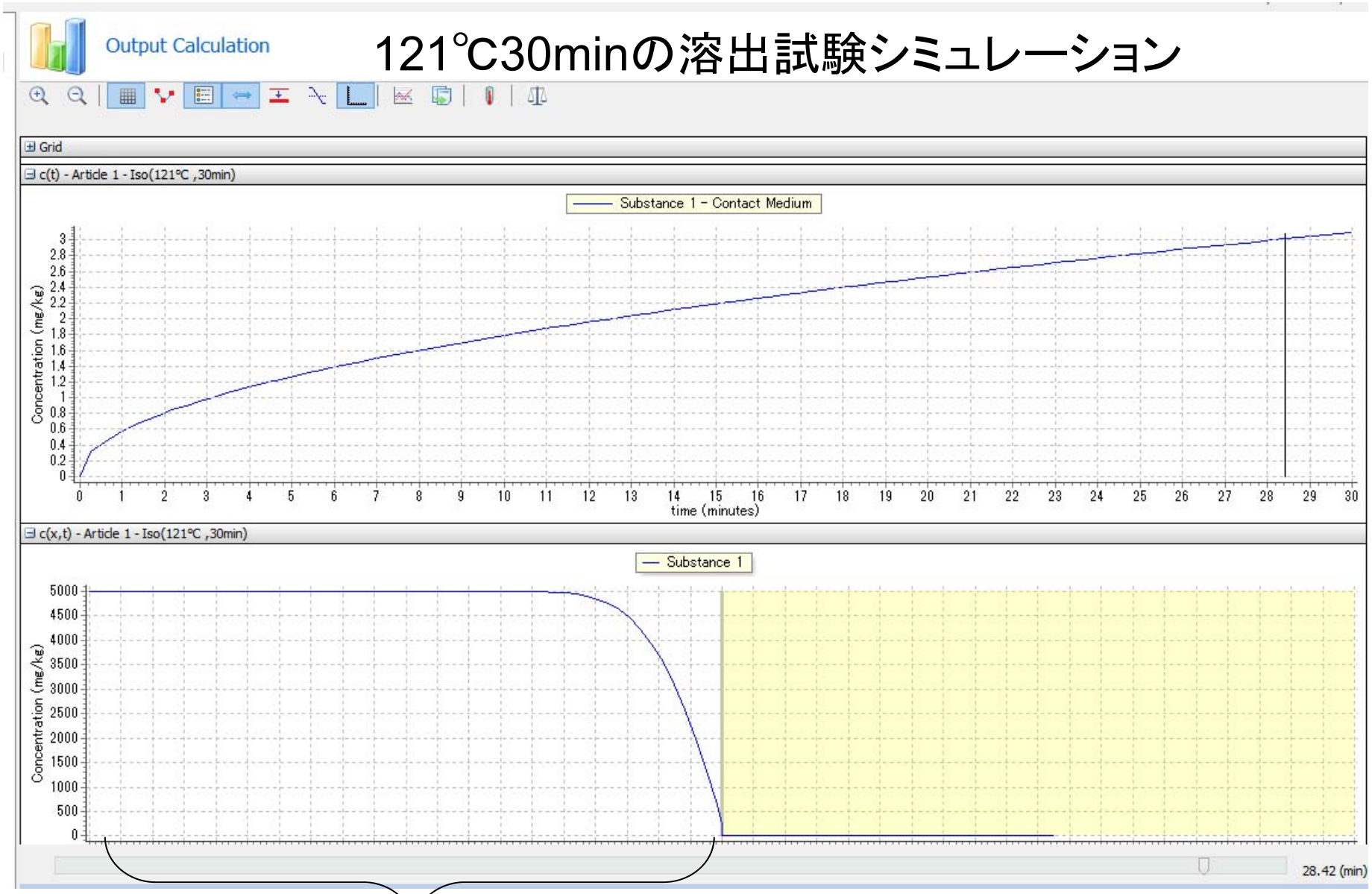
Temperature = 121 ℃

ΔT = 20 ℃

Number of isotherms = 1

Final Temperature = 121 ℃

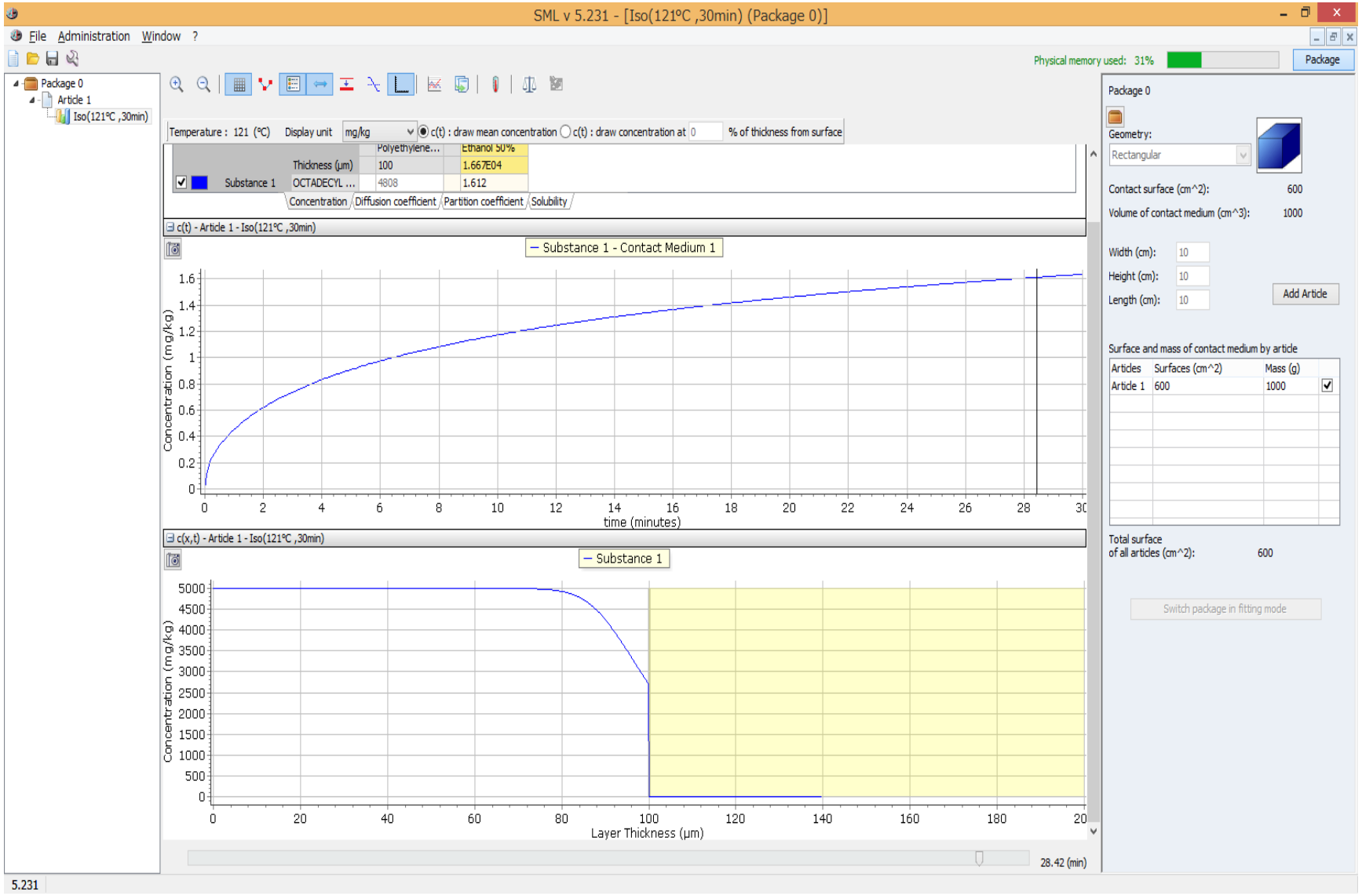
121℃30minの溶出試験シミュレーション



厚み方向の化学物質濃度分布

注PET　:Tg>70℃のAp-Valueを使っています。

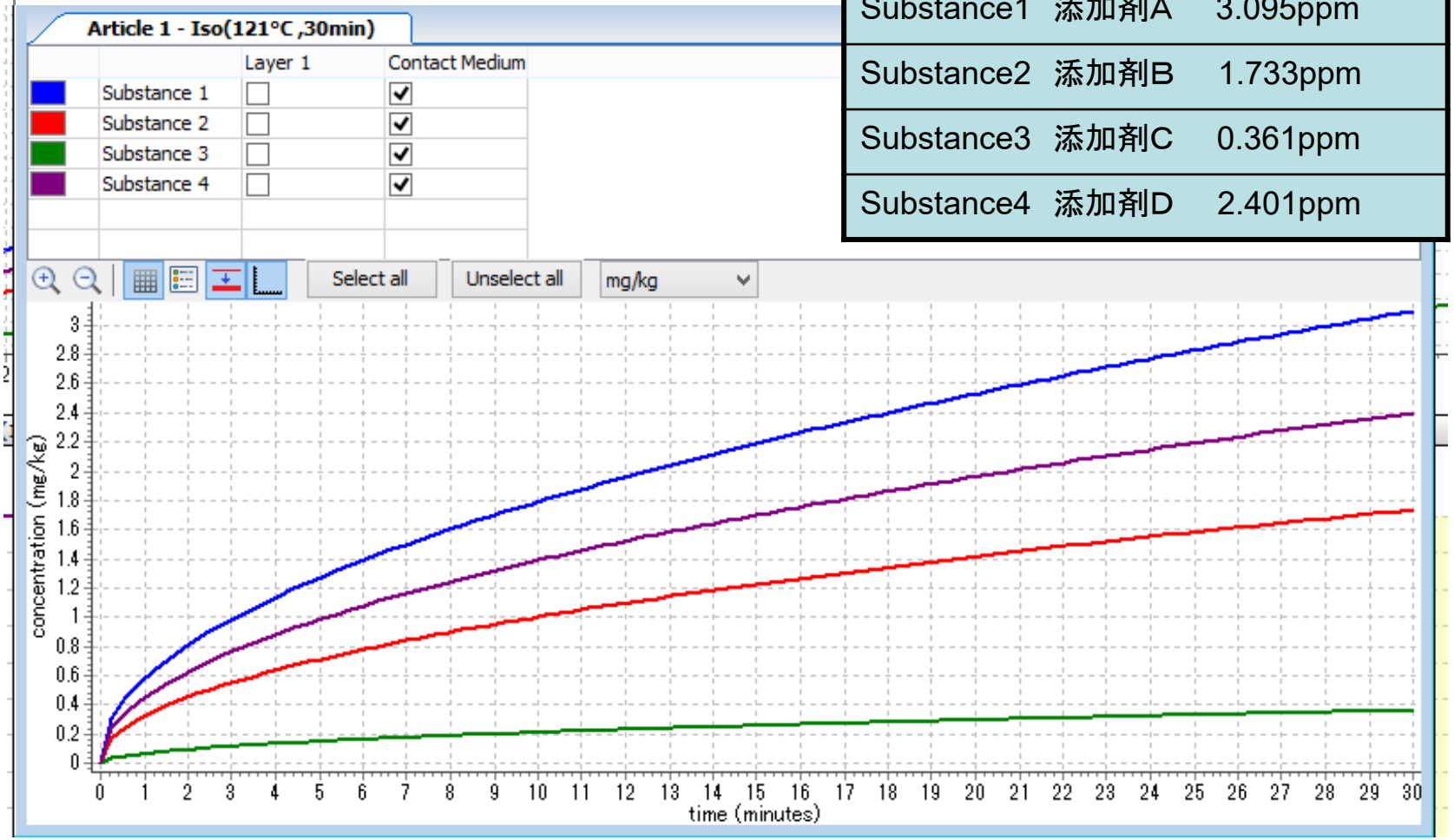
121℃　30minの溶出量　　3ppm　⇒　1.6ppm



Article		Layer 1	Contact Medi...
		Polyethylene...	Ethanol 50...
	Thickness (µm)	100	1.667E04
Substance 1	OCTADECYL ...		P(28.9)
Substance 2	PHOSPHORO...		P(187.2)
Substance 3	PENTAERYT...		P(343.8)
Substance 4	Calcium stea...		P(0.1353)

PET1 100µm
エタノール50%
121℃・30min

Substance1	添加剤A	3.095ppm
Substance2	添加剤B	1.733ppm
Substance3	添加剤C	0.361ppm
Substance4	添加剤D	2.401ppm



Substance 1 - OCTADECYL 3-(3,5-DI-tert-BUTYL-4-HYDROXYPHENYL) PROPIONATE

Properties

Density (g/cm^3) : 1

Molecular weight (g/mol) : 530.88

POW : 13.41

Initial concentration

Layer 1 : 5000mg/kg

Partition coefficient

Layer 1 / Contact Medium : 28.9 (POW based)

Diffusion coefficient

Layer 1 : 7.030E-15 cm^2/s (Piringer based)

Contact Medium : 1.000E-04 cm^2/s (Known)

Time/Temperature conditions :

Iso 121°C

30 min.

Migration :

SML (mg/kg of contact medium): Specific Migration Limit
QM (mg/kg of packaging) : Quantity Maximum
QMA (mg/dm^2 of packaging): Quantity Maximum per Area
DL (mg/kg of contact medium): Detection Limit
Green : Compliant
Red: Not compliant

Legislation（EU) No.10/2011
に 準拠するか否か？の出力例

緑色表示は準拠する場合

赤色表示は準拠しない場合

⊟ Substance 1 - 3.095E+00 mg/kg - OCTADECYL 3-(3,5-DI-tert-BUTYL-4-HYDROXYPHENYL) PROPIONATE

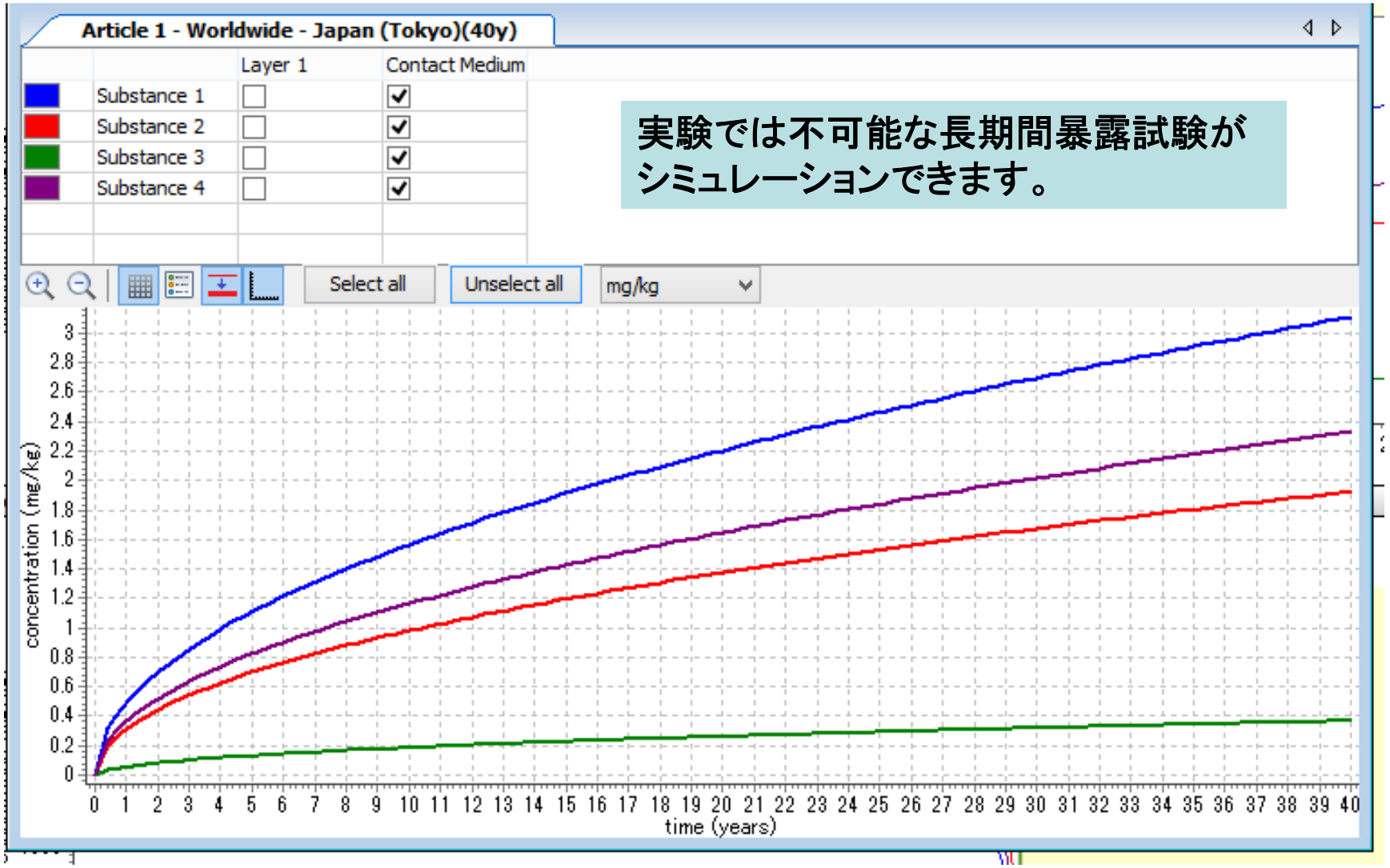
⊟ European Union : Regulatory : (EU) No 10/2011

SML	QM	QMA	DL
6	-	-	-

⊟ European Union : Regulatory : 2002/72/EC

SML	QM	QMA	DL
6	-	-	-

Japan/Tokyoの気候条件　40年間暴露試験＝ 121℃・30min



実験では不可能な長期間暴露試験がシミュレーションできます。