

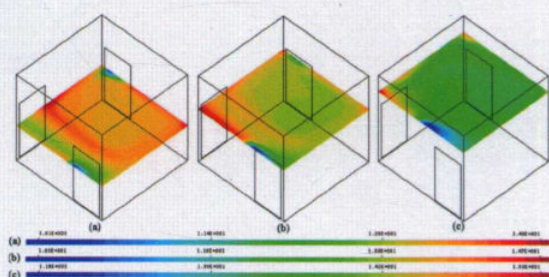


GAODENG XUEXIAO ZHUANYE JIAOCAI

• 高等学校专业教材 •

食品 过程工程

FOOD PROCESS ENGINEERING



赵黎明 主编



中国轻工业出版社 | 全国百佳图书出版单位

高等学校专业教材
华东理工大学研究生教育基金资助

食品过程工程

赵黎明 主编

 化学工业出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

食品过程工程/赵黎明主编. —北京: 中国轻工业出版社,
2020. 4

高等学校专业教材

ISBN 978-7-5184-2876-2

I. ①食… II. ①赵… III. ①食品工程学—高等学校—
教材 IV. ①TS201. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2020) 第 019858 号

责任编辑: 罗晓航 责任终审: 张乃东 整体设计: 锋尚设计
策划编辑: 李亦兵 罗晓航 责任校对: 李 靖 责任监印: 张 可

出版发行: 中国轻工业出版社 (北京东长安街 6 号, 邮编: 100740)

印 刷: 三河市国英印务有限公司

经 销: 各地新华书店

版 次: 2020 年 4 月第 1 版第 1 次印刷

开 本: 787×1092 1/16 印张: 11.5

字 数: 300 千字

书 号: ISBN 978-7-5184-2876-2 定价: 45.00 元

邮购电话: 010-65241695

发行电话: 010-85119835 传真: 85113293

网 址: <http://www.chlip.com.cn>

Email: club@chlip.com.cn

如发现图书残缺请与我社邮购联系调换

190223J1X101ZBW

食品工业是国民经济领域极为重要且规模巨大的产业。由于全球人口不断快速增长，食品加工技术得到了迅猛发展。从世界范围来看，消费者对食品的诉求已经超越了食品安全这个层面，越来越重视高品质、方便性和营养健康。因此，食品科学家和工程技术人员必须为满足消费者不断发展变化的需求而进行永无止境的探索。食品加工过程就是将食物从原料加工成终端产品的全过程，与传统食品工程原理的观点不同，食品过程工程的实质是一个多元素、多系统、多尺度交叉互作的动态过程，具有时变性、累积性、交融性等特征，是化学化工过程（三传一反过程）、细胞生理过程、微生物代谢过程、物理加工过程等过程科学的集成，涉及数学、化学、物理学、工程学、生物学、计算科学、大数据和人工智能、机械、材料科学等诸多学科。

《食品过程工程》是适用于食品、生物工程等相关专业研究生、企业研发工程师等人员的新型教材或参考书。区别于食品工程原理，它是建立在化工单元操作的基本理论和方法之上，又具有食品科学学科自身显著特色的过程工程学，强调加工单元过程的时变效应和累积效应，注重数学模型和动力学模拟在描述和解决加工过程中的运用，将食品生物工程的理念融入其中，在食品学科发展、食品工业实践和未来食品创造中将发挥重要作用。

全书共分为七章，分别从数学工具应用、反应动力学、食品流变学、计算流体力学、传热、冷冻冷藏、传质等角度，介绍了数学工具和模型、信息化及智能化工具在食品过程工程研究中的运用，辅以大量最新研究成果作为案例进行解析，便于更好地理解上述知识在解决实际问题中的应用，具有较强的工程特点和学科交叉特色。

在本书的编写过程中，参阅和引用了国内外有关专家的论著、教材、课件资料，在此表示感谢。本书付梓之前，主要内容和讲义经过了五年研究生必修课教学实践应用，并在应用过程中持续补充、完善。华东理工大学多位研究生参与了部分章节内容的资料整理和文字编辑工作：张雪、罗洒（第一、二章），卢珺（第三章），祝越超（第四章），屈田乐、郭佩（第五章），陈淑敏、聂嵘（第六章），张迪、胡小超（第七章），在此一并表示感谢！

由于编者水平和能力有限，书中难免存在错误或不足之处，敬请读者批评指正，以便进一步修订完善。

赵黎明
2019年12月

第一章	绪论	1
	第一节 食品过程工程	1
	第二节 数学模型及数学工具	3
	第三节 食物重要性质或质量指标	13
	参考文献	19
第二章	反应动力学	20
	第一节 动力学模型	20
	第二节 反应动力学	21
	第三节 反应器及停留时间分布	38
	第四节 本章结语	41
	参考文献	41
第三章	流体流动	44
	第一节 流体流变学基础	44
	第二节 流体动力学基础	50
	第三节 黏度计的使用	60
	第四节 本章结语	63
	参考文献	64
第四章	计算流体力学	65
	第一节 流体力学的“三驾马车”	65
	第二节 CFD 的应用	66
	第三节 CFD 的工作原理	67
	第四节 控制方程	69
	第五节 初始条件	71
	第六节 边界条件	72
	第七节 网格生成	72
	第八节 离散化	74

第九节 SIMPLE 算法	76
第十节 CFD 软件	77
第十一节 CFD 模拟“三传”过程	78
第十二节 本章结语	89
参考文献	90

第五章

传热与热处理	92
第一节 传热机制	92
第二节 热传导	93
第三节 对流传热	97
第四节 非稳态传热	101
第五节 热辐射	109
第六节 热加工	111
第七节 本章结语	116
参考文献	117

第六章

食品冷冻冷藏	119
第一节 温度对食品腐败的影响	119
第二节 食品冷冻	133
第三节 本章结语	141
参考文献	141

第七章

传质与包装	144
第一节 传质基本概念	144
第二节 分子扩散系数	145
第三节 对流传质	148
第四节 非稳态传质	154
第五节 食品包装材料	164
第六节 本章结语	174
参考文献	175

第一节 食品过程工程

食品工程发展的初期主要侧重于食品的保藏（如防止腐败与致病微生物的生长、酶的破坏），使食物在经过贮藏之后仍然可安全食用并保持营养，保障食品在运输过程中的稳定，这是 20 世纪中期之前食品工业的主要焦点。食品的加工与保藏是影响食品质量与安全、营养与健康、品质与成本的核心工程过程。法国糖果师尼古拉斯·阿佩特（Nicolas Appert）在 1812 年发明了加热灭菌技术，即对玻璃罐和玻璃瓶（图 1-1）中的食品进行加热处理，实现了食品的长期保藏。这标志着食品加工完成了从手工到工业化的跨越，也是现代食品工程起步的里程碑。后来，阿佩特出版了第一本关于现代食品保藏方法的著作——《肉类和蔬菜保藏法》。路易斯·巴斯德（Louis Pasteur）在 19 世纪末证明了细菌和致病微生物的生长会导致食品变质，并发明了巴氏杀菌（Pasteurization）、人造奶油制造工艺等。19 世纪中叶至 20 世纪初商业制冷技术的发展，使食品工程走上了新的征程。

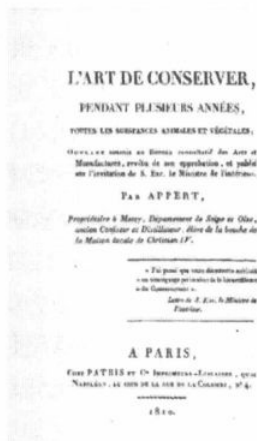


图 1-1 阿佩特罐头瓶（左）和第一本关于现代食品加工的书（右）

20 世纪下半叶,多种因素促使食品工业的重点转向开发更加多样化的食品。随着全球人口的急剧增长和全球经济的日益繁荣,人们对高质量食品的需求越来越大,同时对营养丰富、感官性能良好的食品也有了更大的需求。因此,食品工程注重于食品加工过程的研究,食品加工的两个根本目标仍然是转化(Transformation)和保藏(Preservation),食品加工过程即将一系列工艺按照一定的顺序组合在一起以实现特定的生产目的,而组成这个加工过程的工艺称为“单元操作”(Unit Operation)。食品制造过程就是利用这些单元操作组合成工艺过程,实现从原材料到终端产品或副产品的制造。大量的单元操作被开发并应用于食品工程中,这些单元操作包含物理、化学或生物化学等层面,这与化学工业过程中相同,因此一些化工单元操作的知识 and 优势在适应食品原材料特性(特别是易腐烂的天然产品)和加工特殊条件(卫生、清洁等)后,就能够应用于食品工业。食品工程是基于化学工业的相对较新的工程分支,过程工程也由此发展起来。过程工程概念的重要性在于它统一了通常被独立区分开的单元操作技术。因此,尽管所有食品工业的基本原则具有明显的多样性,但它们在逻辑上是统一的。

21 世纪以来的近 20 年里,世界科学技术日新月异,推动了经济快速发展,包括人工智能、生物技术和生命科学在内的新技术飞速发展,并给人类带来一场新的技术革命和生产生活方式的革新。人类对于食品 and 食品工业的需求和要求有了具备时代特点的新变化,这些新趋势体现在以下几个方面:

①更新鲜(Fresher):不加工或减少加工强度,以降低加工过程对食品风味、品质和营养的破坏;

②更安全(Safer):在避免传统的生物性、化学性和物理性等食品安全风险的基础上,进一步关注新型食品加工技术或食品原料导致的食物源慢性代谢性疾病或累积性危害风险、基因危害风险、致敏性风险等;

③更营养健康(Nutritionally Healthier):食品不能仅满足生存需求或感官需要,我们更应关注食品对于人类健康的积极影响和对于某些疾病的辅助治疗价值,达到“治未病”和“病从口出”的营养健康目的;

④更天然(More Natural):尽量少用添加剂,注重全食品(Whole Food)和非转基因(Non-GMO);

⑤质量更高(Higher Quality):包括风味、质构和外观等,能够满足更高标准、更多元化的需求;

⑥简化包装(Minimally Packaged):满足人们环境保护意识日益提高所产生的需求,降低食品成本,并提升包装材料的安全性和环保性;

⑦提高方便性(Improved Convenience):对加工制造、保藏和运输以及消费过程的方便化要求越来越高。

针对消费者的需求趋势,食品科学界和工业界必须进行相应的技术和策略的调整,以满足不断变化的消费需求。这些调整策略包括:

①通过技术创新实现产业的可持续性(Sustainability),不断降低能耗和减少水资源消耗,开发和使用环境友好的包装材料(如生物基可降解材料);

②开发和采用更温和的加工方式(Milder Processing),如优化热加工技术、低强度加热(Less Intense Heating)、开发和使用非热加工技术(Nonthermal Processes)等;

③减盐、减糖、减油(Reduce Salt, Sugar and Fat),控制盐、糖和脂肪的使用和摄入,降

低其引入的慢性营养疾病;

④采用栅栏技术 (Hurdle Technology) 进行食品保藏、保鲜, 避免或减少防腐剂等化学食品添加剂的使用;

⑤不断关注和提升食品的安全性, 加强对原料、保藏、运输环节的控制和规范, 防止食源性疾病和危害的产生;

⑥利用合成生物学技术 (Synthetic Biology) 和细胞工程 (Cell Engineering) 技术制造目标食品原料或食品营养因子, 实现原料来源的多样性和可控性, 同时也有效避免了饲养、种植等过程中的农药残留或抗生素残留等危害;

⑦通过大数据和人工智能技术 (Big Data & Artificial Intelligence), 实现食品加工、保藏、贮运过程中的过程工艺参数和品质控制参数的精准设计和控制。

这种消费需求和产业应对的发展, 要求对农产品的收获、屠宰、清洗等预处理过程, 以及食品加工过程、食品运输和保藏过程等有更高要求的认知、过程监测和描述、过程预测和控制水平, 于是, 基于过程工程的食物过程工程应运而生。食物过程工程 (Food Process Engineering) 的实质是一个多系统、多尺度、多参数互动动态过程, 可以归结于“传递” (Transportation) 和“反应” (Reaction) 过程 (三传一反)、微生物生长和代谢过程、生物催化和转化过程、物理加工过程等多学科科学技术的集成, 强调加工和保藏过程的时变效应 (Time-Dependent Effects) 和真实过程 (Real Processing) 的描述、预测和控制 (Description, Prediction and Control), 注重数学工具 (Mathematic Tools) 和数学模型 (Mathematical Modeling)、信息化 (Informatization) 和智能化 (Intelligentialize) 工具的普遍运用, 是研究食物过程工程的重要工具, 在食物科学与工程发展中具有重要作用。

第二节 数学模型及数学工具

数学模型可以用来理解和描述食品加工或保藏过程中的各种因素与食品质量指标之间的内在关系, 进而预测过程与结果的相关性和相互影响, 最终用于采取有效的控制策略, 实现食品加工与保藏的目的。建立这样的数学模型, 不仅需要掌握食品科学和营养学的相关知识, 还需要数学建模的知识。

数学模型是运用数理逻辑方法和数学语言建构的科学或工程模型。数学语言可以用来描述客观世界, 可以让我们对客观现象做出精准的描述。数学建模就是针对现实世界的实际问题及数据, 运用数学语言, 如符号、方程、公式等, 在一定的假设及适当简化实际问题的情况下, 将现实问题抽象为数学模型, 并进行分析求解, 进而解决实际问题的过程。数学模型最重要的作用是反映现实问题, 但由于它只是一个模型, 不可能考虑到现实中的全部因素, 因此在建模过程中需要忽略一些次要因素或对这些因素进行简化, 从而使模型更加集中地反映现实问题的数学规律。

一、数学建模过程

建立数学模型需要获取必要的数椐, 因此, 首先通过有限的实验或者通过文献检索获得充

分的数据,再运用数学工具来建立模型。需要特别指出的是,建模的目的和建模的方法同样十分重要。建模的一般步骤如下:

1. 模型的准备

各行各业都可能遇到需要建立模型的问题,那么在建立数学模型之前我们首先要对该行业的背景知识有一定的了解,可以通过查阅、学习等方法先对问题有一个初步的印象。此外,要明确建立数学模型的目的,清楚所要研究的对象的特征,必要时请教相关方面的专家,为模型建立作准备。

2. 模型的假设

要将现实问题简化为数学语言,就需要根据建模的目的,在分析问题的基础上对问题进行必要地、合理地简化,并使用精确的语言作出假设。在假设时,不可能把所有问题都考虑到,需要抓住问题的主要因素,去除次要因素。假设的问题及假设的合理性也会影响建模的成功与否,因此模型假设时既要进行简化,又要保持模型与实际问题的足够贴合。

3. 模型的建立

根据了解到的问题背景以及所建立的假设,利用适当的数学工具表示相关量与元素的关系,建立数学结构,如不等式、方程、表格、图形等。建模时尽量采取简单的数学工具,以方便更多的人能够了解和使用该模型。

4. 模型的求解

模型建立完成后需要进行求解,包括解方程组、画图表、逻辑运算等,一般运用软件和计算机技术进行求解。这些软件可以为求解数学模型提供快捷方便的方法,Mathematica 和 Maple 作模型解析研究,LAPACK、BLAS、Sundials 作数值求解中具体代数方程、偏微分方程与常微分方程的求解。

5. 模型的分析

这一步是要对模型进行数学分析,尤其是误差分析和数据稳定性分析。

6. 模型的检验

既然建立数学模型的目的在于解决实际问题,那么对于建立好的模型,其一需要检验该数学模型是否可以作为解决实际问题可以使用的模型。其二需要检验数学模型是否在逻辑上说得通,是否存在自相矛盾的地方。除此之外,模型是否容易求解也是判断数学模型优劣的一个重要指标,过于烦琐的求解过程不利于模型的普遍应用。如果结果不够理想,应该进行修改、补充假设或者重新建模,有的模型需要经过几次的重复,不断完善。

7. 模型的应用

所建立的模型必须能够应用到实际过程中,并在应用中不断改进和完善该模型。

二、数学模型分类

数学模型涉及很多学科,也会应用到不同的数学工具,因此它的分类并不是绝对的,按照不同的标准来划分可以分为不同类别:

①按照模型中的变量情况:可以分为离散性模型或连续性模型,确定性模型或随机性模型等;

②按照模型的应用领域:可以分为生物数学模型、医学数学模型、地质数学模型、数量经济学模型、数学社会学模型等;

③按照建立模型的数学方法：可以分为几何模型、微分方程模型、图论模型、规划论模型等；

④按照是否考虑时间的变化：可以分为静态模型和动态模型。

除此之外，还有许多不同的分类方式，不一一赘述。

动力学模型 (Kinetics Modeling) 是食品工程中最常用的数学模型之一，在第二章将详细介绍。除此之外，如响应面模型 (Response Surface Models) 和多元统计工具 (Multivariate Statistical Tools) 也十分重要。

三、相关数学工具

食品过程工程本质上是多尺度、多系统、多参数互作的动态过程，是一项多学科交叉融合的技术，因此具有高度的复杂性。在解决问题的过程中往往数据量过于庞杂，而且数据之间存在复杂的相互关联性，如何去分析这些数据，找到其中的关系是难点。这就取决于合理运用数学工具，通过不同数学计算工具的处理，从海量数据中抽丝剥茧，探究其中蕴含的信息，更快地解决问题。

(一) 数据分析：绘图和拟合方程

1. 变量和函数

(1) 变量 (Variable) 是指能评估某个值的量，变量的符号是不定的，任何字母都能代表一个变量，但是通常字母表中靠前的字母代表常数 (Constant)，靠后的字母代表变量。如表达式 $y=ax+b$ ，其中 a 和 b 代表常数， x 和 y 代表变量。

(2) 函数 (Function) 是表示变量之间关系的表达式，利用这个工具可以便于研究人员探究不同变量的变化情况和关系。如放在烘箱里加热的固体温度，可以表达为加热时间和固体温度的函数关系表达式 $y=f(x, t)$ 。

(3) 变量又可分为因变量 (Dependent Variable) 和自变量 (Independent Variable)，两者是可交换的。如表达式 $y=f(x)$ 中， y 是因变量， x 是自变量，但如果将表达式改写为 $x=g(y)$ ，则因变量是 x ，自变量是 y 。在实验设计中，固定的变量是自变量，而需要测量得到的是因变量。例如，测定罐头食品中抗坏血酸的损失时，时间是自变量，抗坏血酸的含量是因变量。另外，如果是采集某个样品，测定样品的水分含量和水分活度，那么可以将其中任意一个设定为因变量和自变量。

2. 作图

每个实验得到的数据都是一组数据点组成的，每个数据点是代表一对因变量和自变量的值的数字。如果一个因变量的值仅对应一个自变量的值 (单变量)，即表现为一个数据对。反之，如果一个因变量的值对应多个自变量的值 (多变量)，即表现为数据表或图表。以单变量对应的数据点作图是二维的，以多变量对应的数据表作图是多维的。

数据点的一对数字是指该点在图上的坐标，因变量绘制在水平轴或“横坐标” (Abscissa) 上，自变量绘制在垂直轴或“纵坐标” (Ordinate) 上。数据点的值代表该点分别在横坐标和纵坐标上距离原点的距离，通过合理的缩放，使数据点落在图的中间。相类似地，笛卡尔坐标系 (Cartesian Coordinate System) 扩展了横坐标和纵坐标，将图分为四个象限，左半边的横坐标代表因变量的负值，下半边的纵坐标代表自变量的负值。

(1) 线性图 (Lineargraph) 如果包含变量 x 和 y 的实验数据满足下述方程：

$$y = ax + b \quad (1-1)$$

式中 a ——直线的斜率;

b —— y 轴的截距。

那么作图时, 这些数据将落在一条直线上。

(2) 单对数坐标图 (Bode Plot) 如果包含变量 x 和 y 的实验数据满足下述方程:

$$y = a \times 10^{bx} \quad (1-2)$$

式中, a 和 b 为常数, 对等式两边以 10 为底取对数, 则有:

$$\lg y = bx + \lg a \quad (1-3)$$

因此, 如果用 $\lg y$ 对 x 作图, 则得到一条直线, 其斜率为 b , 在 y 轴上的截距是 $\lg a$ 。这时, 更方便的方法是使用单对数坐标图纸, 这种图纸的一个坐标是线性的, 另一个坐标是 $\lg$ 坐标, 将 y 放在 $\lg$ 坐标上, x 放在线性坐标上直接描点, 即可得一条直线。

(3) 双对数坐标图 (Log-Log) 如果包含变量 x 和 y 的实验数据满足下述方程:

$$y = ax^b \quad (1-4)$$

式中, a 和 b 是常数, 对等式两边取对数, 则有:

$$\lg y = b \lg x + \lg a \quad (1-5)$$

因此, 如果使用双对数坐标图, 用 y 对 x 作图则得到一条直线, 其斜率为 b , a 是 $x=1$ 时 y 的值。

3. 方程 (Equation)

方程是一个恒等式的陈述, 利用方程可以很方便地通过一个或多个变量的值得知另一个变量的值, 因此如何通过实验数据拟合出接近真实情况的方程是十分重要的。可以通过以下方法拟合到方程中:

(1) 线性回归和多项式回归 线性回归 (Linear Regression) 是指选取大量的样本数据, 根据数据的发展趋势, 选择假设函数, 基于最小二乘法 (Least Square Method) 得到函数极小值, 代入假设函数中就可以得到较为符合的方程。多项式回归 (Polynomial Regression) 则是在样本数据更为复杂的情况下, 运用类似的原理, 通过假设和代入得到相符合的方程。

(2) 线性、数据转换和线性回归 线性方程是一种便于计算和分析的方程, 因此多数情况下都希望将方程化为线性方程, 当数据关系是非线性时, 可以通过数据转换 (Data Conversion) 将其转换为线性数据, 线性回归确定线性方程的系数。

(3) 作图 原始数据点或是变化后的数据点, 多个点可以绘制成一条直线, 并且从斜率和截距中确定方程中变量的系数。

(二) 方程的解法

1. 方程的根 (Solution)

方程的根代表变量的值, 且符合函数方程式的关系。多项式的根和多项式数量一样多, 以下介绍几种方法确定方程的根。

(1) 变量的最高次数为 2 的方程称为二次方程, 可以通过求根公式得解:

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad (1-6)$$

能得到根:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

(2) 还可以通过分解因式得解:

$$f(x) = (ax+b)(cx+d)(ex+f) = 0 \quad (1-7)$$

能得到根: $x = -\frac{d}{a}$; $x = -\frac{d}{c}$; $x = -\frac{f}{e}$

这三个解都满足方程 $f(x) = 0$ 。

(3) 迭代法 (Iterative Method) 上述分析解能够快速得到方程的解, 但对方程的表达形式有严格的要求。实际问题中, 多数方程不可能获得根的分析表达式; 数值求解是最常用的解析解替代方法。以牛顿迭代法 (Newton-Raphson Method) 为例来解释说明。初始化变量 x 的值 $x = x_0$, 然后通过以下式子计算下一步的变量值 x_1 ,

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad (1-8)$$

通用地,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (1-9)$$

如此迭代, 直到停止判别式 $f(x_n) < \varepsilon$ 或者 $\left| \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n} \right| < \varepsilon$, $\varepsilon > 0$ 得到满足。其中, $f'(x)|_{x=x_n}$ 为变量 $x = x_n$ 时的一阶导数。

除牛顿迭代法之外, 还有其他被广泛应用的迭代法, 如二分法 (Bisection Method)、弦截法 (Secant Method) 等; 由于内容关系, 不作具体展开。

2. 图解积分

有些情况, 实验结果难以用可以积分的方程式形式表达, 此时可以使用图解积分法。图解积分法是通过有限差分法评估微分方程的值。以下举例三种求解方法:

(1) 矩形法 (Rectangle Method) 如图 1-2 (1) 所示, 将定义域分为一系列矩形, 矩形的厚度表示 x 的增量。设置矩形的高度使得曲线内部的阴影区域等于曲线外部的条形区域。增量可以不相等, 图 1-2 (1) 中使用 0.5 个单位的相等增量。

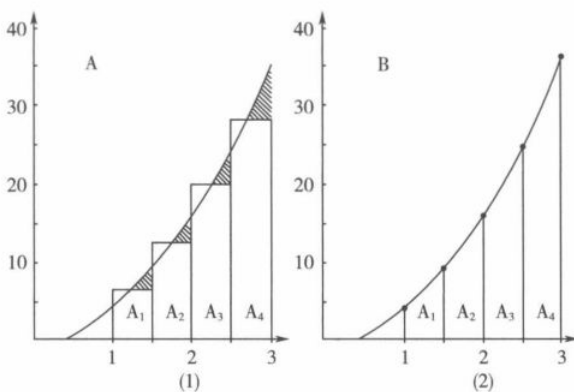


图 1-2 矩形 (1) 和梯形 (2) 的图形积分

对于 A_1 、 A_2 、 A_3 和 A_4 , 矩形的高度分别为 6.5、12.5、20 和 28。面积之和为 $0.5 \times (6.5 + 12.5 + 20 + 28) = 33.5$ 。

(2) 梯形法 如图 1-2 (2) 所示, 将定义域分为一系列梯形, 梯形的面积是宽度乘以高

度的算术平均值。对于函数 $y=4x^2$ ，当 $x=1、1.5、2、2.5$ 和 3 时，函数值（高度）分别为 $4、9、16、25$ 和 36 。梯形 $A_1、A_2、A_3$ 和 A_4 的面积分别为 $0.5 \times (4+9) \div 2、0.5 \times (9+16) \div 2、0.5 \times (16+25) \div 2$ 和 $0.5 \times (25+36) \div 2$ 。总和为 $3.25+6.25+10.25+15.25=35$ 。

若采用矩阵实验室 (MATLAB) 计算，可直接调用 $\text{trapz}(x, y)$ 函数，以梯形法的方式计算积分。

(3) 辛普森积分法 (Simpson's Rule) 梯形法又可以理解成以一次多项式的方式逼近积分原函数。下面介绍以二次多项式 (Quadratic Polynomial) 的方式逼近原函数的辛普森法则。

假定函数积分区间 $[a, b]$ ，被偶数均匀地分成 $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ 个片段。在偶区间 $[x_0 = a, x_2 = a + 2\Delta x]$ 内，采用二次多项式 $g(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 来近似原函数：

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_2} g(x) dx \quad (1-10)$$

$$\int_{x_0}^{x_2} (a_0 + a_1x + a_2x^2) dx = \left(a_0x + a_1 \frac{x^2}{2} + a_2 \frac{x^3}{3} \right) \Big|_{x_0}^{x_2} \quad (1-11)$$

通过三个坐标点 $[x_0, f(x_0)]、[x_1, f(x_1)]、[x_2, f(x_2)]$ 联立多项式的代数方程，可求出 $a_0、a_1、a_2$ 的值。然后代入 $[a_0, a_1, a_2]$ 值到式 (1-11) 中得出，

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \frac{x_2 - x_0}{6} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \quad (1-12)$$

其中， $\frac{x_2 - x_0}{6} = \frac{\Delta x}{3}$ 。由此类推，积分面积时所有如此偶区间片段积分数值的加和：

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n-2} \int_{x_i}^{x_{i+2}} g(x) dx = \frac{\Delta x}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{\Delta x}{3} [f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] + \cdots + \frac{\Delta x}{3} [f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)] \quad (1-13)$$

所以积分面积 A

$$A = \frac{\Delta x}{3} \left\{ f(x_0) + 4[f(x_1) + f(x_3) + \cdots + f(x_{n-1})] + 2[f(x_2) + f(x_4) + \cdots + f(x_{n-2})] + f(x_n) \right\} = \frac{\Delta x}{3} \left[f(x_0) + \sum_{\substack{i=1 \\ j=\text{odd}}}^{n-1} f(x_i) + \sum_{\substack{j=2 \\ j=\text{even}}}^{n-2} f(x_j) + f(x_n) \right] \quad (1-14)$$

此外，辛普森积分法还可以用三次多项式进行拟合，这里不作介绍。

四、数学模型在食品工程中的应用

我国是一个人口众多的国家，每天都有大量的食品被消费，这些食品可能经过研磨、干燥、腌制、冷冻等不同的加工过程，这些加工过程会涉及食品营养成分的损失、质构的变化、添加剂的使用、微生物的生长繁殖等。现代生产工艺需要灵活多样，出于多种因素限制，通过反复试验达到质量标准似乎不再是最好的方法。更系统的方法是使用建模，实际上，可以将建模过程想象为在虚拟实验室中使用定量模型进行模拟。数学模型的目的是基于对现象和可用度量的现有理论帮助理解、预测、控制复杂对象或过程的相关特征。目前的工业应用通常依赖于极其简化的静态模型，无法对工厂性能、质量和安全条件以及环境影响的瞬态效应进行真实的评估。建模和模拟的研究工作应针对主要的现象学方面，结合不同的因素，如热量、质量、动量、种群平衡与生物

化学反应。下面以食品常用的数学模型为例,方便读者理解数学模型的应用。

(一) 食品热物性的数学模型

食品的热物性(包括密度、导热系数、比热容等)在传热过程中会发生很大的变化。例如,食品冻结的过程中,水在食品组分中所占比例很大,且冻结过程中会发生相变,而水的热物性与冰的热物性差别很大,在 0°C 水的密度为 $997\text{kg}/\text{m}^3$,冰的密度为 $917\text{kg}/\text{m}^3$;水的导热系数为 $0.567\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$,冰的导热系数为 $2.24\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$,因此水的相变会影响食品的密度、导热系数。除此之外,冻结时食品的比热容除了实际比热容外还要考虑相变放热,冰在 0°C 时的融化潜热为 $333.2\text{kJ}/\text{kg}$,数值很大,因此冻结食品的比热容也会发生很大变化。

在选择食品冻结设备以及生产工艺时,常常需要利用食品的热物性来计算热负荷,过去选用人工查表计算的方法,既烦琐又不精确,随着电子计算机技术的发展,利用数学模型的自编软件进行计算能节约时间并满足精度的要求。其次,研究中经常需要对食品的传热过程进行分析与数值模拟,这一过程也需要用到食品的热物性数据。而利用数学模型能较好地描述食品热物性的变化规律,保证分析和模拟结果的准确性。在 Fluent 软件中,可以采用分段多项式数学模型来描述材料物性的变化规律。

首先了解食品热物性学的经验公式:

1. 食品冻结水含量的经验公式

$$x_{\text{ice}} = \frac{1.105x_{\text{wo}}}{1 + \frac{0.8765}{\ln(t_f - t + 1)}} \quad (1-15)$$

式中 x_{ice} ——冻结过程中食品内冰的质量分数;

x_{wo} ——未冻结时食品内水的质量分数;

t_f ——食品的初始冻结温度, $^{\circ}\text{C}$;

t ——食品内部的温度, $^{\circ}\text{C}$ 。

2. 食品密度的经验公式

$$\rho = \frac{(1 - \varepsilon)}{\sum (x_i / \rho_i)} \quad (1-16)$$

式中 ρ ——食品的密度;

ε ——食品材料的多孔率;

x_i ——食品中各种组分的质量分数;

ρ_i ——食品中各种组分的密度。

3. 食品热导率的经验公式

Chio 和 Okos 提出的根据组分体积分数和导热系数计算食品材料在各温度下的热导率的经验公式:

$$k = \rho \sum \frac{x_i^v}{\rho_i} k_i \quad (1-17)$$

其中, x_i^v 是食品材料各组分体积分数,计算公式如下:

$$x_i^v = \frac{x_i / \rho_i}{\sum (x_i / \rho_i)} = \frac{x_i}{\rho} \quad (1-18)$$

式中 x_i ——食品中各组分的质量分数;

ρ_i ——食品中各组分的密度;

k_i ——食品中各组分的导热系数。

将式 (1-18) 代入到式 (1-17) 可得到:

$$k = \rho^2 \sum \frac{x_i}{\rho_i^2} k_i \quad (1-19)$$

4. 食品比热容经验公式

$$c_u = \sum c_i x_i \quad (1-20)$$

式中 c_u ——未冻结食品的比热容;

c_i ——食品中各组分的比热容。

当食品的温度在冻结点以下时, 必须同时考虑温度改变的显热和水变成冰的潜热。采用 Chen (1985) 对 Schwartzberg (1981) 的经验公式的改进, 简化形式如下:

$$c_a = 1.55 + 1.26x_s - \frac{(x_{w0} - x_b)L_o t_f}{t^2} \quad (1-21)$$

式中 c_a ——表观比热容;

x_s ——食品中不可溶固体的质量分数;

x_b ——食品中结合水的质量分数;

L_o ——水的凝固潜热 (333.2 kJ/kg)。

根据上述经验公式, 从水、冰、蛋白质、脂肪、碳水化合物和灰分等构成食品的单组份物质的热物理性质出发来确定食品材料的热物理性质, 通过查找各组分的计算公式代入上述经验公式得到食品材料热物性的数学模型。为得到简单的分段多项式模型, 采用 C 语言编写程序, 利用程序计算出一系列的离散点, 并绘制热物性随温度变化的曲线图, 再利用分析软件对离散点进行回归分析, 得出多项式数学模型。最后再与文献中热物性随温度变化的趋势图进行比较, 验证模型的正确性。

(二) 食品挤压膨化过程数学模型

挤压膨化过程包括 5 个阶段: 物料从有序到无序的转变、气泡成核、模口膨胀、气泡生长和气泡塌陷。从有序到无序的转变主要是指淀粉糊化和降解、蛋白质变性等, 使粒状或粉状物料转变成具有黏弹性的熔融体。成核和气泡生长是影响膨胀的关键阶段, 后期的气泡塌陷则降低膨胀度。模口膨胀主要对径向膨胀产生影响。挤压膨化涉及的模型主要有成核速率模型、气泡生长模型、模口膨胀模型, 这里主要介绍一下成核速率模型。

熔融体排出模口后由于压力突然降低, 形成热力不稳定的小气泡, 称作“泡种”, “泡种”达到临界值时气泡才能够生长, 如果直径过小, 表面张力过大导致气泡不能生长, 当“泡种”直径达到临界值时成为“气核”。

若成核方式为均匀成核, 成核速率如式 (1-22):

$$N_c = A c_0 \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T}\right) \quad (1-22)$$

式中 A ——气体分子成核的频率因子;

k_B ——玻尔兹曼常数 (Boltzman), J/K;

T ——热力学温度, K;

c_0 ——发泡剂浓度, kg/m³;

ΔG ——成核所需的吉布斯自由能 (Gibbs), $\Delta G = \frac{16\pi\sigma^2}{3(\Delta P)^2}$, σ 为气泡-熔融体间的界面张力, ΔP 为模头压力降。

另一种成核方式为非均匀成核, 其主要由杂质引起, 其速度比均匀成核快得多。食品挤压过程中的成核方式主要为非均匀成核。其成核数量主要由实验确定。

(三) 食品贮藏品质数学模型

食品贮藏品质与食品的种类、加工工艺、贮藏条件等有关, 不同食品贮藏过程的品质变化规律和品质特征指标往往有差别。在一定的贮藏过程中, 食品的品质是贮藏时间的函数, 品质随时间的变化可用 $N_i = f_i(t)$ 来表示, N_i 为第 i 种品质指标 ($i=1, 2, 3, \dots, n$, 如 N_1 为总菌数, N_2 为色泽等); $f_i(t)$ 为第 i 种品质指标的时变函数, 通常受原料特性、贮藏条件及初始状态等因素的影响; t 为贮藏时间。 $f_i(t)$ 可以为理论模型、经验公式、半理论半经验模型等。其中常用的理论模型有描述生物生长的米切利斯 (Mitscherlich)、冈珀茨 (Gompertz)、罗杰斯蒂 (Logistic)、理查兹 (Richards) 等模型, 描述酶反应特性的米氏方程, 描述生化反应的一级化学反应动力学模型和阿伦尼乌斯方程 (Arrhenius Equation) 等。

(四) 食品包装材料数学模型

塑料包装广泛用于食品包装中, 用于阻止氧气、水蒸气、二氧化碳的渗透, 减缓原始成分和营养的损失, 方便贮藏等。但有些不合格的塑料包装材料, 由于内部残留的添加剂、加工助剂、聚合物单体、低聚体等化学物质扩散进入食品中, 会导致食品安全事件的发生。若通过实验手段研究塑料包装材料内组分的迁移, 耗时耗力、检测困难且花费昂贵。采用建立数学模型的方法研究塑料包装材料中化学物质向食品的迁移, 既便于研究又能降低成本。目前, 包装材料向食品迁移的数学模型大都基于菲克 (Fick) 扩散定律:

$$J = -D \frac{dC}{dx} \quad (1-23)$$

式中 D ——扩散系数, m^2/s ;

C ——扩散物质的体积浓度, kg/m^3 ;

J ——扩散通量, $kg/(m^2 \cdot s)$ 。

式 (1-28) 描述了一种稳态扩散, 即污染物浓度不随时间而变化。大多数扩散过程为非稳态扩散, 即材料中某一点的浓度随时间而变化。因此需要考虑 Fick 第二定律:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (1-24)$$

通常认为迁移仅发生在垂直于包装材料的平面上, 因此用上述一维的二阶偏微分方程来描述。当扩散系数 D 与浓度无关时, 式 (1-24) 简化为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (1-25)$$

[例 1-1] 一种奶油蛋卷类产品中的真菌生长预测模型 (Ifigeneia M, 2018)。

真菌污染是烘焙产品中的主要食品安全问题, 烘焙产品的 pH 和水分活度 (A_w) 适宜霉菌的生长, 且通常这些产品会直接放在货架上进行售卖, 更增加了感染真菌的风险。因此建立一个能够预测真菌生长的数学模型是十分有价值的, 以下以一种奶油蛋卷产品为例。

首先从烘焙商家中获得一些奶油蛋卷类产品的基础数据, 包括产品类别、 A_w 、pH、防腐