

ΣΥΣΤΑΣΗ:

Κατευθυντήρια γραμμή για τη μαθηματική εκτίμηση της μετανάστευσης μεμονωμένων ουσιών από οργανικά υλικά στο πόσιμο νερό (κατευθυντήρια γραμμή μοντελοποίησης)^{1,2}

Τελευταία ενημέρωση: 1. Ιουλίου 2024

ΣΧΕΔΙΟ

¹ Κοινοποιήθηκε σύμφωνα με την οδηγία (ΕΕ) 2015/1535 του Ευρωπαϊκού Κοινοβουλίου και του Συμβουλίου της 9ης Σεπτεμβρίου 2015, για την καθιέρωση μιας διαδικασίας πληροφόρησης στον τομέα των τεχνικών προδιαγραφών και των κανόνων σχετικά με τις υπηρεσίες της κοινωνίας των πληροφοριών (ΕΕ L 241 της 17.9.2015, σ. 1).

² Κοινοποιήθηκε με αριθμό 2009/040/D

Περιεχόμενα

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Σύσταση:..... | 1 |
| Κατευθυντήρια γραμμή για τη μαθηματική εκτίμηση της μετανάστευσης μεμονωμένων ουσιών από οργανικά υλικά στο πόσιμο νερό (κατευθυντήρια γραμμή μοντελοποίησης)..... | 1 |
| Τελευταία ενημέρωση: 1. Ιουλίου 2024..... | 1 |
| Κατάλογος μεταβλητών..... | 3 |
| 1 Εισαγωγή (κανονιστικό πλαίσιο)..... | 3 |
| 2 Εφαρμογή μοντελοποίησης..... | 3 |
| 3 Παραδοχές μοντελοποίησης..... | 5 |
| 4 Λύση της διαφορικής εξίσωσης..... | 9 |
| 4.1 Επικύρωση του χρησιμοποιούμενου λογισμικού..... | 9 |
| 5 Παράμετροι εισόδου..... | 10 |
| 5.1 Αξιολόγηση σταθερών ουσιών (μέθοδοι αξιολόγησης)..... | 11 |
| 5.2 Προσθήκη περαιτέρω μεθόδων αξιολόγησης για ορισμένα πολυμερή..... | 11 |
| 5.3 Εφαρμογή της αριθμητικής μεθόδου (αριθμητικός αλγόριθμος)..... | 12 |
| 5.3.1 Επιλογή του κατάλληλου αλγόριθμου (επίπεδου ή κυλινδρικού)..... | 12 |
| 5.3.2 Εφαρμογή των προαναφερόμενων μεθόδων αξιολόγησης των παραρτημάτων 2 και 3..... | 12 |
| 5.3.3 Χρήση μεθόδων αξιολόγησης άλλων από εκείνες που απαριθμούνται στα παραρτήματα 2 και 3..... | 13 |
| 6 Αποτελέσματα μοντελοποίησης..... | 13 |
| 7 Παραπομπές για τη λύση του 2ου νόμου του Fick..... | 14 |
| Παράρτημα 1 Διάγραμμα ροής για την ενσωμάτωση της μοντελοποίησης για την επαλήθευση των ειδικών ανά σύνθεση απαιτήσεων για τις μεμονωμένες ουσίες της βάσης αξιολόγησης KTW..... | 14 |
| Μέθοδοι αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης..... | 17 |
| Παράρτημα 3..... | 20 |
| Μέθοδοι αξιολόγησης των συντελεστών κατανομής..... | 20 |

Κατάλογος μεταβλητών

| | |
|--------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| D_w | Συντελεστής διάχυσης μιας ουσίας στο νερό σε m^2/s |
| D_{Pk} | Συντελεστής διάχυσης μιας ουσίας στη στρώση πολυμερούς P_k σε m^2/s , όπου k είναι ο δείκτης της στρώσης πολυμερούς με $1 \leq k \leq n$ και n ο συνολικός αριθμός των στρώσεων πολυμερών |
| c_w | Συγκέντρωση μιας ουσίας στο νερό σε $μg/l$ |
| c_{Pk} | Τοπική συγκέντρωση μιας ουσίας στις στρώσεις πολυμερούς P_k σε $μg/kg$ |
| t | Χρόνος σε d |
| c_{eq} | Συγκέντρωση σε ισορροπία κατανομής |
| $c_{Pk,0}$ | Μέση αρχική συγκέντρωση μιας ουσίας στη στρώση πολυμερούς P_k σε $μg/kg$ <i>Σημείωση: Ορίζεται ως c_0 στη βάση αξιολόγησης ΚΤW.</i> |
| MTC_{tap} | Μέγιστη ανεκτή συγκέντρωση μιας ουσίας στη βρύση σε $μg/l$ |
| c_{tap} | μέγιστη αναμενόμενη συγκέντρωση στη βρύση σε $μg/l$ |
| $c_{calculated}$ | υπολογιζόμενη συγκέντρωση μιας ουσίας στο νερό μετανάστευσης κατά τη διάρκεια μιας περιόδου μετανάστευσης (ανάλογη με τη μετρούμενη συγκέντρωση $c_{measured}$) |
| F_c | Συντελεστής μετατροπής σε d/dm (βλέπε βάση αξιολόγησης ΚΤW) |
| $K_{P/P}$ ή $K_{P/W}$ | Συντελεστής κατανομής μεταξύ δύο στρώσεων πολυμερών ή μεταξύ ενός πολυμερούς και του υδάτινου στρώματος |
| P_k | Στρώση πολυμερούς |
| O/V | Λόγος της υγρής επιφάνειας προς τον όγκο του νερού σε dm^{-1} |

1 Εισαγωγή (κανονιστικό πλαίσιο)

Η μαθηματική εκτίμηση της μετανάστευσης (μοντελοποίηση) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επαλήθευση των απαιτήσεων της βάσης αξιολόγησης ΚΤW για τη μετανάστευση μεμονωμένων ουσιών αντί των πειραματικών αποδεικτικών στοιχείων (ειδικές ανά σύνθεση απαιτήσεις για τις μεμονωμένες ουσίες).

Πρέπει να πληρούνται οι ακόλουθες απαιτήσεις:

- ▶ εφαρμογή μόνο με επιστημονικά αναγνωρισμένα μοντέλα
- ▶ συστηματικά υψηλότερα επίπεδα μετανάστευσης κατά τη σχετική με την αξιολόγηση περίοδο μετανάστευσης (υπερεκτίμηση)
- ▶ ιχνηλασιμότητα
- ▶ χρήση αριθμητικών μεθόδων.

2 Εφαρμογή μοντελοποίησης

Η αξιολόγηση των υλικών που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό απαιτεί υψηλό επίπεδο υγειονομικής ασφάλειας. Για τον λόγο αυτό, απαιτείται ένα

μοντέλο για την προσομοίωση το οποίο, σε απευθείας σύγκριση με τα πειραματικά προσδιορισμένα επίπεδα μετανάστευσης, παρέχει τουλάχιστον συγκρίσιμα ή συστηματικά υψηλότερα επίπεδα μετανάστευσης (υπερεκτίμηση).

Οργανικά υλικά, π.χ. πλαστικά, που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό μπορούν να απελευθερώσουν ουσίες στο πόσιμο νερό (μεταφορά μάζας ή μετανάστευση). Η συγκέντρωση των ουσιών μειώνεται στο οργανικό υλικό και αυξάνεται το πόσιμο νερό (μεταφορά μάζας). Το βήμα προσδιορισμού του ρυθμού μεταφοράς μάζας είναι η διάχυση των ουσιών στο οργανικό υλικό. Η μεταφορά ουσιών από οργανικά υλικά στο πόσιμο νερό μπορεί να μετρηθεί υπό τυποποιημένες συνθήκες (λόγος επιφάνειας/όγκου, ποσότητα κύκλων μεταβολής, χρόνος, θερμοκρασία) στο εργαστήριο (απόδοση της δοκιμής μετανάστευσης και ανάλυση του νερού δοκιμής για ειδικές για κάθε σύνθεση μεμονωμένες ουσίες με περιορισμό μετανάστευσης σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12873-1/-2) ή να υπολογιστεί με προσομοίωση βάσει μοντέλων διάχυσης (μοντελοποίηση). Στο προσάρτημα 1 παρουσιάζεται η συμμετοχή προσομοίωσης στην αξιολόγηση οργανικών υλικών που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό.

Για τη δοκιμή οργανικών υλικών που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12873-1/2, πρέπει να προσδιορίζονται διάφοροι κύκλοι μετανάστευσης. Σκοπός είναι να ληφθεί υπόψη η ανταλλαγή πόσιμου νερού σε σωληνώσεις ή εγκαταστάσεις. Στην προσομοίωση, όλες οι περίοδοι μετανάστευσης έως τη σχετική περίοδο μετανάστευσης πρέπει να υπολογίζονται για τη μεταναστεύουσα ουσία που ενδιαφέρει (βλέπε πίνακα 1 και πίνακα 2). Κατά την προκαταρκτική επεξεργασία σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12873-1/-2, στην προσομοίωση λαμβάνεται υπόψη μόνο η 24ωρη στασιμότητα. Η έκπλυση πριν και μετά τη στασιμότητα μπορεί να παραμεληθεί.

Στη βάση αξιολόγησης KTW, για την αξιολόγηση πρέπει να χρησιμοποιείται η 3η περίοδος δοκιμής για τη δοκιμή κρύου νερού και η 7η περίοδος δοκιμής για τη δοκιμή ζεστού και καυτού νερού ή, στην περίπτωση παρατεταμένης διάρκειας της δοκιμής, η 9η περίοδος δοκιμής για τη δοκιμή κρύου νερού και η 22η περίοδος δοκιμής για τη δοκιμή ζεστού και καυτού νερού.

Όπως και η μετρούμενη συγκέντρωση, η υπολογιζόμενη συγκέντρωση μετατρέπεται στην τυποποιημένη συγκέντρωση βρύσης c_{tap} (βλέπε βάση αξιολόγησης KTW). Το c_{tap} της σχετικής με την αξιολόγηση περιόδου μετανάστευσης δεν θα πρέπει να υπερβαίνει τη μέγιστη ανεκτή συγκέντρωση (MTC_{tap}).

Σε περίπτωση μη συμμόρφωσης μετά από 10 ημέρες χρόνου επαφής, η δοκιμή μπορεί να παραταθεί σε 31 ημέρες. Το νερό μετανάστευσης που πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά τη δοκιμή κρύου/ζεστού νερού και καυτού νερού επισημαίνεται στον πίνακα 1 (δοκιμή κρύου νερού) και στον πίνακα 2 (δοκιμή ζεστού και καυτού νερού). Η επέκταση της δοκιμής μπορεί, επίσης, να μοντελοποιηθεί.

Για την αξιολόγηση των πολυστρωματικών προϊόντων, θα πρέπει να εφαρμόζονται οι απαιτήσεις της βάσης αξιολόγησης KTW (βλ. κεφάλαιο 5.7 της βάσης αξιολόγησης KTW).

Πίνακας 1: Κύκλοι μετανάστευσης για την εκτεταμένη δοκιμή κρύου νερού

| Εβδομάδα | Κύκλος μετανάστευσης | Συνολικός χρόνος επαφής σε ημέρες | Χρόνος επαφής ανά μετανάστευση σε ημέρες |
|----------|----------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------------|
| 1 | 0 (προκαταρκτική επεξεργασία) | 1 | 1 |
| 1 | 1 | 4 | 3 |
| 2 | 2 | 7 | 3 |
| 2 | 3 | 10 | 3 |
| 3 | 4 | 14 | 4 |
| 3 | 5 | 17 | 3 |
| 4 | 6 | 21 | 4 |
| 4 | 7 | 24 | 3 |
| 5 | 8 | 28 | 4 |
| 5 | 9 | 31 | 3 |

Πίνακας 1: Κύκλοι μετανάστευσης της εκτεταμένης δοκιμής ζεστού ή καυτού νερού

| Εβδομάδα | Κύκλος μετανάστευσης | Συνολικός χρόνος επαφής σε ημέρες | Χρόνος επαφής ανά μετανάστευση σε ημέρες |
|----------|------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------------|
| 1 | 0 (προκαταρκτική ή επεξεργασία) | 1 | 1 |
| 1 | 1 | 2 | 1 |
| 1 | 2 | 3 | 1 |
| 1 | 3 | 4 | 1 |
| 2 | 4 | 7 | 3 |
| 2 | 5 | 8 | 1 |
| 2 | 6 | 9 | 1 |
| 2 | 7 | 10 | 1 |
| 2 | 8 | 11 | 1 |
| 3 | 9 | 14 | 3 |
| 3 | 10 | 15 | 1 |
| 3 | 11 | 16 | 1 |
| 3 | 12 | 17 | 1 |
| 3 | 13 | 18 | 1 |
| 4 | 14 | 21 | 3 |
| 4 | 15 | 22 | 1 |
| 4 | 16 | 23 | 1 |
| 4 | 17 | 24 | 1 |
| 4 | 18 | 25 | 1 |
| 5 | 19 | 28 | 3 |
| 5 | 20 | 29 | 1 |
| 5 | 21 | 30 | 1 |
| 5 | 22 | 31 | 1 |

Η εφαρμογή της μοντελοποίησης οργανικών υλικών και προϊόντων που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό και η αξιολόγηση των εκτιμώμενων συγκεντρώσεων μεταναστευουσών ουσιών εξηγείται με τη χρήση παραδειγμάτων στο παράρτημα (χωριστό έγγραφο).

3 Παραδοχές μοντελοποίησης

Η μεταφορά μάζας από οργανικά υλικά στο πόσιμο νερό περιορίζεται από τη μαζική μεταφορά ουσιών (διάχυση) και τη διαλυτότητα σε οργανικό υλικό και τη διαλυτότητα στο πόσιμο νερό.

Η μαζική μεταφορά μιας ουσίας από το ένα μέσο στο άλλο (διαφορετικές στρώσεις πολυμερών ή από οργανικό υλικό στο πόσιμο νερό) προσδιορίζεται με διάχυση στις στρώσεις και με μεταφορά στις οριακές στρώσεις. Στη συνέχεια, οι στρώσεις πολυμερών προσδιορίζονται με τον δείκτη P_k , όπου η τιμή του k μπορεί να κυμαίνεται από 1 έως τον συνολικό αριθμό των στρώσεων πολυμερών. Η στρώση πολυμερούς που έρχεται σε επαφή με νερό χαρακτηρίζεται πάντοτε ως $P1$. Ο δείκτης W αντιπροσωπεύει την υδατική φάση. Μια υποδειγματική δομή των στρώσεων πολυμερών παρουσιάζεται στο σχήμα 1.

Η εξίσωση που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον ποσοτικό προσδιορισμό της διάχυσης μιας ουσίας σε σχέση με τον χρόνο και την τοποθεσία σε μέσο (P ή W) στον χώρο (2ος νόμος) είναι η ακόλουθη:

$$\text{Εξίσωση 1 } \frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D \text{grad } c)$$

όπου: οι διαφορικοί φορείς div είναι η απόκλιση και grad είναι η διακύμανση, t είναι ο χρόνος μετανάστευσης, c είναι η τοπική συγκέντρωση και D είναι ο τοπικός συντελεστής διάχυσης της ουσίας στο νερό ή σε στρώση πολυμερούς. Ο συντελεστής διάχυσης D χαρακτηρίζει την κινητικότητα των μορίων της ουσίας στο νερό ή στο πολυμερές. Οι συντελεστές διάχυσης D εξαρτώνται από τη θερμοκρασία και μπορούν να εξαρτώνται από τον χρόνο και τον τόπο. Για τη μοντελοποίηση της μεταφοράς μάζας μιας ουσίας λαμβάνεται υπόψη ενιαίος συντελεστής διάχυσης στο αντίστοιχο μέσο (στρώση υλικού), ο οποίος διαφέρει μόνο ως προς τη θερμοκρασία που πρέπει να λαμβάνεται υπόψη [δοκιμή κρύου (23 °C), ζεστού (60 °C) και καυτού νερού (85 °C)]. Ο συντελεστής διάχυσης διαφέρει επίσης για την υπό εξέταση ουσία. Στις καρτεσιανές συντεταγμένες με τις συντεταγμένες x , y και z , η εξίσωση (1) έχει ως εξής:

$$\text{Εξίσωση 2 } \frac{\partial c_{P/W}}{\partial t} = D_{P/W} \left(\frac{\partial^2 c_{P/W}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_{P/W}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_{P/W}}{\partial z^2} \right)$$

ή σε κυλινδρικές συντεταγμένες με τις συντεταγμένες r , φ , z :

$$\text{Εξίσωση 3 } \frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right)$$

Από φυσική άποψη, σύμφωνα με την εξίσωση (1), ο ρυθμός $\frac{\partial c}{\partial t}$, στον οποίο η συγκέντρωση της ουσίας c μεταβάλλεται σε ένα σημείο (x , y , z) του συστήματος ισούται με την απόκλιση (div) του γινομένου ενός τοπικού

συντελεστή διάχυσης $D_{PK/W}$ (D_P στη στρώση πολυμερούς k ή D_W στο νερό) και της χωρικής αλλαγής (grad) της τοπικής συγκέντρωσης c .³ Η κατεύθυνση της διάχυσης είναι κατά μήκος της διακύμανσης συγκέντρωσης (πολυμερές \square νερό). Για να απλουστευθεί η εξίσωση και να διευκολυνθεί η μαθηματική επίλυση, λαμβάνονται υπόψη ένας συντελεστής διάχυσης ανεξαρτήτως τοποθεσίας (εξαιρουμένης της εξάρτησης από το υλικό των διαφόρων στρώσεων) και μια μονοδιάστατη διακύμανση συγκέντρωσης και εξετάζεται η διάχυση προς την κατεύθυνση αυτής της μονοδιάστατης διακύμανσης: $\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)$ ή

$\frac{\partial c}{\partial r}$ η κατεύθυνση είναι χωρίς περιορισμό γενικής φύσεως προς την κατεύθυνση

x εάν επιλέγεται ορθογώνια ως προς τα όρια της στρώσης ή προς την κατεύθυνση r με κυλινδρική δομή των στρώσεων. Οι άλλες χωρικές κατευθύνσεις μπορεί να παραμελούνται. Ως εκ τούτου, οι εξισώσεις που πρέπει να επιλυθούν βρίσκονται σε καρτεσιανές συντεταγμένες:

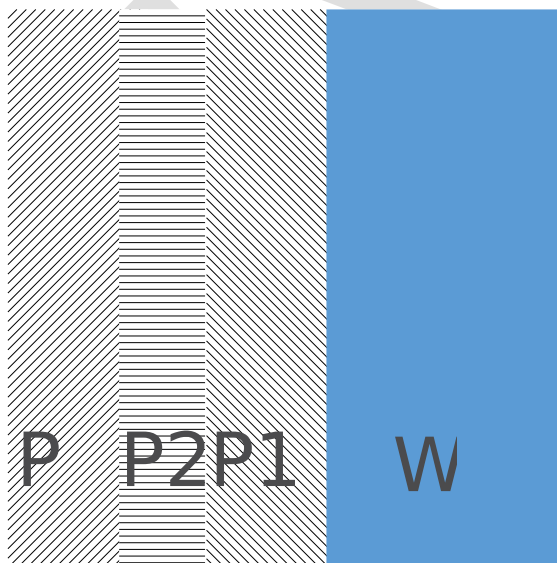
$$\text{Εξίσωση 4} \quad \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

ή σε κυλινδρικές συντεταγμένες:

$$\text{Εξίσωση 5} \quad \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{r} D \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} D \frac{\partial c}{\partial r} + D \frac{\partial^2 c}{\partial r^2}.$$

Η μεταφορά στην οριακή στρώση προσδιορίζεται από τον συντελεστή κατανομής. Ο συντελεστής κατανομής K είναι η κατανομή ισορροπίας μιας ουσίας μεταξύ δύο διαφορετικών μέσων, π.χ. ο συντελεστής κατανομής $K_{P1/P2}$ για μια ουσία μεταξύ της 1ης και της 2ης στρώσης πολυμερούς ή του συντελεστή κατανομής $K_{P1/W}$ μεταξύ της στρώσης πολυμερούς $P1$ και του νερού W .

Σχήμα 1: Υποδειγματική δομή των στρώσεων πολυμερούς



Για το μοντέλο γίνονται οι ακόλουθες παραδοχές:

³ Για σωλήνες με $DN \leq 80$ mm, η εξίσωση θα πρέπει να επιλύεται με κυλινδρικές συντεταγμένες.

- ▶ Δεν πραγματοποιείται μεταφορά (ροή) κατά τη διάρκεια της υδατικής φάσης.
- ▶ Τα μέσα (στρώσεις υλικών ή υδατική φάση) είναι παράλληλα μεταξύ τους (μονοδιάστατο πρόβλημα)
- ▶ Η μεταφορά μάζας περιορίζεται από τη μαζική μεταφορά (διάχυση) στις στρώσεις οργανικού υλικού:
 - Ωστόσο, λαμβάνεται υπόψη η μαζική μεταφορά στο στάδιο της υδατικής φάσης. Χρησιμοποιείται ομοιόμορφος συντελεστής διάχυσης $10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ για την προσομοίωση ταχείας ανάμειξης.
- ▶ Παραβλέπεται η οριακή αντίσταση μεταξύ των μέσων: Στις οριακές επιφάνειες διαφορετικών στρώσεων ή στην οριακή στρώση νερού/πολυμερούς, η κατάσταση ισορροπίας που περιγράφεται από τον συντελεστή κατανομής ρυθμίζεται αυθόρμητα.
- ▶ Το υπό εξέταση σύστημα πολυμερούς και νερού είναι κλειστό σύστημα.
 - Η ποσότητα της ουσίας στο συνολικό σύστημα παραμένει σταθερή ανά πάσα στιγμή (διατήρηση μάζας).
 - Δεν υπάρχει μαζική μεταφορά στο εξωτερικό στα άκρα των δύο ακραίων μέσων (υδατική φάση και ακραία στρώση υλικού).
 - Η κατανομή της μεταναστεύουσας ουσίας πραγματοποιείται στην επιφάνεια επαφής πολυμερούς-νερού. Ο συντελεστής κατανομής K_{pw} έχει την ίδια τιμή σε όλα τα σημεία της επιφάνειας σε σταθερή θερμοκρασία.
 - Δεν πραγματοποιούνται χημικές αντιδράσεις (καμία υδρόλυση της μεταναστεύουσας ουσίας, κανένας σχηματισμός ή αντίδραση της μεταναστεύουσας ουσίας στο στερεό).
- ▶ Οι συντελεστές διάχυσης και κατανομής είναι ομοιογενείς σε ένα μέσο και σταθεροί με την πάροδο του χρόνου (για παράδειγμα, δεν λαμβάνεται υπόψη η μερική διόγκωση του πολυμερούς), αλλά εξαρτώνται από τη θερμοκρασία.
- ▶ Σε περίπτωση μεταβολής της θερμοκρασίας (θερμή/κρύα έκπλυση), θεωρείται πάντοτε ότι υπάρχει ομοιογενής κατανομή της θερμοκρασίας στο εξεταζόμενο μέσο. Δεν θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη πιθανές διακυμάνσεις της θερμοκρασίας.
 - Η πυκνότητα του νερού εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Η ακριβής πυκνότητα μπορεί να βρεθεί στους αντίστοιχους πίνακες. Εναλλακτικά, για πρακτικούς λόγους, μπορεί να χρησιμοποιηθεί πυκνότητα 1 g/cm^3 .

- Το σύνηθες λογισμικό για τη μετανάστευση μοντελοποιεί συγκεντρώσεις εκροών ως συγκεντρώσεις που σχετίζονται με τη μάζα (mg/kg) και απαιτεί την εισαγωγή της πυκνότητας του νερού.

Οι απαραίτητες υλικές σταθερές και χαρακτηριστικές τιμές για επικυρωμένες μεθόδους αξιολόγησης των υλικών σταθερών περιλαμβάνονται στις βιβλιογραφικές παραπομπές των παραρτημάτων 2 και 3.

Η συνθήκη εκκίνησης για τα υλικά και τα προϊόντα μίας στρώσης είναι η ακόλουθη:

Πριν από την έναρξη του πρώτου κύκλου μετανάστευσης, η μεταναστεύουσα ουσία κατανέμεται ομοιογενώς στο πολυμερές (αρχική συγκέντρωση $c_{p,0}$).

Σημείωση: Για ουσίες που μεταναστεύουν στην επιφάνεια ή εκτοξεύονται αυτούσιες, όπως οι αντιστατικοί παράγοντες ή τα λιπαντικά, η προϋπόθεση αυτή δεν πληρούται και η μετανάστευση θα υποτιμάται. Ως εκ τούτου, δεν πληρούται η προϋπόθεση εκκίνησης.

Για τα υλικά και τα προϊόντα πολλαπλών στρώσεων οι συνθήκες εκκίνησης είναι οι ακόλουθες (βλέπε σημείο 5.7 της βάσης αξιολόγησης KTW):

- ▶ Αμέσως μετά την παρασκευή, η μεταναστεύουσα ουσία κατανέμεται ομοιογενώς στις στρώσεις στις οποίες προστέθηκε (αρχική συγκέντρωση $C_{P,0}$).
- ▶ Πριν από τη δοκιμή μετανάστευσης, μοντελοποιείται η αποθήκευση σε θερμοκρασία δωματίου (23 °C) 30 ημερών. Οι προκύπτουσες συγκεντρώσεις για τη μεταναστεύουσα ουσία υπολογίζονται για όλες τις στρώσεις και χρησιμοποιούνται ως αρχική κατάσταση επαφής με το νερό.

Η

- ▶ Είναι δυνατή η χωριστή αξιολόγηση των επιμέρους στρώσεων. Πρέπει να διασφαλίζεται ότι η προσθήκη των αποτελεσμάτων μετανάστευσης των επιμέρους στρώσεων αντιστοιχεί στο προϊόν πολλαπλών στρώσεων. Πρέπει να προστεθούν οι ίδιες μεταναστεύουσες ουσίες όλων των στρώσεων προς αξιολόγηση για την αξιολόγηση του MTC_{tap} .

Οι παραδοχές που αναφέρονται ανωτέρω, καθώς και οι συνθήκες εκκίνησης και οι οριακές συνθήκες που εφαρμόζονται, απλουστεύουν τη διαφορική εξίσωση που περιγράφεται ανωτέρω, καθιστώντας έτσι ευκολότερη την επίλυση.

4 Λύση της διαφορικής εξίσωσης

Η διαφορική εξίσωση που περιγράφει τη διάχυση μπορεί να επιλυθεί αριθμητικά σε καρτεσιανές ή κυλινδρικές συντεταγμένες, λαμβάνοντας υπόψη τις συνθήκες εκκίνησης και τις οριακές συνθήκες, όπου το διάλυμα περιγράφει τη χρονική μεταβολή της τοπικής συγκέντρωσης της υπό εξέταση ουσίας στις αντίστοιχες στρώσεις υλικού και στο πόσιμο νερό υπό τις συνθήκες δοκιμής που αντιστοιχούν στην εφαρμογή ανάλογα με τις διάφορες μεταβλητές (παράμετροι εισαγωγής).

Η λύση της διαφορικής εξίσωσης του 2ου νόμου του Fick (βλ. κεφάλαιο 3) για επανειλημμένη επαφή σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12783-1/2 είναι δυνατή μόνο με τη χρήση αριθμητικών αλγορίθμων. Για τη μαθηματική εκτίμηση της μετανάστευσης από επίπεδες ή κυλινδρικές γεωμετρίες δειγμάτων είναι απαραίτητοι διαφορετικοί αλγόριθμοι. Οι αλγόριθμοι θα πρέπει να εφαρμόζονται σε μονοστρωματικά ή πολλαπλών στρώσεων οργανικά υλικά και προϊόντα που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό. Οι λύσεις λογισμικού είναι απαραίτητες για την εφαρμογή αυτών των αλγορίθμων.

Σημείωση: Η ανακρίβεια του ίδιου του αριθμητικού υπολογισμού θα πρέπει να έχει αμελητέα μόνο συμβολή στη συνολική ανακρίβεια της μεθόδου αξιολόγησης, η οποία προσδιορίζεται ουσιαστικά από την ανακρίβεια των παραμέτρων εισόδου (ισοζύγιο μάζας του υπολογισμού < 1 % απόκλιση, βλέπε 4.1). Η σχετική και απόλυτη ανακρίβεια ενός τέτοιου αλγορίθμου θα είναι τότε τουλάχιστον μία τάξη μεγέθους κάτω από την ανακρίβεια των αναλυτικών μεθόδων που χρησιμοποιούνται για τον πειραματικό προσδιορισμό της μετανάστευσης (CEN TR 16364: 2012).

4.1 Επικύρωση του χρησιμοποιούμενου λογισμικού

Αν υποτεθεί ότι ένα οργανικό υλικό αποτελείται από μονοστιβάδα, το πόσιμο νερό έχει περιορισμένο όγκο και η μετανάστευση ακολουθεί τον 2ο νόμο του Fick, υπάρχουν μαθηματικές λύσεις για τη διαφορική εξίσωση για τον υπολογισμό της χρονικά εξαρτώμενης μετανάστευσης από το οργανικό υλικό στο πόσιμο νερό.

Για πολλαπλή επαφή σύμφωνα με το πρότυπο μετανάστευσης DIN EN 12873-1/-2, η προσομοίωση αυτή και οι οριακές συνθήκες της δεν είναι αρκετά ακριβείς. Ως αρχική προϋπόθεση, μπορεί να βασίζεται μόνο σε ομοιογενή κατανομή στο υλικό της μεταναστεύουσας ουσίας που πρέπει να ληφθεί υπόψη. Η επαφή με το πόσιμο νερό δημιουργεί διακυμάνσεις συγκέντρωσης στο υλικό, οι οποίες πρέπει να χρησιμοποιούνται ως συνθήκη εκκίνησης για τον επόμενο κύκλο μετανάστευσης. Αυτό μπορεί να γίνει μόνο με τη χρήση αριθμητικών μεθόδων. Το λογισμικό πρέπει να είναι σε θέση να χαρτογραφήσει τις προδιαγραφές δοκιμής του προτύπου μετανάστευσης DIN EN 12873-1/-2.

Οι λύσεις λογισμικού που διατίθενται στην αγορά εμφανίζονται ως «κλειστός» αλγόριθμος, στον οποίο ο χρήστης του λογισμικού δεν μπορεί να εντοπίσει τους υπολογισμούς.

Προκειμένου να διασφαλιστεί ότι οι προσομοιώσεις αποφέρουν ορθά αποτελέσματα, πρέπει να λαμβάνονται υπόψη τα ακόλουθα κριτήρια:

1. Η ακρίβεια της προσομοίωσης ελέγχεται με τη χρήση των παραδειγμάτων που παρέχονται στο παράρτημα. Οι λύσεις λογισμικού που μπορούν να υπολογίσουν μόνο τα επίπεδα δείγματα είναι σε θέση να αναπαράγουν τα παραδείγματα 1 έως 3 και οι λύσεις λογισμικού για κυλινδρικά δείγματα είναι σε θέση να αναπαράγουν τα παραδείγματα 4 έως 8. Οι αποκλίσεις των υπολογιζόμενων συγκεντρώσεων από τα διαλύματα των προαναφερόμενων παραδειγμάτων δεν πρέπει να υπερβαίνουν το 5 %.
2. Για κάθε υπολογισμό, οι παραδοχές που γίνονται πρέπει να είναι εύλογες και κατανοητές (πηγή ή αιτιολόγηση).
3. Τα αποτελέσματα που λαμβάνονται πρέπει να ελέγχονται ως προς τη λογικότητα (βλ. σημείο 5.3).
4. Πρέπει να υπολογίζεται το ισοζύγιο μάζας της ποσότητας της ουσίας πριν και μετά τον υπολογισμό της μοντελοποίησης και, μετά τον υπολογισμό με αριθμητική μέθοδο, να μην αποκλίνει από την ποσότητα της πρώτης ύλης λιγότερο από 1 %. Το ισοζύγιο μάζας συγκρίνει το άθροισμα της ποσότητας της ουσίας της μεταναστευτικής ουσίας σε όλες τις στρώσεις πολυμερών κατά τη χρονική στιγμή $t = 0$ (δηλαδή πριν από τη μοντελοποίηση) με το άθροισμα της ποσότητας της ουσίας σε όλες τις στρώσεις πολυμερών κατά την τελευταία επαφή μετανάστευσης συν το άθροισμα των ποσοτήτων της ουσίας στο νερό μετανάστευσης όλων των κύκλων, συμπεριλαμβανομένης της προκαταρκτικής επεξεργασίας.

5 Παράμετροι εισόδου

Το διάλυμα του διαφορικού ισοζυγίου μάζας περιέχει μεταβλητές που πρέπει να προσδιορίζονται για τους υπολογισμούς της μετανάστευσης της υπό εξέταση ουσίας στο νερό:

- ▶ **Τα γεωμετρικά μεγέθη** (πάχος στρώσης, επιφάνεια επαφής, όγκος) καθώς και ο χρόνος και η θερμοκρασία επιλέγονται σύμφωνα με την πειραματική προσέγγιση της δοκιμής μετανάστευσης σύμφωνα με τη βάση αξιολόγησης ΚΤW. Αυτό επιτρέπει την άμεση σύγκριση των υπολογιζόμενων τιμών μετανάστευσης και των τιμών μετανάστευσης που υποβλήθηκαν σε δοκιμή. Τα γεωμετρικά μεγέθη των δειγμάτων και οι συνθήκες της δοκιμής μετανάστευσης είναι γνωστά.
- ▶ Στην περίπτωση **σωλήνων**, πρέπει να χρησιμοποιούνται κυλινδρικές συντεταγμένες για διάμετρο σωλήνα μικρότερη από 80 mm, καθώς η μοντελοποίηση μπορεί διαφορετικά να οδηγήσει σε μη ανεκτή υποεκτίμηση των υπολογιζόμενων συγκεντρώσεων στο νερό μετανάστευσης.
- ▶ **Σύνθετες γεωμετρίες** μπορούν να αποσυναρμολογηθούν σε μεμονωμένες γεωμετρίες. Στη συνέχεια προστίθεται το αποτέλεσμα των διαφόρων γεωμετριών, υπό την προϋπόθεση ότι δεν προκύπτει υποεκτίμηση ως αποτέλεσμα της αποσυναρμολόγησης και των μεμονωμένων προσομοιώσεων. Εναλλακτικά, μπορεί να υπολογιστεί ένα μέσο πάχος από τον λόγο του όγκου του συστατικού προς την επιφάνεια που έρχεται σε επαφή με το πόσιμο νερό και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση.
- ▶ **Η αρχική συγκέντρωση της επιμέρους ουσίας $C_{p,0}$** στις αντίστοιχες στρώσεις υλικού πρέπει να είναι γνωστή (π.χ. στην περίπτωση πολυμερών, περιεκτικότητα σε υπολειμματικά μονομερή, περιεκτικότητα σε πρόσθετα κ.λπ.) ή να προσδιορίζεται αναλυτικά με τη χρήση επικυρωμένων (συμπεριλαμβανομένων των εσωτερικών) μεθόδων δοκιμής. Σε ορισμένες περιπτώσεις, υπάρχουν επίσης πρότυπα (π.χ. σειρά DIN EN 13130, επίσημη συλλογή διαδικασιών ανάλυσης σύμφωνα με το άρθρο 64 του LFBG, άρθρο 38 του TabakerzG, άρθρο 28b του GenTG). Το πραγματικό υπολειμματικό περιεχόμενο μπορεί να αλλάξει κατά τη διάρκεια των διαδικασιών παρασκευής και μεταποίησης (π.χ. μονομερή σε POM ή πολυαμίδιο, προϊόντα αντίδρασης και αποικοδόμησης μέσω σταυρόδεσης ή σταθεροποιητών). Ως εκ τούτου, είναι σημαντικό το πραγματικό εύρος διακύμανσης του $C_{p,0}$ να είναι γνωστό ή προσδιορισμένο ανά παρτίδα. Υπό την προϋπόθεση ότι η συγκέντρωση της μεταναστεύουσας ουσίας δεν μεταβάλλεται κατά τις διαδικασίες παρασκευής και μεταποίησης, μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί η ποσότητα που χρησιμοποιείται στη σύνθεση, π.χ. στην περίπτωση πρόσθετης ύλης.
- ▶ **Οι συντελεστές διάχυσης και κατανομής** γενικά δεν είναι γνωστοί για τα αντίστοιχα μέσα και πρέπει να αξιολογούνται με επιστημονικά αναγνωρισμένες μεθόδους (βλ. βιβλιογραφικές παραπομπές στο παράρτημα 2 και στο παράρτημα 3). Εάν οι τιμές που μετρώνται με επικυρωμένες μεθόδους είναι διαθέσιμες για τις παραμέτρους, μπορούν να χρησιμοποιηθούν αυτές.

- Κατά την προαποθήκευση πολυστρωματικού υλικού και κατά τη διάρκεια κάθε μεμονωμένης περιόδου μετανάστευσης ή στασιμότητας για μονοστρωματικά και πολυστρωματικά υλικά, **προφίλ συγκέντρωσης** σχηματίζονται σε κάθε στρώση. Αυτά πρέπει να χρησιμοποιούνται για την επόμενη περίοδο δοκιμής. Δεν επιτρέπεται η χρήση της μέσης συγκέντρωσης ανά στρώση αντ' αυτού.

5.1 Αξιολόγηση σταθερών ουσιών (μέθοδοι αξιολόγησης)

Οι σχετικοί συντελεστές διάχυσης και κατανομής καθορίζονται συνήθως σύμφωνα με τις μεθόδους αξιολόγησης. Το παράρτημα 2 περιέχει πιθανές μεθόδους αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης και το παράρτημα 3 περιέχει πιθανές μεθόδους αξιολόγησης για τους συντελεστές κατανομής. Παρατίθενται οι βιβλιογραφικές αναφορές των μεθόδων αξιολόγησης. Δεν παρέχεται λεπτομερής περιγραφή των μεθόδων αξιολόγησης.

Οι παράμετροι των μεθόδων αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης και κατανομής υπολογίζονται με παρεμβολή σταθερών ουσιών που προσδιορίζονται πειραματικά.

Επικυρωμένες παράμετροι των μεθόδων αξιολόγησης για τον προσδιορισμό των συντελεστών διάχυσης και κατανομής περιλαμβάνονται στις βιβλιογραφικές παραπομπές.

5.2 Προσθήκη περαιτέρω μεθόδων αξιολόγησης για ορισμένα πολυμερή

Για να συμπληρωθούν οι περαιτέρω μέθοδοι αξιολόγησης ή οι παράμετροι για πρόσθετα πολυμερή, πρέπει να αποδεικνύεται ότι η μέθοδος αξιολόγησης είναι σε θέση να αναπαράγει με επαρκή ακρίβεια τους πραγματικούς, πειραματικά προσδιοριζόμενους συντελεστές διάχυσης ή κατανομής. Η επικύρωση αφορά συγκεκριμένα υλικά. Πρέπει να διατίθενται τουλάχιστον 15 πειραματικοί προσδιορισμοί του συντελεστή διάχυσης/κατανομής για το υπό εξέταση πολυμερές. Τα αποτελέσματα πρέπει να είναι διαθέσιμα για τουλάχιστον 5 μεταναστεύουσες ουσίες με διαφορετικές φυσικοχημικές ιδιότητες και 3 διαφορετικές θερμοκρασίες στο φάσμα θερμοκρασίας 20 °C έως 85 °C για το υπό εξέταση πολυμερές.

Για την επικύρωση, οι συντελεστές πειραματικής διάχυσης ή κατανομής, λογαριθμικά στη βάση 10, απεικονίζονται στον άξονα των x σε σχέση με τους συντελεστές διάχυσης ή κατανομής, λογαριθμικά στη βάση 10, που προκύπτουν από την αντίστοιχη μέθοδο αξιολόγησης. Η απεικόνιση εκτελείται για κάθε σύνολο παραμέτρων, καθώς πρέπει να παρατίθενται στο αντίστοιχο παράρτημα.

Η αντίστοιχη μέθοδος αξιολόγησης θα πρέπει να δημοσιεύεται σε επιστημονικό περιοδικό, κατά προτίμηση ανοικτής πρόσβασης.

5.3 Εφαρμογή της αριθμητικής μεθόδου (αριθμητικός αλγόριθμος)

Η μετανάστευση υπολογίζεται με τη χρήση αριθμητικού αλγορίθμου για την επίλυση της διαφορικής εξίσωσης του 2ου νόμου του Fick (βλ. κεφάλαια 3 και 4). Οι παραπομπές για την επίλυση του 2ου νόμου του Fick παρατίθενται στο κεφάλαιο 8.

5.3.1 Επιλογή του κατάλληλου αλγόριθμου (επίπεδου ή κυλινδρικού)

Ανάλογα με τη γεωμετρία του δείγματος, μια αριθμητική μέθοδος (αλγόριθμος· βλέπε 4) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη μαθηματική εκτίμηση της μετανάστευσης από επίπεδες ή κυλινδρικές μονοστρωματικές ή πολυστρωματικές οργανικές ύλες και προϊόντα που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό. Και οι δύο αλγόριθμοι μπορούν να ενσωματωθούν σε ένα λογισμικό. Για την επιλογή του αλγόριθμου (επίπεδου ή κυλινδρικού) και των απαραίτητων παραμέτρων εισόδου, ακολουθούνται τα κεφάλαια 5 και 5.1. Πρέπει να τηρούνται τα όρια των μεθόδων αξιολόγησης για τις αναγκαίες σταθερές των ουσιών.

5.3.2 Εφαρμογή των προαναφερόμενων μεθόδων αξιολόγησης των παραρτημάτων 2 και 3

Εάν χρησιμοποιούνται οι μέθοδοι αξιολόγησης του παραρτήματος 2 ή 3 για τον υπολογισμό της μετανάστευσης, κατά τον υπολογισμό της μετανάστευσης λαμβάνονται υπόψη οι ακόλουθες συνθήκες:

- ▶ Η μαθηματική εκτίμηση της μετανάστευσης πρέπει να βασίζεται σε αναγνωρισμένη επιστημονική μέθοδο (βιβλιογραφικές παραπομπές στα παραρτήματα 2 και 3 ή πρόσφατα δημοσιευμένη μέθοδος/παραμέτροι σε ανοικτή πρόσβαση).
- ▶ Οι εκτιμώμενες συγκεντρώσεις της υπό αξιολόγηση περιόδου μετανάστευσης πρέπει να υπερεκτιμώνται συστηματικά.

Σημείωση: Εάν οι υπολογιζόμενες συγκεντρώσεις υπερεκτιμώνται συνεχώς σημαντικά, το τελικό αποτέλεσμα οδηγεί σε υποεκτίμηση της μετανάστευσης.

Προσέγγιση λύσης για ιδιαίτερα υπερεκτιμημένες παραμέτρους: Στη βάση αξιολόγησης ΚΤW, η 3η ή 9η περίοδος δοκιμής χρησιμοποιείται για τη δοκιμή κρύου νερού και η 7η ή 22η περίοδος δοκιμής για τη δοκιμή ζεστού και καυτού νερού για τους σκοπούς της αξιολόγησης. Η υπερεκτίμηση του υπολογισμού για την πρώτη περίοδο δοκιμής μπορεί να οδηγήσει σε υποεκτίμηση του υπολογισμού για την τελευταία περίοδο δοκιμής, όταν συγκρίνεται απευθείας με την πραγματική μεταναστευτική συμπεριφορά. Μετά από προσεκτικότερη εξέταση, η υποεκτίμηση αυτή μπορεί να προκύψει μόνον εάν έχει υπολογιστεί μαθηματικά υπερεκτίμηση και πάνω από το 20 % στους 23 °C ή περισσότερο από 10 % στους 60 °C και στους 85 °C της συνολικής ουσίας που περιέχεται στο οργανικό υλικό μεταφέρεται στο πόσιμο νερό κατά την πρώτη 24ωρη περίοδο στασιμότητας (προκατεργασία των δειγμάτων στη δοκιμή μετανάστευσης). Τα σενάρια αυτά είναι εύκολο να προσδιοριστούν από την προσομοίωση. Η πρώτη προσομοιωμένη περίοδος δοκιμής θα πρέπει στη συνέχεια να χρησιμοποιείται ως συναφής για την αξιολόγηση της μεταφοράς μάζας.

Τα αποτελέσματα του υπολογισμού της μετανάστευσης και οι χρησιμοποιούμενες παράμετροι εισόδου τους ελέγχονται ως προς τη λογικότητα, με περιγραφή των ακόλουθων πληροφοριών στην έκθεση μοντελοποίησης:

- ▶ Έγγραφα που χρησιμοποιούνται, ιδίως όταν χρησιμοποιούνται μέθοδοι αξιολόγησης σύμφωνα με το σημείο 5.3.3.
- ▶ Για κάθε υπολογισμό, οι παραδοχές που γίνονται πρέπει να είναι εύλογες και κατανοητές (πηγή ή αιτιολόγηση).
- ▶ Το ισοζύγιο μάζας (βλ. 4.1), υπολογιζόμενο με τη χρήση αριθμητικής μεθόδου, πρέπει να είναι μικρότερο από το 1 % της αρχικής ποσότητας της ουσίας (άθροισμα της ποσότητας της μεταναστεύουσας ουσίας σε όλες τις στρώσεις πολυμερών πριν από τη μοντελοποίηση και σε όλες τις στρώσεις, συμπεριλαμβανομένων των υδάτινων στρωμάτων όλων των κύκλων μετανάστευσης μετά τη μοντελοποίηση).
- ▶ Σε περίπτωση αμφιβολίας, συνιστάται κατάλληλη πειραματική μέτρηση για τους ελέγχους λογικότητας προς υποστήριξη της διενεργηθείσας αξιολόγησης.

Ο έλεγχος λογικότητας για τη μαθηματική εκτίμηση της μετανάστευσης πρέπει να αποτελεί μέρος της έκθεσης μοντελοποίησης.

5.3.3 Χρήση μεθόδων αξιολόγησης άλλων από εκείνες που απαριθμούνται στα παραρτήματα 2 και 3

Εάν χρησιμοποιούνται μέθοδοι αξιολόγησης που δεν περιλαμβάνονται στις βιβλιογραφικές παραπομπές του παραρτήματος 2 και του παραρτήματος 3, πέραν των ανωτέρω κριτηρίων του σημείου 5.3.2, αυτές πρέπει να ελέγχονται και να τεκμηριώνονται ιδίως όσον αφορά τη λογικότητα των παραμέτρων εισόδου. Αυτό ισχύει επίσης για τις μεθόδους αξιολόγησης για υλικούς φορείς, συνθήκες ή ουσίες για τις οποίες δεν υπάρχουν εφαρμοστέες παράμετροι.

6 Αποτελέσματα μοντελοποίησης

Διατίθενται διάφορες λύσεις λογισμικού για την εφαρμογή της μοντελοποίησης.

Αντί αναλυτικής έκθεσης που περιέχει τα αποτελέσματα των δοκιμών σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12873-1/-2, πρέπει να συντάσσεται κατάλληλη έκθεση μοντελοποίησης, η οποία θα περιέχει τα δεδομένα εισόδου, τις παραμέτρους αξιολόγησης που χρησιμοποιήθηκαν, το λογισμικό που χρησιμοποιήθηκε και τις προσομοιωμένες συγκεντρώσεις στην αντίστοιχη στρώση πολυμερούς (c_{PC}) και το νερό μετανάστευσης για κάθε περίοδο μετανάστευσης ($c_{calculated}$). Επιπλέον, απαιτούνται πληροφορίες (βλ. έκθεση δοκιμής σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12873-1/-2) σχετικά με το ποια πολυμερή και δείγματα καλύφθηκαν από τη μοντελοποίηση.

Ο έλεγχος λογικότητας σύμφωνα με τα σημεία 5.3.2 ή 5.3.3 αποτελεί μέρος της έκθεσης μοντελοποίησης.

Τα αποτελέσματα των υπολογιζόμενων συγκεντρώσεων κατά τις περιόδους μετανάστευσης αναφέρονται ως μέσος όρος με την ενσωμάτωση του προφίλ συγκέντρωσης για κάθε στρώση.

Τα αποτελέσματα της μετανάστευσης της περιόδου μετανάστευσης που σχετίζονται με την αξιολόγηση πρέπει να κανονικοποιούνται στη συγκέντρωση βρύσης c_{tap} , λαμβανομένων υπόψη των συνθηκών μετανάστευσης (λόγος επιφάνειας/όγκου και χρόνος) και του συντελεστή μετατροπής για την κατηγορία προϊόντων F_c .

Το c_{tap} συγκρίνεται με το MTC_{tap} του θετικού καταλόγου για την υπό εξέταση ουσία.

Εάν το υπολογιζόμενο c_{tap} είναι πάνω από την τιμή MTC_{tap} , η συμμόρφωση με τον περιορισμό μετανάστευσης μπορεί να αποδειχθεί με τον πειραματικό προσδιορισμό. Οι υπολογιζόμενες συγκεντρώσεις του νερού μετανάστευσης για όλες τις περιόδους χρησιμοποιούνται για την αξιολόγηση της απαίτησης της βάσης αξιολόγησης ΚΤW «καμία αυξητική τάση». Η αξιολόγηση της μη αυξητικής τάσης στις υπολογιζόμενες συγκεντρώσεις για μεμονωμένες μεταναστευτικές ουσίες διενεργείται σύμφωνα με τις διατάξεις του ΚΤW-BWGL στο κεφάλαιο 5.5.2.

7 Παραπομπές για τη λύση του 2ου νόμου του Fick

Roduit, B., Borgeat, C.H, Cavin, S., Fragniere, C. & Dudler, V. (2005). Application of Finite Element Analysis (FEA) for the simulation of release of additives from multilayer polymeric packaging structures. *Food Additives and Contaminants* 22(10): 945-955. (Εφαρμογή ανάλυσης πεπερασμένου στοιχείου για την προσομοίωση απελευθέρωσης πρόσθετων από δομές συσκευασίας πολυστρωματικών πολυμερών. Πρόσθετα και μολυσματικές προσμίξεις τροφίμων 22(10):945-955).

Tosa, V., Kovacs, K., Mercea, P & Piringer, O. (2008). A Finite Difference Method for Modelling Migration of Impurities in Multilayer systems. *Numerical Analysis and Applied Mathematics* 1048: 802 – 805 (Μέθοδος πεπερασμένης διαφοράς για τη μοντελοποίηση της μετανάστευσης προσμίξεων σε πολυστρωματικά συστήματα. Αριθμητική ανάλυση και εφαρμοσμένα μαθηματικά 1048:802 – 805).

Reynier, A., Dole, P.& Feigenbaum, A. (2002). Integrated approach of migration prediction using numerical modelling associated to experimental determination of key parameters. *Food Additives and Contaminants* 19 (Supplement), 42-55 [Ολοκληρωμένη προσέγγιση της πρόβλεψης της μετανάστευσης με τη χρήση αριθμητικής μοντελοποίησης που συνδέεται με τον πειραματικό προσδιορισμό των βασικών παραμέτρων. Πρόσθετα τροφίμων και μολυσματικές προσμίξεις 19 (Συμπλήρωμα), 42 – 55].

Brandsch, R. & Schuster, D. (2020): Repeated use food contact materials: A categorisation approach in support of risk assessment. *Food Additives & Contaminants: Part A*. 37 (12): 2184-22-3 [Υλικά πολλαπλών χρήσεων που έρχονται σε επαφή με τρόφιμα: Προσέγγιση κατηγοριοποίησης για την υποστήριξη της εκτίμησης κινδύνου. Πρόσθετα τροφίμων και μολυσματικές προσμίξεις: Μέρος Α. 37 (12): 2184-22-3]. (DOI: 10.1080/19440049.2020.1798512).

Crank, I.: The Mathematics of Diffusion. (Clarendon Press 2nd edition 1979) [Τα μαθηματικά της διάχυσης. (Clarendon Press 2η έκδοση 1979)]

Tosa, V. & Kovács, K.: Numerical model to solve impurities migration in water pipes. (2009). [Αριθμητικό μοντέλο για την επίλυση της μετανάστευσης προσμίξεων σε αγωγούς νερού. (2009).] Journal Physics: Σειρά συνεδρίων 182. 012042. (για κυλινδρική γεωμετρία).

Παράρτημα 1 Διάγραμμα ροής για την ενσωμάτωση της μοντελοποίησης για την επαλήθευση των ειδικών ανά σύνθεση απαιτήσεων για τις μεμονωμένες ουσίες της βάσης αξιολόγησης KTW



| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Beantragung Zertifikats nach der UBA Empfehlung zur Konformitätsbeurteilung durch produktHersteller | Αίτηση για πιστοποιητικό σύμφωνα με τη σύσταση της UBA για συμμόρφωση των κατασκευαστών προϊόντων |
| Überprüfung der Rezepturbestandteile mit der Positivliste | Έλεγχος των συστατικών της σύνθεσης σε σχέση με τον θετικό κατάλογο |
| Festlegung des Prüfumfanges in Abhängigkeit der Rezeptur und Produktgruppe, Einsatzbereich KW, WW, HW) | Ορισμός του πεδίου εφαρμογής των δοκιμών ανάλογα με τη σύνθεση και την ομάδα προϊόντων, εφαρμογή KW, WW, HW |
| Prüfung (Migrations test) | Δοκιμή (δοκιμή μετανάστευσης) |

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Grundanforderungen, Zusatzanforderungen | Βασικές απαιτήσεις, πρόσθετες απαιτήσεις |
| Rezeptur spezifische Einzelstoff Anforderung MTC | Ειδική ανά σύνθεση απαίτηση MTC για μεμονωμένη ουσία |
| Andere anforderungen:Reinheitsanforderungen,QM,QMA | Άλλες απαιτήσεις: απαιτήσεις καθαρότητας, QM, QMA |
| Experimentelle Überprüfung der MTC tap | Πειραματική επαλήθευση του MTC tap |
| Simulation der Migration | Προσομοίωση της μετανάστευσης |
| nein | όχι |
| Anwendung der Modellierung möglich, <ul style="list-style-type: none"> • Kennwerte für polymere • Migration der Einzelstoffe diffusionsbasiert ja | Πιθανή εφαρμογή της μοντελοποίησης, <ul style="list-style-type: none"> • Παράμετροι για πολυμερή • Μετανάστευση μεμονωμένων ουσιών με βάση τη διάχυση vαι |
| Cp,o vorhanden Ermittlung von Cp,o | Cp,o διαθέσιμος προσδιορισμός Cp,o |
| Methode zur Bestimmung von CP,o | Μέθοδος προσδιορισμού του Cp,o |
| Entwicklung einer geeigneten Analysenmethode | Ανάπτυξη κατάλληλης αναλυτικής μεθόδου |
| Berechnung der Migration des Einzelstoffs mit Hilfe eines anerkannten modellierungs programm | Υπολογισμός της μετανάστευσης της επιμέρους ουσίας με τη χρήση αναγνωρισμένου προγράμματος μοντελοποίησης |
| Überprüfung der Prüfergebnisse mit den einzu haltenden maximal tolerierbaren Konzentrationen | Επαλήθευση των αποτελεσμάτων των δοκιμών με τις μέγιστες ανεκτές συγκεντρώσεις που πρέπει να διατηρούνται |
| Ausstellung eines Prüfberichtes und Beurteilung der Einhaltung der Anforderung | Έκδοση έκθεσης δοκιμής και αξιολόγηση της συμμόρφωσης με την απαίτηση |
| Prüfbericht mit der Beurteilung der Überschreitung der Anforderung | Έκθεση δοκιμής στην οποία αξιολογείται αν έχει γίνει υπέρβαση της απαίτησης |

Παράρτημα 2

Μέθοδοι αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης

Ο συντελεστής διάχυσης μιας ουσίας σε πλαστικό (D_p) είναι μέγεθος που αντικατοπτρίζει την κινητικότητα των μορίων της ουσίας στο οργανικό υλικό. Όσο μεγαλύτερος είναι ο συντελεστής διάχυσης τόσο ταχύτερα μπορεί να μεταφερθεί η ουσία.

Ο συντελεστής διάχυσης D_p μπορεί να προσδιοριστεί πειραματικά ή να υπολογιστεί με τη χρήση θεωρητικού μοντέλου και αλγορίθμου. Για την εκτίμηση του συντελεστή διάχυσης D_p είναι δυνατές διαφορετικές προσεγγίσεις.

Οι λεπτομέρειες των μεθόδων είναι διαθέσιμες στη βιβλιογραφία.

Δεν έχουν ακόμη καθοριστεί συγκεκριμένα ποσοτικά κριτήρια ποιότητας για τις μεθόδους αξιολόγησης. Ως εκ τούτου, ο κατάλογος είναι προσωρινός.

Σημείωση: Στον υπολογισμό της πολλαπλής μετανάστευσης που αντιστοιχεί στις περιόδους στασιμότητας σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12873-1, -2, η χρήση συντηρητικών παραμέτρων μπορεί να οδηγήσει σε υποεκτίμηση του τελικού αποτελέσματος. Ως εκ τούτου, θα πρέπει να χρησιμοποιούνται οι πλέον ρεαλιστικές παράμετροι.

Πίνακας 3: Βιβλιογραφικές παραπομπές για μεθόδους αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης

| Μέθοδος αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης | Βιβλιογραφικές παραπομπές |
|------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| DIN CEN/TR 16364, DIN SPEC 19811:2012-09 | Επίδραση των υλικών στο νερό που προορίζεται για ανθρώπινη κατανάλωση — Επιρροή λόγω μετανάστευσης — Πρόβλεψη της μετανάστευσης από οργανικά υλικά με τη χρήση μαθηματικών μοντέλων· Γερμανική έκδοση του προτύπου CEN/TR 16364:2012 |
| Μέθοδος αξιολόγησης Piringer | Mercea, P.V., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O.G., Tosa, V., Schuster, R. & Sejersen, P. (2018). Modelling migration of substances from polymers into drinking water. Part 1 - Diffusion coefficient estimations. Polymer testing 65: 176-188 (Μοντελοποίηση της μετανάστευσης ουσιών από πολυμερή στο πόσιμο νερό. Μέρος 1 — Εκτιμήσεις συντελεστών διάχυσης. Polymer testing 65:176-188) Mercea, P., Loshier, C., Benz, H., Petrasch, M., Costa, C., Stone, V. W. & Tosa, V. (2021). Migration of substances from unplasticised polyvinyl chloride into drinking water. Estimation of conservative diffusion coefficients. Polymer testing 104: 107385. (Μετανάστευση ουσιών από το μη πλαστικοποιημένο πολυβινυλοχλωρίδιο στο πόσιμο νερό. Εκτίμηση των συντηρητικών συντελεστών διάχυσης. Polymer testing 104:107385.) Begley, T., Castle, L., Feigenbaum, A., Franz, R., Hinrichs, K., |

| Μέθοδος αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης | Βιβλιογραφικές παραπομπές |
|----------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | <p>Lickly, T., Mercea, P., Milana, M., O'Brien, A., Rebre, S., Rijk, R. & Piringer, O. (2005). Evaluation of migration models that might be used in support of regulations for food-contact plastics. <i>Food Additives and Contaminants</i> 22(1): 73-90. [Αξιολόγηση των μοντέλων μετανάστευσης που θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν για την υποστήριξη των κανονισμών για τα πλαστικά που έρχονται σε επαφή με τρόφιμα. Πρόσθετα και μολυσματικές προσμίξεις τροφίμων 22(1):73-90.]</p> |
| Μέθοδος αξιολόγησης Brandsch | <p>Brandsch, R. (2017). Probabilistic migration modelling focused on functional barrier efficiency and low migration concepts in support of risk assessment. <i>Food Additives and Contaminants</i> 34: 1743-1766. [Πιθανοτική μοντελοποίηση της μετανάστευσης επικεντρωμένη στην αποδοτικότητα των λειτουργικών φραγμών και στις έννοιες της χαμηλής μετανάστευσης για την υποστήριξη της εκτίμησης κινδύνου. Πρόσθετα και μολυσματικές προσμίξεις τροφίμων 34:1743-1766.]</p> |
| Μέθοδος αξιολόγησης Welle | <p>Welle, F. (2013). A new method for the prediction of diffusion coefficients in Poly(ethylene terephthalate). <i>Journal of Applied Polymer Science</i> 129 (4): 1845-1851. [Νέα μέθοδος για την πρόβλεψη των συντελεστών διάχυσης στο πολυ(τερεφθαλικό αιθυλένιο). <i>Journal of Applied Polymer Science</i> 129 (4):1845-1851.]</p> <p>Ewender, J. & Welle, F. (2013). Determination of the Activation Energies of Diffusion of Organic Molecules in Poly(ethylene terephthalate). <i>Journal of Applied Polymer Science</i> 128 (6): 3885-3892 [Προσδιορισμός της ενέργειας ενεργοποίησης της διάχυσης οργανικών μορίων στο πολυ(τερεφθαλικό αιθυλένιο). <i>Journal of Applied Polymer Science</i> 128 (6):3885-3892]</p> <p>Welle, F. (2014). Activation energies of diffusion of organic migrants in cycloolefin polymer. <i>International Journal of Pharmaceutics</i> 473(1): 510-517. [Ενέργεια ενεργοποίησης της διάχυσης οργανικών μεταναστών στο πολυμερές κυκλοολεφίνης. <i>International Journal of Pharmaceutics</i> 473 (1):510-517.]</p> <p>Ewender, J. & Welle, F. (2019). Diffusion Coefficients of n-Alkanes and 1-Alcohols in Polyethylene Naphthalate (PEN). [Συντελεστές διάχυσης n-αλκάνια και 1-αλκοόλες σε ναφθαλικό πολυαιθυλένιο (PEN).] <i>International Journal of Polymer Science</i> 2019: 9.</p> <p>Welle, F. (2021). Diffusion Coefficients and Activation Energies of Diffusion of Organic Molecules in Polystyrene below and above Glass Transition Temperature. <i>Polymers</i> 13(8): 1317. (Συντελεστές διάχυσης και ενέργεια ενεργοποίησης της διάχυσης οργανικών μορίων στο πολυστυρένιο κάτω και πάνω από τη θερμοκρασία μετάβασης του γυαλιού. <i>Polymers</i> 13(8):1317.)</p> |

| Μέθοδος αξιολόγησης των συντελεστών διάχυσης | Βιβλιογραφικές παραπομπές |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| | Kaiser, K.M.A., Ewender, J. & Welle, F. (2020). Recyclable Multilayer Packaging by Means of Thermoreversibly Crosslinking Adhesive in the Context of Food Law. <i>Polymers (Basel)</i> 12(12). |
| JRC [Ανακυκλώσιμες πολυστρωματικές συσκευασίες μέσω θερμοαναστρέψιμης διασύνδεσης στο πλαίσιο της νομοθεσίας για τα τρόφιμα. <i>Polymers (Βασιλεία)</i> 12(12). JRC] | Brandsch, R., Dequatre, C., Mercea, P., Milana, M., Stoermer, A., Trier, X., Vitrac, O., Schaefer, A. & Simoneau, C. Practical guidelines on the application of migration modelling for the estimation of specific migration. (Πρακτικές κατευθυντήριες γραμμές για την εφαρμογή μοντέλων μετανάστευσης για την εκτίμηση της ειδικής μετανάστευσης.) EUR 27529. Λουξεμβούργο: Υπηρεσία Εκδόσεων της Ευρωπαϊκής Ένωσης· 2015. JRC98028 https://publications.jrc.ec.europa.eu/repository/handle/JRC98028 |
| Μέθοδος αξιολόγησης Huang | Huang, L., Fantke, P., Ernstoff, A. & Jolliet, O. A quantitative property-property relationship for the internal diffusion coefficients of organic compounds in solid materials. <i>Indoor Air</i> 2017; 27: 1128-1140. [Ποσοτική σχέση ιδιότητας με ιδιότητα για τους συντελεστές εσωτερικής διάχυσης οργανικών ενώσεων σε στερεά υλικά. <i>Indoor Air</i> 2017· 27:1128-1140.] |

Παράρτημα 3 Μέθοδοι αξιολόγησης των συντελεστών κατανομής

Ο συντελεστής κατανομής μιας ουσίας μεταξύ δύο μη αναμειγμάτων (K) είναι μέγεθος που εκφράζει τον λόγο των συγκεντρώσεων ισορροπίας c_{eq} της ουσίας στα δύο αυτά μέσα.

Όσο μεγαλύτερη απόκλιση του K από το 1, τόσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά διαλυτότητας στα δύο μέσα. Κατά τη διάρκεια της μοντελοποίησης της μετανάστευσης για τα πλαστικά που έρχονται σε επαφή με το πόσιμο νερό, μπορεί να γίνει μια βασική διάκριση μεταξύ δύο τύπων συντελεστών K:

Αφενός, πρόκειται για τον συντελεστή κατανομής K_{P-W} της μεταναστεύουσας ουσίας μεταξύ του πλαστικού και του πόσιμου νερού.

Από την άλλη πλευρά, στην περίπτωση πλαστικού ή άλλου βιολογικού προϊόντος που αποτελείται από διάφορες (διαφορετικές) στρώσεις, υπάρχουν οι συντελεστές κατανομής K_{P-P} μεταξύ των στρώσεων αυτού του προϊόντος. Και οι δύο τύποι συντελεστών κατανομής μπορούν να προσδιοριστούν πειραματικά ή να αξιολογηθούν με τη χρήση θεωρητικού μοντέλου και αλγορίθμου.

Στον πίνακα που ακολουθεί παρατίθενται οι πιθανές μέθοδοι αξιολόγησης με βιβλιογραφικές παραπομπές.

Δεν έχουν ακόμη καθοριστεί συγκεκριμένα ποσοτικά κριτήρια ποιότητας για τις μεθόδους αξιολόγησης. Ως εκ τούτου, ο κατάλογος είναι προσωρινός.

Σημείωση 1: Στον υπολογισμό της πολλαπλής μετανάστευσης που αντιστοιχεί στις περιόδους στασιμότητας σύμφωνα με το πρότυπο DIN EN 12873-1, — 2, η

χρήση συντηρητικών παραμέτρων μπορεί να οδηγήσει σε υποεκτίμηση του τελικού αποτελέσματος. Ως εκ τούτου, θα πρέπει να χρησιμοποιούνται οι πλέον ρεαλιστικές παράμετροι.

Σημείωση 2: Εάν είναι γνωστοί συντελεστές κατανομής, π.χ. δύο πολυμερών σε σύγκριση με τον ίδιο υλικό φορέα (π.χ. νερό ή αέρας), ο συντελεστής κατανομής μεταξύ των δύο πολυμερών μπορεί να υπολογιστεί διαιρώντας τους δύο συντελεστές κατανομής στον ίδιο υλικό φορέα.

Πίνακας 4: Βιβλιογραφικές παραπομπές για τις μεθόδους αξιολόγησης των συντελεστών κατανομής

| Μέθοδοι αξιολόγησης των συντελεστών κατανομής | Βιβλιογραφικές παραπομπές |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| DIN CEN/TR 16364, DIN SPEC 19811:2012-09 | Επίδραση των υλικών στο νερό που προορίζεται για ανθρώπινη κατανάλωση — Επιρροή λόγω μετανάστευσης — Πρόβλεψη της μετανάστευσης από οργανικά υλικά με τη χρήση μαθηματικών μοντέλων· Γερμανική έκδοση του προτύπου CEN/TR 16364:2012 |
| Μέθοδος αξιολόγησης Fabes | Baner, A. & Piringer O., (2008). «Partition coefficients» (Συντελεστές κατανομής) στο «Plastic Packaging-Interactions with Food and Pharmaceuticals» Eds. Piringer O.G., Baner, A.L., Wiley-VCH, Weinheim. Mercea, P., Kalisch, A., Ulrich, M., Benz, H., Piringer, O., Tosa, V., Schuster, R. & Sejersen, P., (2019). «Modelling migration of substances from polymers into drinking water. Part 2 - Partition coefficient estimations», Polymer Testing 76: 420-432. («Μοντελοποίηση της μετανάστευσης ουσιών από τα πολυμερή στο πόσιμο νερό. Μέρος 2 — Εκτιμήσεις συντελεστών κατανομής», Polymer Testing 76:420-432.) |
| Μέθοδος Flory-Huggins | Vitrac, O. & Gillet, G., (2008). Prediction of partition coefficients between food simulants and packaging materials using molecular simulation and a generalised Flory-Huggins approach, 18th European Symposium on Computer Aided Process-Engineering, Eds, Braunschweig, B., Xavier, J., Elsevier, Amsterdam. (Πρόβλεψη συντελεστών κατανομής μεταξύ προσομοιωτών τροφίμων και υλικών συσκευασίας με τη χρήση μοριακής προσομοίωσης και γενικευμένης προσέγγισης Flory-Huggins, 18ο ευρωπαϊκό συμπόσιο για τη μηχανική με τη βοήθεια υπολογιστών, Eds, Braunschweig, B., Xavier, J., Elsevier, Άμστερνταμ.) |
| Συσχέτιση μεταξύ του συντελεστή κατανομής και του λογαριθμικού συντελεστή οκτανόλης/νερού | Asako Ozaki, A., Gruner, A., Störmer, A., Brandsch, R., & Franz, R. (2010). Correlation between Partition Coefficients Polymer/Food Simulant, $K_{p,F}$, and Octanol/Water, $\log P_{ow}$ - a New Approach in support of Migration Modelling and Compliance Testing, DLR 106: 203-208 (Συσχέτιση μεταξύ των συντελεστών κατανομής πολυμερούς/προσομοιωτή τροφίμων, $K_{p,F}$ και οκτανόλης/νερού, $\log P_{ow}$ — Μια νέα προσέγγιση για τη στήριξη της μοντελοποίησης της μετανάστευσης και των δοκιμών συμμόρφωσης, DLR |

| Μέθοδοι αξιολόγησης των συντελεστών κατανομής | Βιβλιογραφικές παραπομπές |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>Abraham-type linear solvation energy relationships (Ενεργειακές σχέσεις γραμμικής μόνωσης τύπου Abraham)</p> <p>Quantitative property-property relationship (QPPR) [Ποσοτική σχέση ιδιότητας με ιδιότητα (QPPR)]</p> | <p>106:203-208) Pintado-Herrera, M.G., Lara-Martin, P.A., Gonzalez-Mazo, E. & Allan, I.J. (2016). Determination of silicone rubber and low-density polyethylene diffusion and polymer/water partition coefficients for emerging contaminants. <i>Environmental Toxicology and Chemistry</i> 35(9): 2162-2172. [Προσδιορισμός του ελαστικού από σιλικόνη και της διάχυσης πολυαιθυλενίου χαμηλής πυκνότητας και των συντελεστών κατανομής πολυμερών/νερού για αναδυόμενες προσμίξεις. <i>Environmental Toxicology and Chemistry</i> 35(9):2162-2172.]</p> <p>Egert, T. & Langowski, H.-C. (2022). Linear Solvation Energy Relationships (LSERs) for Robust Prediction of Partition Coefficients between Low Density Polyethylene and Water Part I: Experimental Partition Coefficients and Model Calibration. <i>European Journal of Pharmaceutical Sciences</i> 172: 106137. [Ενεργειακές σχέσεις γραμμικής μόνωσης (LSERs) για την πρόγνωση της τάσης των συντελεστών κατανομής μεταξύ πολυαιθυλενίου χαμηλής πυκνότητας και νερού Μέρος I: Πειραματικοί συντελεστές κατανομής και βαθμονόμηση μοντέλου. <i>European Journal of Pharmaceutical Sciences</i> 172:106137.]</p> <p>Egert, T. & Langowski, H.-C. (2022). «Linear solvation energy relationships (LSERs) for robust prediction of partition coefficients between low-density polyethylene and water. Part II: Model evaluation and benchmarking.» <i>European Journal of Pharmaceutical Sciences</i> 172: 106138. [Γραμμικές ενεργειακές σχέσεις μόνωσης (LSERs) για αξιόπιστη πρόβλεψη των συντελεστών κατανομής μεταξύ πολυαιθυλενίου χαμηλής πυκνότητας και νερού. Μέρος II: Αξιολόγηση μοντέλων και συγκριτική αξιολόγηση. <i>European Journal of Pharmaceutical Sciences</i> 172:106138.]</p> <p>Huang, L & Jolliet, O. (2019). A combined quantitative property-property relationship (QPPR) for estimating packaging-food and solid material-water partition coefficients of organic compounds. <i>Science of The Total Environment</i> 658: 493-500. [Συνδυασμένη ποσοτική σχέση ιδιότητας με ιδιότητα (QPPR) για την εκτίμηση των συντελεστών κατανομής των οργανικών ενώσεων μεταξύ συσκευασίας και τροφίμων και στερεού υλικού και νερού. <i>Science of The Total Environment</i> 658:493-500.]</p> |