

*Розглянуто питання визначення вільної енергії модельної термодинамічної системи на підставі класичної функції розподілу Максвелла для енергії молекул води. Запропоновано методіку теоретичної оцінки енергоефективності процесів сушіння харчової сировини*

*Ключові слова: термодинамічна система, функція розподілу*

*Rассмотрен вопрос определения свободной энергии модельной термодинамической системы на основании классической функции распределения Максвелла для энергии молекул воды. Предложена методика теоретической оценки энергоэффективности процессов сушки пищевого сырья*

*Ключевые слова: термодинамическая система, функция распределения*

*The question of determination of free energy of the model thermodynamics system is considered on the basis of classic function of Maxwell distributing for energy of molecules of water. The method of theoretical estimation of energy efficiency of processes of drying of food raw material is offered*

*Keywords: thermodynamics system, distributing function*

# ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНО- КИНЕТИЧЕСКОГО МЕТОДА К МОДЕЛИРОВАНИЮ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОГО ПРОЦЕССА СУШКИ

**Н. М. Цуркан**

Кандидат технических наук, доцент

Кафедра энергетики и физики

Харьковский государственный университет

питания и торговли

ул. Клочковская, 333, г. Харьков, Украина, 61051

Контактный тел.: (057) 349-45-86, 095-696-47-77

E-mail: tsurkan\_n@ukr.net

## Постановка проблемы в общем виде

Процессы сушки разнообразного пищевого сырья являются одними из наиболее энергозатратных технологических процессов пищевой промышленности независимо от способа их реализации, поэтому поиск путей повышения энергоэффективности процессов сушки рядом с другими технологическими процессами в пищевой промышленности является приоритетной проблемой для отраслевой науки.

Для успешного решения данной проблемы, прежде всего, необходимы соответствующие теоретические исследования процессов сушки на примере определенных физических и математических моделей, которые дадут возможность описывать реальные тепломассообменные процессы на основе соответствующих функциональных зависимостей и, таким образом, управлять процессом с целью достижения его максимальной энергоэффективности.

## Анализ последних исследований и публикаций

Работа является продолжением теоретических исследований процессов сушки пищевого сырья в рам-

ках научной концепции, в соответствии с которой процесс сушки являет собой эволюцию определенной термодинамической системы с некоторого начального неравновесного состояния до состояния равновесия, которое отвечает окончанию процесса. Каждое обезвоживаемое тело можно представить как определенную термодинамическую систему, которая имеет индивидуальное начальное распределение молекул воды по определенным энергетическим уровням, которые определяются соответствующими формами связи с «сухим скелетом». Процесс сушки, таким образом, представляет собой эволюцию во времени соответствующих функций распределения, которым отвечает некоторое значение определенного термодинамического потенциала [1].

## Цели и задачи статьи

Целью работы является теоретическое моделирование поведения влаги в обезвоживаемом пищевом сырье с целью последующего определения наиболее энергоэффективного пути реализации процесса сушки.

**Изложение основного материала исследований**

В первом приближении будем исходить из общепринятой классификации влаги по уровням энергии связи молекул воды с «сухим скелетом» и разделим воду, содержащуюся в материале, на «свободную» и «связанную». Представим, что молекулы связанной воды находятся в некоторых «потенциальных полях» с различной энергией связи, которые характеризуются определенным удельным потенциалом. Молекулы свободной воды, имеют «нулевую» (или минимальную) энергию связи с «сухим скелетом» материала.

Таким образом, молекулы свободной воды в состоянии динамического равновесия осуществляют «броуновское тепловое движение», которое согласно Эйнштейну характеризуется определенным коэффициентом диффузии  $D$  [2]:

$$D = \beta kT, \tag{1}$$

где  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – термодинамическая температура,  $K$ ;  $\beta$  – подвижность молекулы, определяемая в общем случае как отношение скорости молекулы к действующей на нее силе, зависящей от координат  $\beta = v/K$ . Для случая действия постоянной силы трения в жидкости с коэффициентом трения  $\eta$  и радиусом молекулы  $a$  подвижность  $\beta$  равна:

$$\beta = \frac{1}{6\pi\eta a} \tag{2}$$

Формула (1) получена Эйнштейном для случая равновесного состояния молекулярной системы, которое определяется условием равенства нулю вариации ее свободной энергии  $\delta F = 0$ . Однако, в случае, когда молекула находится в некотором потенциальном поле, изменение ее свободной энергии будет равняться работе по преодолению определенного «потенциального барьера», который характеризуется удельным потенциалом  $u(x)$  на одну молекулу.

Пусть на каждую молекулу действует сила, зависящая от координат  $K$ , объемная концентрация молекул равна  $n$ , которая также является функцией координат. Для простоты рассмотрим одномерный случай (сила действует вдоль оси  $x$ ). Тогда вариация свободной энергии  $\delta F$  для произвольного перемещения молекул  $\delta x$  равна:

$$\delta F = \delta E - T\delta S = u\delta n \tag{3}$$

Запишем выражения для вариаций внутренней энергии  $\delta E$ , энтропии  $\delta S$  и концентрации  $\delta n$  при условии, что молекулы воды ограничены плоскостями  $x = 0$  и  $x = l$ , а сечение поверхности перпендикулярное оси  $X$  равно единице:

$$\delta E = - \int_0^l K n \delta x dx \tag{4}$$

$$\delta S = \int_0^l \frac{R \cdot n}{N} \frac{\partial \delta x}{\partial x} dx = - \frac{R}{N} \int_0^l \frac{\partial n}{\partial x} \delta x dx \tag{5}$$

$$\delta n = \int_0^l \frac{\partial n}{\partial x} \delta x dx \tag{6}$$

Исходя из полученных выражений, перепишем уравнение (3) в виде:

$$-K \cdot n + \frac{RT}{N} \frac{\partial n}{\partial x} = u \frac{\partial n}{\partial x} \text{ или } -K \cdot n + \left( \frac{RT}{N} - u \right) \frac{\partial n}{\partial x} = 0 \tag{7}$$

Если принять в модели, что молекулы воды имеют сферическую форму радиусом  $a$  и движутся в среде с коэффициентом внутреннего трения  $\eta$ , то скорость молекул, которые движутся под действием силы  $K$ , согласно закону Стокса, будет равна:

$$v = \frac{K}{6\pi\eta a} \tag{8}$$

Следовательно, поток молекул  $J$  под действием силы  $K$  через единицу сечения и в единицу времени будет равен

$$J = v \cdot n = \frac{K \cdot n}{6\pi\eta a} \tag{9}$$

С другой стороны, вследствие диффузии, встречный поток равен:

$$J_D = -D \frac{\partial n}{\partial x} \tag{10}$$

где  $D$  – коэффициент диффузии.

Таким образом, при условии динамического равновесия, имеем:

$$\frac{K \cdot n}{6\pi\eta a} - D \frac{\partial n}{\partial x} = 0 \tag{11}$$

Сравнивая выражения (7) и (11) можем записать зависимость для коэффициента диффузии в виде:

$$D = \frac{1}{6\pi\eta a} \left( \frac{RT}{N} - u \right) = \beta \cdot \left( \frac{RT}{N} - u \right) \tag{12}$$

При условии  $N = N_A$  – числу Авогадро, выражение (12) запишем в виде:

$$D = \beta \cdot (kT - u) \tag{13}$$

Анализируя полученное выражение, можно произвести «нормировку» коэффициента диффузии следующим образом: при отсутствии потенциального взаимодействия ( $u = 0$ ) формула (13) переходит в (1), и, следовательно,  $D = \max$  (случай «свободной воды»), при максимальном потенциале взаимодействия -  $u = kT$  коэффициент  $D = 0$ , молекулы «прилипают к потенциальной стенке», т. е. энергия связи - максимальная.

Предположим, в первом приближении, что величина  $(kT - u)$ , соответствует кинетической энергии  $E$  молекулы массой  $m$ , движущейся в некотором потенциальном поле со скоростью  $v$ :

$$E = \frac{mv^2}{2} = kT - u . \quad (14)$$

В таком случае, когда потенциальное взаимодействие учтено, для таких молекул мы можем применить классическое распределение Максвелла, согласно которому вероятность нахождения молекулы с энергией  $E$  в элементе  $dx$  равна (для одномерного случая):

$$dW(x) = A \cdot f(x)dx = Ae^{-\frac{E}{kT}}dx \quad (15)$$

где  $A$  – константа, определяемая из условия нормировки;

$f(x) = e^{-E/kT}$  – функция распределения или плотность

вероятности.

Конкретный вид функции  $f(x)$  дает нам возможность вычислить интеграл состояний или статистический интеграл  $Z$ :

$$Z = \int_{x_0}^x e^{-\frac{E}{kT}} dx , \quad (16)$$

который является, таким образом, функцией состояния, зависящей в данном случае от  $T$  и  $u(x)$ .

Далее, зная интеграл состояний  $Z$ , вычисляем удельную свободную энергию молекул  $\psi$  вблизи определенной потенциальной поверхности, которая характеризуется значением  $u(x)$ :

$$\psi = -kT \ln Z \quad (17)$$

По известному значению  $\psi$  определяем свободную энергию начального ( $\Psi_0$ ) и конечного состояния модельной термодинамической системы ( $\Psi_K$ ) или не-

которых промежуточных состояний, которые будут аддитивно складываться из свободной энергии определенных подсистем, характеризующимися значением  $u(x)$ .

Поскольку, исходя из концепции, процесс сушки представляет собой переход определенной термодинамической системы из состояния со значением термодинамического потенциала  $\Psi_0$  в состояние с потенциалом  $\Psi_K$ , то максимальная работа затрачиваемая на процесс  $A_{max}$  будет определяться следующим выражением:

$$A_{max} = \Psi_0 - \Psi_K . \quad (18)$$

Принимая  $A_{max}$  за эталонное значение энергетических затрат на процесс, введем коэффициент энергоэффективности процесса  $K_{эф}$  в виде отношения

$$K_{эф} = \frac{A_{max}}{A} < 1 \quad (19)$$

где  $A$  – значение реальных энергозатрат на процесс.

Сравнительный анализ  $K_{эф}$  различных вариантов реализации процесса позволяет определить наиболее энергоэффективный процесс ( $K_{эф} = \max$ ) для конкретного вида пищевого сырья.

---

### Выводы

---

Таким образом, на основании предложенной теоретической модели поведения влаги в обезвоживаемом сырье разработана методика определения термодинамического потенциала (свободной энергии) модельной термодинамической системы и коэффициента энергоэффективности процесса сушки для конкретного вида сырья.

---

### Литература

1. Потапов В. А. О механизме влияния СВЧ-поля на структуру влаги в процессе сушки. [Текст] / В. А. Потапов., Н. М. Цуркан // Нестационарные, энерго- и ресурсосберегающие процессы и оборудование химической, нано- и биотехнологии – НЭР-ПО-2011: Материалы конференции (Тексты докладов и аннотации) / под общ. ред. Г.И. Ефремова. – М.: Изд-во МГОУ, 2011. – с. 204-209
2. Эйнштейн А. Брауновское движение. [Текст] / А. Эйнштейн, М. Смолуховский. Сборник статей. – М., ОНТИ. 1934. – 607 с.