

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Προτυποποίηση και υπολογιστική προσομοίωση φαινομένων διάχυσης στη ξήρανση φρούτων

Άλκηστις Σέμπου

Επιβλέπων καθηγητής Ανδρέας Μπουντουβής

> ΑΘΗΝΑ ΙΟΥΝΙΟΣ 2014

Ευχαριστίες

Η παρούσα μελέτη αποτελεί τη διπλωματική μου εργασία στα πλαίσια των σπουδών μου στη Σχολή Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ υπό την επίβλεψη του καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή, στον οποίο αποδίδω ιδιαίτερες ευχαριστίες, τόσο για την ανάθεση, όσο και για τη βοήθειά του κατά την εκπόνησή της.

Επιπλέον, ευχαριστώ ιδιαίτερα τον επίκουρο καθηγητή Γεώργιο Ξανθόπουλο για την καθοδήγηση και τις συμβουλές που μου προσέφερε καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της εργασίας αλλά και για τη δυνατότητα συνεργασίας με το Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών.

Ευχαριστώ επίσης το διδάκτορα Μιχάλη Καβουσανάκη για τη συνεργασία κατά την προτυποποιήση, και τη διδάκτορα Ελένη Κορωνάκη για τα πρώτα μου βήματα στο χώρο της μοντελοποίησης, καθώς και τους υποψήφιους διδάκτορες Νίκο Χαμάκο και Γιάννη Αβιζιώτη για το ευχάριστο κλίμα συνεργασίας.

Επιπλέον θα ήθελα να ευχαριστήσω την αναπληρώτρια καθηγήτρια Μαγδαληνή Κροκίδα για το ενδιαφέρον και τη συμμετοχή της στην εξεταστική μου επιτροπή.

Τέλος, ιδιαίτερη ευγνωμοσύνη οφείλω στην οικογένειά μου και στους φίλους μου για τη στήριξη που μου παρείχαν καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ξήρανση τροφίμων είναι μια διεργασία απομάκρυνσης της περιεχόμενης υγρασίας που χρησιμοποιείται ως μέθοδος αποθήκευσης των τροφίμων. Στην διπλωματική εργασία παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της παρούσα προτυποποίησης και της υπολογιστικής προσομοίωσης των φαινομένων διάχυσης κατά τη ξήρανση φρούτων. Συγκεκριμένα, μελετήθηκε πειραματικά η ξήρανση βερίκοκων στις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65°C και προσδιορίστηκε ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης του νερού ως 16.85 - 17.01×10⁻¹¹, 28.8 - 29.5×10^{-11} και $45 - 90 \times 10^{-11}$ m²/s αντίστοιχα. Μετά τη διεξαγωγή των πειραμάτων, χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα Comsol Multiphysics 4.3b για τη μοντελοποίηση του προβλήματος. Μελετήθηκε επίσης η συρρίκνωση του φρούτου ως αποτέλεσμα της αφυδάτωσης λόγω ξήρανσης καθώς και η μεταβολή της περιεχόμενης υγρασίας του δείγματος με την πάροδο του χρόνου. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι ο συντελεστής διάχυσης του νερού στο δείγμα, ο συντελεστής μεταφοράς μάζας στη διεπιφάνεια φρούτου και ρεύματος αέρα ξήρανσης και η ενέργεια ενεργοποίησης της διεργασίας της ξήρανσης αυξάνονται με την αύξηση της θερμοκρασίας. Συγκεκριμένα, ο συντελεστής μεταφοράς μάζας, k_m, προσδιορίστηκε ως 10⁻⁵, 9.98×10^{-5} και 0.85×10^{-2} m/s για τις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65°C αντίστοιχα. Η ενέργεια ενεργοποίησης υπολογίστηκε ίση με 59.6, 60.0 και 60.8 kJ/mol για τις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65° C αντίστοιχα. Το μέσο σχετικό σφάλμα ανάμεσα στις πειραματικές και υπολογιστικές τιμές βρέθηκε να είναι 0.47, 0.88 και 1.32% για τις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65°C αντίστοιχα. Ως μέθοδος βελτιστοποίησης χρησιμοποιήθηκε τόσο η μέθοδος Levenberg-Marquardt όσο και η μέθοδος Sparse Non-Linear Optimizer (SNOPT).

ABSTRACT

Drying is a process during which the moisture content of foods is removed. It is used as a method for optimal food storage. This thesis presents the results of modeling and computational simulation of diffusion phenomena during drying of fruits. Specifically, the experiment was conducted at drying temperatures of 45, 55 and 65°C and the apparent diffusion coefficient of water was determined as 16.85 - 17.01×10^{-11} , 28.8 - 29.5 × 10^{-11} and 45 - 90 × 10^{-11} m²/s respectively. After the experiment took place, the program Comsol Multiphysics 4.3b was used in order to simulate the process and model the problem. Moreover, the shrinkage of the fruit was examined as a result of dehydration due to the change in the moisture content of the sample over time. The results showed that the diffusion coefficient of water in the sample, the mass transfer coefficient between the surface of the fruit and the air of drying and the activation energy for the process of drying increase when temperature rises. Specifically, the mass transfer coefficient, k_m, was determined equal to 10^{-5} , 9.98 × 10^{-5} and 0.85 × 10^{-2} m/s at the temperature of 45, 55 and 65°C, respectively. The calculated activation energy was equal to 59.6, 59.9 and 60.8 kJ/mol at the temperatures of 45, 55 and 65°C, respectively. The average relative error between experimental measurements and computational predictions was found to be 0.47, 0.88 and 1.32% for temperatures of 45, 55 and 65°C, respectively. The methods Levenberg-Marquardt and Sparse Non-Linear Optimizer (SNOPT) were used as optimization methods.

ΠΕΡΙΛΗ	РН	. 4
ABSTRA	CT	. 5
Υπόμνημ	α	. 8
1. ΕΙΣΑ	ΔΓΩΓΗ	11
1.1.	Στόχος της παρούσας διπλωματικής	11
1.2.	Ιστορικά στοιχεία	11
1.3.	Αντίστροφο πρόβλημα (inverse problem)	12
2. ME@	ΘΟΔΟΣ ΠΡΟΤΥΠΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ	14
2.1.	Ξήρανση	14
2.1.1	. Ημιεμπειρικό μοντέλο	15
2.1.2	. Πολυφασικό μοντέλο πορώδους μέσου	16
2.1.3	. Μεταφορά θερμότητας και μάζας	16
2.	1.3.1. Συναγωγή	17
2.	1.3.2. Διάχυση	18
2.2.	Συρρίκνωση	20
2.3.	Περιγραφή λογισμικού υπολογιστικής προσομοίωσης - το πρόγραμμα Comsol	A 1
Multipl	nysics	21
2.3.1	$= 1 \text{ EV}(\mathbf{k}\alpha)$	22
2.3.2	Mερικες Διαφορικες Εςισωσεις (Partial Differential Equations – PDE)	22
2.3.3	Mεθοδος Πεπερασμενών 2τοιχείων (Finite Element Method – FEM)	23
2.3.4	. Aθθαιρετη μεθοδος Lagrange- Euler (Arbitrary Lagrangian-Eulerian - ALE)	23
2.3.3	Second Narlinson Ontining (SNOPT)	21
2.3.0 2 VAL	Sparse Nonlinear Optimizer (SNOP1)	28
5. YAL		3U 20
3.1. 2.1.1	Γεριγραφη πειραματος ζηρανσης	3U 20
2.1.2		20 21
2.2		21 22
3.2. 3.3	Τεωμετρική αναλαραστασή σειγματός (φροστοσ)	32 36
3.3.	Διάνοση	36
3.3.1	3.1.1 Example a second seco	30 27
3.	3.1.2 Support for the second secon	57 27
330	5.1.2. Συνοριακές συνοηκές	71 70
3.5.2	$3.21 \qquad Extractionary on the state of the$	+0 41
3	3.2.1 Egiowork onorio theory provides $3.2.2$ Support for the providence $3.2.2$	+1 41
 	B_{2}	+1 //
5.5.5		+4

3.3.4.	Solvers
4. ΣΥΓΙ	ΣΡΙΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ
4.1.	Τερίπτωση ξήρανσης στους 45 °C47
4.1.1.	Περιεχόμενη υγρασία
4.1.2.	Συντελεστής διάχυσης
4.1.3.	Συρρίκνωση
4.2.	Τερίπτωση ξήρανσης στους 55°C
4.2.1.	Περιεχόμενη υγρασία
4.2.2.	Συντελεστής διάχυσης
4.2.3.	Συρρίκνωση
4.3.	Τερίπτωση ξήρανσης στους 65° C
4.3.1.	Περιεχόμενη υγρασία61
4.3.2.	Συντελεστής διάχυσης61
4.3.3.	Συρρίκνωση
4.4.	Ευμπεράσματα
5. ΣYN	ЭΨН
ΠΙΝΑΚΑΣ	Σ ΣΥΝΤΟΜΟΓΡΑΦΙΩΝ
ПАРАРТИ	IMATA
ΒΙΒΛΙΟΓ	ΡΑΦΙΑ

Υπόμνημα

- c ολική συγκέντρωση μίγματος (mol/m³)
- c_A συγκέντρωση του συστατικού A (mol/m³)
- $c_{A\infty}$ συγκέντρωση του συστατικού Α σε άπειρο όριο συναγωγής (mol/m³)
- c_{As} συγκέντρωση του συστατικού Α στην επιφάνεια συναγωγής (mol/m³)
- $c_{b,i}$ η συγκέντρωση του κενού (mol/m³)
- c_i η περιεχόμενη υγρασία στο πρόγραμμα (mol/m³)
- c_p η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση (J/(kg K))
- $ar{d}$ αριθμητικός μέσος όρος πάχους εκάστοτε δείγματος (mm)
- di πάχος εκάστοτε δείγματος (mm)
- D συντελεστής διάχυσης (m^2/s)
- D_{AB} συντελεστής διάχυσης του συστατικού Α στο διαλύτη B (m^2/s)
- D_{eff} φαινόμενος συντελεστής διάχυσης (m²/s)
- D_i φαινόμενος συντελεστής διάχυσης (m²/s)
- D_o προεκθετικός συντελεστής (m²/s)
- D_u διαχυτότητα (cm²/s)
- E_{α} ενέργεια ενεργοποίησης (J/mol)
- k θερμική αγωγιμότητα (W/(m K))
- k_c συντελεστής μεταφοράς μάζας (m/s)
- $k_{c,j}$ συντελεστής μεταφοράς μάζας (m/s)
- m μάζα (kg)
- Μ περιεχόμενη υγρασία (%)
- Μ_e υγρασία στην κατάσταση ισορροπίας (%)
- Μ₀ αρχική περιεχόμενη υγρασία (%)
- MB_A μοριακό βάρος του συστατικού A (g/mol)
- MB_B μοριακό βάρος του διαλύτη B (g/mol)

 N_A ρυθμός μεταφοράς μάζας (mol A/(m² s))

 N_i ροή μάζας (mol/m²)

Ρ πίεση (Pa)

Q θερμότητα (J)

R παγκόσμια σταθερά αερίων ίση με 8.312 (J/(K mol))

t χρόνος (s)

Τ θερμοκρασία (Κ)

Τ_f τελική θερμοκρασία (K)

Τ_i αρχική θερμοκρασία (K)

u ροή (m/s)

 \bar{V} γεωμετρικός μέσος όρος όγκων (cm³)

V όγκος (m³)

 V_A γραμμομοριακός όγκος διαλυμένης ουσίας σε υγρή κατάσταση στο κανονικό σημείο ζέσεως (cm³/g)

```
V_f τελικός όγκος (m^3)
```

Vi όγκος εκάστοτε δείγματος (cm³)

```
V_0 αρχικός όγκος (m^3)
```

x_A μοριακό κλάσμα του συστατικού Α σε μίγμα

```
α θερμική διαχυτότητα (m²/s)
```

 δ διαπερατότητα (m^2)

ε πορώδες (%)

ε₀ αρχικό πορώδες (%)

```
μ ιξώδες (kg/(m s)) ή (Pa s)
```

ρ πυκνότητα (kg/m³)

 ρ_0 αρχική πυκνότητα μίγματος (kg/m³)

```
ρ_{prod} πυκνότητα δείγματος (kg/m<sup>3</sup>)
```

- $ρ_w$ πυκνότητα νερού (kg/m³)
- σ^2_{AB} διάμετρος κρούσης (\dot{A})

ΑΔΙΑΣΤΑΤΑ ΜΕΓΕΘΗ

F απόκλιση υπολογιστικών και πειραματικών τιμών k_A σταθερά ρυθμού διάχυσης m σταθερά μοντέλου ξήρανσης MC_{exp} περιεχόμενη υγρασία ξηρής βάσης (πειραματική) MC_{pre} περιεχόμενη υγρασία ξηρής βάσης (μοντέλου) MR σχετική υγρασία M1 παράμετρος βελτιστοποίησης n κάθετο διάνυσμα στο μελετώμενο χωρίο n πλήθος δειγμάτων N πλήθος κόμβων S συρρίκνωση φ σταθερά μοντέλου ξήρανσης ψ_B παράμετρος σύζευξης διαλύτη Ω_{D,AB} ολοκλήρωμα κρούσης για τη διάχυση

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1. Στόχος της παρούσας διπλωματικής

Η παρούσα διπλωματική εργασία πραγματεύεται τη μοντελοποίηση και προσομοίωση των φαινομένων διάχυσης κατά τη ξήρανση νωπών αγροτικών προϊόντων όπως φρούτων και λαχανικών. Συγκεκριμένα, μελετήθηκε η ξήρανση βερίκοκων σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν στην πειραματική διαδικασία ήταν κομμένα στη μέση, χωρίς πυρήνα και η ξήρανση έλαβε χώρα σε φούρνο βεβιασμένης συναγωγής στις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65°C. Στη συνέχεια έγινε προτυποποίηση του φυσικού προβλήματος και των συνθηκών ξήρανσης με σκοπό τη σύγκριση των υπολογιστικών προβλέψεων με τις πειραματικές μετρήσεις και την ανάπτυξη ενός υπολογιστικού μοντέλου πρόβλεψης της συμπεριφοράς του συντελεστή διάχυσης κάτω από σταθερές συνθήκες ξήρανσης.

1.2. Ιστορικά στοιχεία

Η μελέτη της διάχυσης κατά τη ξήρανση εμφανίστηκε το 1856 από τον Darcy. Ο νόμος του Darcy αποτελεί μία γενική σχέση για ροή σε πορώδες μέσο η οποία συσχετίζει τον ογκομετρικό ρυθμό ροής (flux) με την πίεσης του ρευστού. Σήμερα έχουν αναπτυχθεί πιο σύγχρονες θεωρίες, όπως εκείνη του Whitaker (1987), που μελετά την ογκομετρική ροή και τη μεταφορά θερμότητας σε πορώδες συνεχές μέσο.

Η ποικιλία και φύση των υλικών που ξηραίνονται (από κεραμικά μέχρι τρόφιμα) και οι διαφορετικές τους ιδιότητες (συμπεριλαμβανομένης και της υγροσκοπικότητάς τους) καθιστούν δύσκολη την ανάπτυξη μίας γενικευμένης θεωρίας η οποία να τα περιγράφει. Διαφορετικοί τύποι ξηραντήρων (ξηραντήρας σήραγγας, ξηραντήρας τύπου θαλάμου, ξηραντήρας μεταφορικής ταινίας, ξηραντήρας τυμπάνου, περιστροφικός ξηραντήρας, ξηραντήρες ψεκασμού) και μέσα ξήρανσης (θερμού αέρα, κενού, υπέρθερμου ατμού, υλικού πλήρωσης) απαντώνται ανάλογα με την εφαρμογή και τον τύπο ξήρανσης σε ερευνητικά εργαστήρια και βιομηχανίες τροφίμων (Κροκίδα κ.α., 2003).

Για τα τρόφιμα, που αποτελούν αμιγώς υγροσκοπικά πορώδη μέσα, αναπτύχθηκαν νέες βελτιωμένες θεωρίες. Συγκεκριμένα, σύγκριση πειραματικών μετρήσεων και προβλέψεων που προκύπτουν από υπολογιστικά μοντέλα οδήγησε στο συμπέρασμα ότι κατά τη διάρκεια της ξήρανσης δημιουργείται ένα μεταβατικό στρώμα μεταξύ αποξηραμένης και υγρής ζώνης. Άλλοι μηχανισμοί μεταφοράς νερού, όπως η τριχοειδής διάχυση ή η ροή υπό πίεση, συνδέονται με το μηχανισμό ξήρανσης μέσω της προσέγγισης του πορώδους μέσου (Shahari, 2012).

1.3. Αντίστροφο πρόβλημα (inverse problem)

Η μέτρηση θερμοφυσικών ιδιοτήτων όπως η θερμοκρασία και η πίεση αποτελούν σήμερα μια τυπική διαδικασία. Για πολλά πειραματικά μεγέθη έχουν αναπτυχθεί τα αντίστοιχα όργανα μέτρησης όπως είναι το θερμόμετρο, το μανόμετρο, το ροόμετρο και οι ζυγοί. Ωστόσο υπάρχουν ακόμα αρκετές ιδιότητες οι οποίες δεν είναι άμεσα μετρήσιμες. Παράδειγμα αποτελεί η ενέργεια, η οποία προσδιορίζεται έμμεσα από τη μεταβολή της κινητικής ή θερμικής κατάστασης ενός σώματος. Έτσι, για τον υπολογισμό της θερμικής ενέργειας που καταναλώνεται σε έναν εναλλάκτη θερμότητας μετράται η αρχική και η τελική θερμοκρασία του ψυχρού ρεύματος εναλλαγής και χρησιμοποιείται η εξίσωση:

$$Q = mc_p \left(T_f - T_i \right) \tag{1}$$

όπου Q η παρεχόμενη θερμική ενέργεια, m η μάζα, *c*_p η ειδική θερμότητα υπό σταθερή πίεση και T_f και T_i η τελική και αρχική θερμοκρασία αντίστοιχα.

Ο συντελεστής διάχυσης, ή διαχυτότητα, αποτελεί μία σημαντική φυσική ιδιότητα. Πέρα από το νόμο του Fick για τη διάχυση, συναντάται σε πολλές εξισώσεις που περιγράφουν τη διάχυση νερού ή υδρατμού σε ένα πορώδες ή μη υγροσκοπικό μέσο. Η συγκεκριμένη ιδιότητα δεν μπορεί να προσδιοριστεί άμεσα μέσω κάποιου οργάνου μέτρησης.

Σε ένα ευθέως ορισμένο πρόβλημα (direct problem) εισάγουμε την τιμή του γνωστού συντελεστή διάχυσης στην εξίσωση που περιγράφει τη διάχυση στο υπολογιστικό μοντέλο και αυτό προβλέπει τόσο τη συρρίκνωση του μελετώμενου χωρίου, όσο και τη μείωση της περιεχόμενης υγρασίας. Ωστόσο, ο συντελεστής διάχυσης είναι γνωστό ότι επηρεάζεται κυρίως από τη θερμοκρασία επεξεργασίας όσο δε και από την περιεχόμενη υγρασία, άρα δεν μπορεί να θεωρηθεί σταθερός καθόλη τη διάρκεια της επεξεργασίας. Για την επίλυση του αντίστροφου προβλήματος διάχυσης απαιτείται ο προσδιορισμός ενός συντελεστή διάχυσης από πρόσθετα δεδομένα. Αντίστροφα προβλήματα διάχυσης εμφανίζονται συχνά σε επιστημονικούς και τεχνολογικούς τομείς. Η πιο διαδεδομένη μέθοδος για τον υπολογισμό του συντελεστή διάχυσης σε ένα αντίστροφο πρόβλημα που έχει προταθεί μέχρι σήμερα είναι μέσω της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων (ΜΠΣ ή Finite Element Method - FEM).

Συγκεκριμένα, στο πρόβλημα που θα παρουσιαστεί εισάγονται τα πειραματικά δεδομένα των μετρήσεων της περιεχόμενης υγρασίας συναρτήσει του χρόνου ξήρανσης, καθώς και ο ρυθμός μείωσης του όγκου του χωρίου (συρρίκνωση), και προσδιορίζεται, μέσω προεπιλεγμένης διαδικασίας βελτιστοποίησης, ο συντελεστής διάχυσης του νερού στο δείγμα.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα μαθηματικού μοντέλου για ορθό και αντίστροφο πρόβλημα διάχυσης αποτελεί η μελέτη του Richard Kowar (2013) ο οποίος προτείνει ότι προκειμένου να αυξηθεί η ακρίβεια της λύσης ενός αντίστροφου προβλήματος, πρέπει το αντίστοιχο ευθύ πρόβλημα να είναι ορθώς ορισμένο. Στην περίπτωσή αυτή, όσο πιο ακριβή είναι τα πειραματικά δεδομένα, τόσο καλύτερη θα είναι η προσέγγιση του συντελεστή διάχυσης που θα επιτευχθεί.

Μελέτες στο συντελεστή διάχυσης, σε επίπεδο μεθοδολογίας και προτυποποίησης, γίνονται συνεχώς τα τελευταία χρόνια. Για παράδειγμα, το 2002 προσδιορίστηκε ο συντελεστής διάχυσης για τα LiFePO₄, FePO₄ αντίστοιχα ίσος με 1.8×10⁻¹⁴ 2.2×10⁻¹⁶ cm²/s (Prosini et al., 2002).

Πολυάριθμες μελέτες έχουν επίσης πραγματοποιηθεί πάνω στη διάχυση νερού ή υδρατμών σε οπωρολαχανικά, όπως μάνγκο (Corzo et al., 2008), μπανάνα (Mauro et al., 1995; Rastogi et al., 1997), ροδάκινο (Askar et al., 1996), ανανάς (Berinstain et al., 1990), μήλο (Hawkes et al., 1978; Quintero-Ramos et al., 1993), καρότο (Qi et al., 1998) πατάτα (Lazarides et al., 1997) και ντομάτα (Xantopoulos et al., 2012).

Επειδή ο προσδιορισμός του πραγματικού συντελεστή διάχυσης του νερού σε προϊόντα είναι δύσκολος τόσο πειραματικά όσο και υπολογιστικά, οι μελέτες επικεντρώνονται στον προσδιορισμό του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης (apparent/effective diffusion coefficient). Ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης, D_{eff}, ορίζεται ως ο ρυθμός της μέσης ροής μάζας προς τη μέση βαθμίδα συγκέντρωσης.

Εναλλακτικά, ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης ορίζεται ως η μέση τιμή του πραγματικού συντελεστή διάχυσης κατά τη διάρκεια της ξήρανσης:

$$D_{eff} = \frac{\overline{D}}{t_f - t_i} \int_i^f dt$$
⁽²⁾

Όπου \overline{D} ο μέσος πραγματικός συντελεστής διάχυσης και $(t_f - t_i)$ το χρονικό διάστημα ανάμεσα στη λήξη και την έναρξη της ξήρανσης (McCarty et al., 1988). Τιμές του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης σε τρόφιμα όπως αυτές υπολογίστηκαν κατά τη ξήρανση διαφόρων αγροτικών προϊόντων παρατίθενται στον πίνακα 1-1:

Προϊόν	D _{eff} (m²/s)	Πηγή
Καφές	5.98×10 ⁻¹¹ (40°C)	Correa et al., 2010
Ντομάτα	4.76×10 ⁻⁹ (100-160°C)	Celma et al., 2009
Σταφύλι	0.5-1.0×10 ⁻⁹ (80°C)	Caglar et al., 2009
Κρεμμύδι	1.0×10 ⁻⁸ (30°C)	Mota et al., 2010
Καρότο	7.517×10 ⁻¹⁰ (40°C)	Mulet, 1994
Μήλο	8.121×10 ⁻⁹ (40°C)	Zogzas et al., 1996

Πίνακας 1-1 Ενδεικτικές τιμές φαινόμενου συντελεστή διάχυσης για τρόφιμα σε διαφορετικές θερμοκρασίες

2. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΡΟΤΥΠΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

Παρακάτω παρουσιάζονται μερικά μαθηματικά μοντέλα ξήρανσης και τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας που διέπουν τη διεργασία της ξήρανσης. Στη συνέχεια εξετάζεται η συρρίκνωση ως αποτέλεσμα της ξήρανσης. Τέλος παρατίθενται αναλυτικά οι υπολογιστικές και αριθμητικές μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν για την προτυποποίηση του προβλήματος.

Το μελετώμενο πρόβλημα αναφέρεται στη ξήρανση νωπών φρούτων σε διάφορες θερμοκρασίες προκειμένου να βρεθεί ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης του νερού στο προϊόν. Μελετήθηκε η διάχυση ως μηχανισμός μεταφοράς μάζας, καθώς και η συρρίκνωση, δηλαδή η μείωση του όγκου του προϊόντος ως αποτέλεσμα της μείωσης της υγρασίας. Από τις πειραματικές μετρήσεις και την υπολογιστική ανάλυση επιχειρήθηκε ο προσδιορισμός του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης μέσα από μία διαδικασία βελτιστοποίησης (optimization).

2.1. Ξήρανση

Με τον όρο ξήρανση αναφερόμαστε στην επιθυμητή απομάκρυνση ποσότητας νερού από υγροσκοπικά υλικά, προκειμένου να μειωθεί το περιεχόμενο του διαθέσιμου νερού σε μία αποδεκτή-επιθυμητή τιμή. Βασική μέθοδο ξήρανσης αποτελεί η εξάτμιση νερού μέσω θέρμανσης, ενώ εναλλακτικά συναντάται και η μηχανική απομάκρυνση του νερού. Η ξήρανση αποτελεί μια διαδομένη όσο και παλαιά μέθοδο συντήρησης των νωπών οπωρολαχανικών, επειδή με την απουσία του περιεχόμενου νερού δεν αναπτύσσονται οι μικροοργανισμοί που είναι υπεύθυνοι για την ποιοτική τους υποβάθμιση αλλά και για την ασφάλειά τους γενικά. Η ξήρανση διακρίνεται σε συνεχή (συνεχής απομάκρυνση του αποξηραμένου προϊόντος από το ξηραντήριο και αντικατάσταση του με νέο μη αποξηραμένο) ή ασυνεχή (τοποθέτηση του προϊόντος στο ξηραντήριο και πραγματοποίηση της ξήρανσης για συγκεκριμένη χρονική περίοδο και τελική περιεχόμενη υγρασία) (Κροκίδα κ.α., 2003). Το πείραμα που διεξήχθη στην παρούσα εργασία αφορούσε ξήρανση ασυνεχούς λειτουργίας.

Η χρήση μαθηματικών μοντέλων για τη προτυποποίηση της ξήρανσης εμφανίστηκε το 1920 από τον Lewis και ακολούθησαν οι μελέτες του Sherwood το 1929 (Hall, 1987). Για την προτυποποίηση της ξήρανσης των νωπών οπωρολαχανικών έχουν προταθεί αρκετά μαθηματικά μοντέλα ανάλογα με τις συνθήκες ξήρανσης και το προϊόν. Σε αυτά τα μοντέλα εξετάζεται η μεταφορά του νερού, ενώ σε κάποια μελετάται και η ταυτόχρονη μεταφορά θερμότητας. Τα πιο διαδεδομένα μοντέλα ξήρανσης είναι το διφασικό μοντέλο μεταφοράς μάζας και θερμότητας, το πολυφασικό μοντέλο μέσω πορώδους μέσου και το ημιεμπειρικό μοντέλο.

2.1.1. Ημιεμπειρικό μοντέλο

Το ημιεμπειρικό μοντέλο στηρίζεται τόσο σε πειραματικά δεδομένα όσο και σε εξισώσεις πρόβλεψης συμπεριφοράς ενός υπό ξήρανση συστήματος. Γενικότερα, η ανάπτυξη μοντέλων βασισμένων σε πειραματικά δεδομένα είναι μαθηματικά και υπολογιστικά απλούστερη σε σχέση με τα αμιγώς θεωρητικά μοντέλα που προαναφέρθηκαν. Ο απλουστευμένος σχεδιασμός της ξήρανσης, βασισμένος στην εμπειρική προτυποποίηση, περιλαμβάνει τον προσδιορισμό σειράς ειδικών παραμέτρων ρύθμισης εισόδου, όπως η θερμοκρασία ξήρανσης, η σχετική υγρασία και η ταχύτητα του αέρα ξήρανσης, και τη μέτρηση των μεγεθών εξόδου από ένα σύστημα καταγραφής δεδομένων (Shahari, 2012).

Για την προτυποποίηση της ξήρανσης έχουν χρησιμοποιηθεί πολλά μοντέλα που προέκυψαν από τη χρήση αρχικών όρων της αναλυτικής σειράς ανάπτυξης του νόμου του Fick. Από τις πιο γνωστές εμπειρικές σχέσεις που έχουν προταθεί είναι εκείνες του εκθετικού μοντέλου του Lewis (1921) σύμφωνα με την εξίσωση (3):

$$MR = e^{(-k_A t)} \tag{3}$$

όπου MR η αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία, t ο χρόνος, και k_A η σταθερά Arrhenius.

Προκειμένου να δημιουργηθεί ένα ημιεμπειρικό μοντέλο μετράται η περιεχόμενη υγρασία, Μ, του προϊόντος σε σχέση με το χρόνο, t. Στη συνέχεια δημιουργείται το διάγραμμα της σχετικής (αδιάστατης) υγρασίας, MR, σε σχέση με το χρόνο σύμφωνα με την εξίσωση (4):

$$MR = \frac{M - M_e}{M_0 - M_e} = \exp(-k_A t)$$
(4)

όπου M_e η περιεχόμενη υγρασία στην τελική ισορροπία μετά τη ξήρανση και M_0 η αρχική περιεχόμενη υγρασία.

Τα κινητικά μοντέλα ξήρανσης είναι πλέον ευρέως αποδεκτά για την περιγραφή ενός συστήματος ξήρανσης τροφίμου και συχνά οδηγούν σε ικανοποιητική συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα. Ωστόσο, επικεντρώνονται στην εξάρτηση της υγρασίας από το χρόνο, χωρίς να λάβουν υπόψη τους την συσχέτιση της υγρασίας με τη μείωση του όγκου του φρούτου που ξηραίνεται.

2.1.2. Πολυφασικό μοντέλο πορώδους μέσου

Η μεταφορά νερού στο πολυφασικό μοντέλο πορώδους μέσου στηρίχτηκε στο νόμο του Darcy που συσχετίζει τη ροή με τη βαθμίδα της πίεσης, όπως αυτή αναπτύσσεται μεταξύ της αποξηραμένης ζώνης και της κορεσμένης ζώνης:

$$\boldsymbol{u} = -\frac{\delta}{\mu} \boldsymbol{\nabla} \mathbf{p}$$
 (5)

όπου **u** ο διανυσματικός ρυθμός ροής, δ η διαπερατότητα, μ το ιξώδες και p η πίεση.

Το παραπάνω μοντέλο αναπτύχθηκε με την προσθήκη της τριχοειδούς ροής σε μεταφορά νερού σε υγρή φάση και τη διάχυση υδρατμού (Ni et al., 1999).

2.1.3. Μεταφορά θερμότητας και μάζας

Για να προκληθεί κάποιου είδους μεταφορά πρέπει να υπάρχει κινητήριος δύναμη. Για παράδειγμα, η διαφορά θερμοκρασίας προκαλεί μεταφορά θερμότητας. Αντίστοιχα, το δυναμικό για να υφίσταται μεταφορά μάζας ανάμεσα σε δύο φάσεις (για παράδειγμα στη ξήρανση, από την υγρή στην αέρια φάση) είναι συνήθως η διαφορά συγκέντρωσης του μεταφερόμενου συστατικού στις φάσεις αυτές.

Το μοντέλο αυτό χρησιμοποιείται για την περιγραφή της μεταφοράς θερμότητας και μάζας κατά τη διάρκεια της ξήρανσης, θεωρώντας το προϊόν ως ομογενές συνεχές μέσο. Το συγκεκριμένο μοντέλο διέπεται από τους βασικούς νόμους μεταφοράς θερμότητας και μάζας, δηλαδή αντίστοιχα από το Νόμο αγωγής θερμότητας του Fourier (εξίσωση (6)) και από το Νόμο διάχυσης της υγρασίας του Fick (εξίσωση (7)).

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{6}$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla M) \tag{7}$$

όπου ρ η πυκνότητα, Τ η θερμοκρασία, k η θερμική αγωγιμότητα, Μ η περιεχόμενη υγρασία και D ο συντελεστής διάχυσης του προϊόντος.

Θεωρώντας σταθερή τη θερμική αγωγιμότητα, και χρησιμοποιώντας το φαινόμενο συντελεστή διάχυσης αντί του πραγματικού, οι παραπάνω εξισώσεις, για μονοδιάστατη ροή, μετασχηματίζονται ως εξής:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$
(8)
$$\frac{\partial M}{\partial t} = D_{eff} \frac{\partial^2 M}{\partial x^2}$$
(9)

όπου:

$$\alpha \coloneqq \frac{k}{\rho c_p} \tag{10}$$

Για την επίλυση του μοντέλου θα πρέπει να οριστούν οι αρχικές συνθήκες περιεχόμενης υγρασίας και θερμοκρασίας και οι συνθήκες ισορροπίας στη διεπιφάνεια του προϊόντος ως συνοριακές τιμές.

Το μοντέλο αυτό χρησιμοποιείται κυρίως λόγω της απλότητας του, η οποία οφείλεται στο μικρό αριθμό παραμέτρων που χρησιμοποιεί. Ωστόσο, η απλουστευμένη μορφή του μονοφασικού μοντέλου μεταφοράς θερμότητας και μάζας δε λαμβάνει υπόψη τη δομή στο εσωτερικό του προϊόντος. (Shahari, 2012)

Οι κυριότεροι μηχανισμοί μεταφοράς μάζας είναι η συναγωγή και η διάχυση.

2.1.3.1. Συναγωγή

Η μεταφορά μάζας με συναγωγή αναφέρεται στη μεταφορά κάποιου συστατικού λόγω μακροσκοπικής κίνησης ενός ρευστού. Ο ρυθμός μεταφοράς μάζας, Ν_Α, μέσω συναγωγής είναι ανάλογος της κινούσας δύναμης, δηλαδή της διαφοράς συγκέντρωσης, και δίνεται από την εξίσωση:

$$N_A = k_c (c_{AS} - c_{A\infty}) \tag{11}$$

όπου, c_{As} , $c_{A\infty}$ οι συγκεντρώσεις στα όρια της επιφάνειας ανταλλαγής μάζας και k_c ο συντελεστής μεταφοράς μάζας, ο οποίος εξαρτάται τόσο από τις ιδιότητες του ρευστού (ιξώδες, πυκνότητα, συντελεστή διάχυσης), όσο και από τη γεωμετρία της επιφάνειας και την κίνηση του ρευστού (Λυγερού κ.α., 2005).

Η κυριότερη εφαρμογή της μεταφοράς μάζας με συναγωγή είναι κατά τη μεταφορά ενός συστατικού από μια φάση σε κάποια άλλη και στηρίζεται στη θεωρία του οριακού στρώματος.

2.1.3.2. Διάχυση

Η μοριακή διάχυση είναι η μεταφορά συστατικών εξαιτίας της ελεύθερης κίνησης των μορίων, χωρίς ωστόσο να παρατηρείται μακροσκοπική ροή μάζας.

Η διάχυση ελέγχεται από το νόμο του Fick, σε αντιστοιχία με το νόμο του Newton για τη μεταφορά ορμής και το νόμο Fourier για τη μεταφορά θερμότητας με αγωγή. Κατ' επέκταση συνδέει το ρυθμό της διάχυσης, J_A, με τη βαθμίδα συγκέντρωσης ως προς μία διεύθυνση z, σύμφωνα με την εξίσωση:

$$J_{A_Z} = -D_{AB} \frac{dc_A}{dz} \tag{12}$$

όπου *D_{AB}* ο συντελεστής διάχυσης του συστατικού Α στο Β και c_A η συγκέντρωση του διαχεόμενου συστατικού.

Αν η διάχυση γίνεται σε περισσότερες της μιας διευθύνσεις, η γενική μορφή του παραπάνω νόμου γίνεται:

$$\boldsymbol{J}_{\boldsymbol{A}} = -c\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{x}_{\boldsymbol{A}} \tag{13}$$

όπου c η ολική συγκέντρωση και x_A το μοριακό κλάσμα του συστατικού Α.

Προκειμένου να επιλυθεί ένα πρόβλημα μεταφοράς μάζας πρέπει πρώτα να προσδιοριστεί ο συντελεστής διάχυσης, ο οποίος προσδιορίζεται πειραματικά και εξαρτάται από τη θερμοκρασία, την πίεση και τη σύσταση του εξεταζόμενου μίγματος (Λυγερού κ.α., 2005).

Στον παρακάτω πίνακα αναφέρεται η τάξη μεγέθους του συντελεστή διάχυσης για υλικά σε διαφορετικές καταστάσεις φύσης:

Πίνακας 2-1 Τάξη μεγέθους του συντελεστή διάχυσης ανάλογα με τη φυσική κατάσταση του συστατικού

Κατάσταση φάσης	Συντελεστής διάχυσης (m²/s)
Αέρια	$\sim 10^{-4} - 10^{-5}$
Υγρά	~10 ⁻⁹
Στερεά	$\sim 10^{-12} - 10^{-14}$

(Λυγερού κ.α., 2005).

Σε όλες τις διεργασίες μεταφοράς μάζας λαμβάνει χώρα διάχυση τουλάχιστον σε μία φάση. Παρά το ότι η διάχυση οφείλεται κυρίως στη βαθμίδα της συγκέντρωσης, μπορεί να προκληθεί επίσης και από τη βαθμίδα της θερμοκρασίας, της πίεσης ή ακόμα και της ενεργότητας όπως στην αντίστροφη ώσμωση. Υπάρχουν αρκετές θεωρίες ερμηνείας της διάχυσης, όπως εκείνη του οριακού στρώματος, η θεωρία διείσδυσης και η θεωρία δύο υμενίων (McCabe et al., 2008). Για διάχυση αερίου σε ένα αέριο μίγμα έχει προταθεί μια εξίσωση βασισμένη στην κινητική θεωρία των αερίων (Λυγερού κ.α, 2005)

$$D_{AB} \coloneqq \frac{1.858 * 10^{-7}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{D,AB}} \sqrt{T^3 (\frac{1}{MB_A} + \frac{1}{MB_B})}$$
(14)

όπου MB_B το μοριακό βάρος του διαλύτη Β, MB_A το μοριακό βάρος του διαχεόμενου αέριου συστατικού Α, Ρ η ολική πίεση, σ_{AB}^2 η διάμετρος κρούσης, $\Omega_{D,AB}$ το ολοκλήρωμα κρούσης για τη διάχυση στο χωρίο D.

Για τη διάχυση ενός υγρού, Α, σε έναν υγρό διαλύτη, Β, μπορεί να εφαρμοστεί η εξίσωση των Wilke-Chang (1995):

$$D_u \coloneqq 7.4 * 10^{-8} \frac{(\psi_B M B_B)^{1/2} T}{\mu V_A^{0.6}}$$
(15)

όπου D_u ο συντελεστής διάχυσης (διαχυτότητα), ψ_B η παράμετρος σύζευξης, μ το ιξώδες, V_A γραμμομοριακός όγκος διαλυμένης ουσίας Α σε υγρή κατάσταση στο κανονικό σημείο.

Για τη διάχυση σε στερεά δεν υπάρχει κάποια ειδική σχέση που να προσεγγίζει επαρκώς όλα τα συστήματα. Αυτό οφείλεται στην ποικιλία των στερεών, στο μέγεθος του διαχεόμενου συστατικού αλλά και στη συρρίκνωση των στερεών κατά την απομάκρυνση της υγρασίας. Συνήθως η διάχυση σε στερεά μπορεί να πραγματοποιηθεί σε πόρους (όπως στα τρόφιμα), στο κρυσταλλικό πλέγμα ή σε άμορφο στερεό.

Συχνά η εξάρτηση της διάχυσης από τη θερμοκρασία περιγράφεται μέσω της εκθετικής εξίσωσης Arrhenius:

$$D_{eff} = D_o \exp(\frac{-E_\alpha}{RT})$$
(16)

όπου E_{α} η ενέργεια ενεργοποίησης, R η παγκόσμια σταθερά αερίων και D_o η προεκθετική παράμετρος.

2.2. Συρρίκνωση

Κατά τη ξήρανση, ο όγκος του αποξηραινόμενου προϊόντος μειώνεται εξαιτίας της απομάκρυνσης του περιεχόμενου νερού. Πολλές φορές, η συρρίκνωση οδηγεί σε μείωση του αρχικού όγκου του προϊόντος έως και 75% (Hansen, 1987).



Σχήμα 2-1 Σημαντική μεταβολή όγκου κατά τη συρρίκνωση νωπών αγροτικών προϊόντων (www.stapleton-spence.com)

Η συρρίκνωση είναι συνηθισμένο φαινόμενο και συνοδεύει την αφυδάτωση ενός προϊόντος. Εξαιτίας αυτής μπορεί να προκληθούν σημαντικές δομικές μεταβολές στο αποξηραινόμενο προϊόν και κατ' επέκταση στην ποιότητα αυτού. Παρόλα αυτά, η ξήρανση χρησιμοποιείται προκειμένου να αυξηθεί η σταθερότητα του προϊόντος, να μειωθεί η μικροβιακή δραστηριότητα σε αυτό και να περιοριστούν οι ανεπιθύμητες φυσικοχημικές μεταβολές που μπορούν να λάβουν χώρα κατά την αποθήκευσή του.

Η απώλεια νερού και η θέρμανση ενός βιολογικού προϊόντος κατά τη ξήρανση οδηγούν στη μεταβολή της κυτταρικής του δομής. Κατά τη διάρκεια της ξήρανσης, λόγω της μείωσης του όγκου, μπορεί να δημιουργηθούν επιφανειακές ρωγμές στο τρόφιμο. Αυτό συμβαίνει όταν η συρρίκνωση δεν πραγματοποιείται με ομοιόμορφο τρόπο το οποίο οδηγεί στην ανάπτυξη ασύμμετρων τάσεων και την κατάρρευση του αποξηραινόμενου δείγματος.

Σε συστήματα ξήρανσης τροφίμων, η συρρίκνωση μπορεί σπάνια να θεωρηθεί αμελητέα, λόγω της υψηλής περιεκτικότητας σε νερό καθώς και της πολυπλοκότητας της δομής στα τρόφιμα. Για το λόγο αυτό, θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη στην ανάπτυξη μοντέλων πρόβλεψης συμπεριφοράς της περιεχόμενης υγρασίας. Αν και γενικά η συρρίκνωση αποτελεί ένα μειονέκτημα της ξήρανσης, πολλά τρόφιμα, όπως οι σταφίδες και τα αποξηραμένα δαμάσκηνα, έχουν καθιερωθεί σήμερα περισσότερο ως αποξηραμένα παρά ως νωπά.

Η συρρίκνωση είναι μεγαλύτερη όσο μεγαλύτερος είναι ο όγκος του νερού που απομακρύνεται. Δηλαδή, σε αντίθεση με το φαινόμενο συντελεστή διάχυσης που είναι ισχυρά θερμοκρασιακά εξαρτώμενος, η συρρίκνωση εξαρτάται μόνο από την περιεχόμενη υγρασία και όχι από τη θερμοκρασία. Ο πιο απλός τρόπος για να μοντελοποιηθεί η συρρίκνωση κατά τη διάρκεια της αφυδάτωσης είναι να βρεθεί μια εμπειρική συσχέτιση ανάμεσα στη συρρίκνωση και την περιεκτικότητα σε υγρασία, λαμβάνοντας υπόψη τις συνθήκες που επικρατούν κατά τη διαδικασία, όπως η υγρασία του αέρα και σε μικρότερο βαθμό η θερμοκρασία ξήρανσης (Mayor, 2004).

Η συρρίκνωση εκφράζεται ως αδιάστατο μέγεθος από την εξίσωση:

$$S = \frac{V_f}{V_0} \tag{17}$$

όπου V_0 ο αρχικός όγκος και V_f ο τελικός όγκος του δείγματος.

Αντίστοιχα έχει οριστεί ο αδιάστατος όγκος (Ruiz-Lopez et al., 2012) (V/V_o) συναρτήσει της περιεχόμενης υγρασίας από την εξίσωση:

$$V/V_o = \varphi + (1 - \varphi)MR^m \tag{18}$$

όπου, φ και m αδιάστατες παράμετροι του μοντέλου ξήρανσης. Η παράμετρος m περιγράφει τη συρρίκνωση ενός προϊόντος (m=0, αμελητέα συρρίκνωση και m=1, ομοιόμορφη συρρίκνωση).

Εναλλακτικά, έχουν προταθεί και άλλες εξισώσεις προτυποποίησης της συρρίκνωσης όπως αυτή από τον Mayor (2004) ως:

$$\frac{V}{V_0} = \frac{1}{(1-\varepsilon)} \left[1 + \frac{\rho_0 (M - M_0)}{\rho_w (1+M_0)} + \varepsilon_0 \right]$$
(19)

όπου M_0 η αρχικά περιεχόμενη υγρασία, ε₀ το αρχικό πορώδες, ε το πορώδες, ρ₀ η αρχική πυκνότητα του τροφίμου, και ρ_w η πυκνότητα του νερού.

2.3. Περιγραφή λογισμικού υπολογιστικής προσομοίωσης το πρόγραμμα Comsol Multiphysics

Για τη προτυποποίηση του προβλήματος προσδιορισμού του συντελεστή διάχυσης χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα προσομοίωσης Comsol Multiphysics 4.3b (www.comsol.com\products). Αυτό το πρόγραμμα χρησιμοποιεί τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Method – FEM) για διάφορες φυσικές και μηχανικές εφαρμογές, ειδικά σε συνδυασμό με φαινόμενα μεταφοράς, για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων μερικών παραγώγων (Partial Differential Equations – PDEs) με τις συνοδευτικές αρχικές και συνοριακές συνοριακές συνθήκες (ΣΣ).

2.3.1. Γενικά

To COMSOL Multiphysics προσφέρει τη δυνατότητα διεπαφής με MATLAB και εργαλειοθήκες για πλήθος υλικών και μια μεγάλη ποικιλία προγραμμάτων. Χρησιμοποιείται για την επίλυση προβλημάτων ρευστομηχανικής, μεταφοράς θερμότητας, χημικής μηχανικής, ηλεκτρομαγνητισμού, μαγνητικών πεδίων, δομικής μηχανικής και διαφόρων άλλων ειδών.

To Comsol Multiphysics αποτελείται από διάφορα υποπρογράμματα το κάθε ένα εκ των οποίων αποτελεί ένα αυτοτελές μοντέλο με εξισώσεις οι οποίες χρησιμοποιούνται για την επίλυση του προβλήματος όταν αυτό οριστεί πλήρως από το χρήστη. Για να οριστεί πλήρως ένα πρόβλημα (αφού σχεδιαστεί η μελετώμενη γεωμετρία στην επιφάνεια εργασίας) πρέπει για το κάθε μοντέλο να οριστούν οι εξισώσεις χωρίου, οι συνοριακές συνθήκες, οι αρχικές τιμές και οι σταθερές που περιέχονται στις εξισώσεις κάθε μοντέλου.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι μαθηματικές μέθοδοι που χρησιμοποιεί το πρόγραμμα για να επιλύσει το πρόβλημα προσδιορισμού του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης κατά τη ξήρανση νωπών φρούτων.

2.3.2. Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις (Partial Differential Equations – PDE)

Τα προβλήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ) προκύπτουν συχνά σε προβλήματα προσομοίωσης και προτυποποίησης της ρευστομηχανικής, πρόβλεψης καιρού, πυρηνικής διάχυσης, σχεδιασμού αντιδραστήρων κα. Οι ΜΔΕ συνδέονται άμεσα με τη ΜΠΣ καθώς η δεύτερη αποτελεί το βασικό εργαλείο επίλυσης των πρώτων.

Οι πιο κλασικές ΜΔΕ που απαντώνται είναι οι γραμμικές εξισώσεις δεύτερης τάξης με δύο ανεξάρτητες μεταβλητές, δηλαδή ΔΕ της μορφής:

$$L[u] = Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu - G$$
(20)

όπου Α,Β,C,D,Ε,F,G είναι οι συναρτήσεις των ανεξάρτητων μεταβλητών x,y.

Οι ΜΔΕ χρησιμοποιούνται κυρίως για την επίλυση δύο ειδών προβλημάτων, προβλημάτων συνοριακών τιμών (ΠΣΤ) και προβλημάτων αρχικών τιμών (ΠΑΤ). Ένα ΠΣΤ περιγράφεται είτε από τους αγνώστους u, $\frac{\partial u}{\partial n}$ σε ένα ορισμένο χωρίο D, είτε από το γραμμικό συνδυασμό τους στο όριο του χωρίου ∂D . Για την εξίσωση Laplace οι αντίστοιχες συνοριακές συνθήκες είναι οι προαναφερθείσες Dirichlet, Neumann ή μικτές Cauchy. Από την άλλη, για την επίλυση ενός ΠΑΤ πρέπει να η συνάρτηση u(x,y,t) να ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση στο χωρίο D στη χρονική στιγμή t=0, αλλά και τις συνοριακές αρχικές συνθήκες (Young, 2003).

Για να λυθεί ένα πρόβλημα ΜΔΕ πρέπει να είναι ορθώς ορισμένο, δηλαδή να υπάρχει μία μοναδική λύση εξαρτώμενη από τις ΣΣ.

Οι τρόποι επίλυσης ΜΔΕ ποικίλουν. Συχνά χρησιμοποιείται η ΜΠΔ, όπου οι μερικές παράγωγοι πρώτης και δεύτερης τάξης ορίζονται ως πολυώνυμα μικρότερης τάξης συναρτήσει της απόστασης h ανάμεσα σε δύο κόμβους ενός πλέγματος.

Στην εξεταζόμενη περίπτωση, χρησιμοποιείται η ΜΠΣ. Στην περίπτωση αυτή, αντί να χρησιμοποιηθούν πεπερασμένες διαφορές, παράγονται γραμμικές εξισώσεις οι οποίες επιλύονται στους κόμβους του πλέγματος, όπως τα υπόλοιπα Galerkin.

Άλλες μέθοδοι επίλυσης των ΜΔΕ είναι τα πολυπλέγματα, η μέθοδος των χαρακτηριστικών και η μέθοδος των γραμμών. Στα πολυπλέγματα, πέρα από το βασικό πλέγμα, δημιουργείται ένα αραιό πλέγμα προκειμένου να βρεθούν νέες προσεγγιστικές λύσεις από μία διαδικασία εξομάλυνσης. Η μέθοδος των χαρακτηριστικών χρησιμοποιείται για την επίλυση υπερβολικών εξισώσεων ή συστημάτων εξισώσεων. Τέλος, η μέθοδος των γραμμών χρησιμοποιεί συνήθεις διαφορικές εξισώσεις (ΣΔΕ) για την προσέγγιση της λύσης των ΜΔΕ.

2.3.3. Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων (Finite Element Method – FEM)

Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων (ΜΠΣ) χρησιμοποιείται ευρέως σε υπολογιστικά προβλήματα μηχανικής, ρευστομηχανικής, ροής θερμότητας και ηλεκτρομαγνητισμού. Είναι μια αριθμητική μέθοδος υπολογισμού προσεγγιστικών λύσεων διαφορικών εξισώσεων με μερικές παραγώγους.

Σύμφωνα με τη ΜΠΣ, το μελετώμενο χωρίο χωρίζεται σε υποχωρία με ένα πλέγμα. Οι τομές των γραμμών του πλέγματος ονομάζονται κόμβοι και είναι τα σημεία στα οποία υπολογίζονται οι προσεγγιστικές λύσεις. Λόγω της διακριτότητας των πεπερασμένου πλήθους σημείων, η προσεγγιστική επίλυση ονομάζεται και διακριτοποίηση.

Αν και προσεγγιστική μέθοδος, μπορεί να δώσει αποτελέσματα με μεγάλη αξιοπιστία, δεδομένης της απαιτούμενης υπολογιστικής ισχύος. Προκειμένου να εφαρμοστεί η ΜΠΣ πρέπει αρχικά να εισαχθεί η γεωμετρία του υπολογιστικού χωρίου (domain) στο πρόγραμμα Comsol Multiphysics. Μετά την κατασκευή του χωρίου ετοιμάζεται το πλέγμα (Mesh – Refined mesh) δεδομένου ότι έχουν εισαχθεί οι κατάλληλες συνοριακές και αρχικές συνθήκες. Συγκεκριμένα, η ΜΠΣ χρησιμοποιεί μια προσέγγιση της άγνωστης λύσης μέσω γνωστών συναρτήσεων βάσης για να μετατρέψει διαφορικές εξισώσεις μερικών παραγώγων σε γραμμικές αλγεβρικές εξισώσεις (Μπουντουβής, 1992).

Στη ΜΠΣ το χωρίο που μελετάται, D, καθώς και το όριο του (∂D) υποδιαιρούνται σε διάφορα υποχωρία (subdomains) μέσω ενός πλέγματος (mesh). Κάθε υποχωρίο

ονομάζεται στοιχείο. Για κάθε κόμβο, j, του πλέγματος ορίζεται και η αντίστοιχη συνάρτηση βάσης, φ^j , η οποία είναι συνήθως πολυώνυμο πρώτου ή δευτέρου βαθμού. Η φ^j είναι μη μηδενική μόνο στην περιοχή του D που αποτελείται από τα στοιχεία τα οποία μοιράζονται τον κόμβο j. Δηλαδή, η φ^j είναι ίση με τη μονάδα στον κόμβο j και μηδενική σε όλους τους άλλους κόμβους. Η άγνωστη λύση u προσεγγίζεται από τις γνωστές συναρτήσεις βάσης φ^j σύμφωνα με την εξίσωση:

$$u(x) = \sum_{j=1}^{N} u_j \varphi^j(x)$$
⁽²¹⁾

όπου N το πλήθος των κόμβων και u_j οι άγνωστοι συντελεστές που είναι οι τιμές της λύσης στους κόμβους.

Σταθμισμένα Υπόλοιπα Galerkin

Η μέθοδος Galerkin χρησιμοποιείται για την επίλυση προβλημάτων συνοριακών τιμών (ΠΣΤ). Θεωρώντας μία διαφορική εξίσωση της μορφής:

$$Lu = f \ \sigma \tau o \ D \tag{22}$$

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{g} \ \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\tau}\boldsymbol{\sigma} \ \boldsymbol{\partial}\boldsymbol{D} \tag{23}$$

το σταθμισμένο υπόλοιπο σε κάποιο κόμβο j δίνεται από την εξίσωση:

$$R_j = \int_D (\boldsymbol{L}\boldsymbol{u} - \boldsymbol{f})\varphi^j d\boldsymbol{S} \qquad j=1,2,\dots,N$$
⁽²⁴⁾

Το πλήθος των υπολοίπων είναι ίσο με το πλήθος των συναρτήσεων βάσης και κατ' επέκταση ίσο με το πλήθος των κόμβων του πλέγματος. Η μέθοδος Galerkin αναζητεί τη λύση που μηδενίζει κάθε σταθμισμένο υπόλοιπο.

Στη συνέχεια, εισάγονται στα υπόλοιπα οι συνοριακές συνθήκες (ΣΣ) που ορίζουν τη λύση u στο ∂D και ονομάζονται συνθήκες Dirchlet. Δηλαδή στο σημείο k (κόμβος), που ορίζεται η τιμή της λύσης ίση με t_k, το υπόλοιπο Galerkin αντικαθιστάται από:

$$R_k \coloneqq u_k - F(t_k) = 0 \tag{25}$$

Με παραγοντική ολοκλήρωση στα υπόλοιπα μπορούν να ληφθούν υπόψη οι ΣΣ για τις τιμές των παραγώγων της λύσης στο όριο του χωρίου D (ΣΣ τύπου Neumann). Με τη ΜΠΣ καταλήγουμε στην επίλυση ενός γραμμικού συστήματος εξισώσεων, εφόσον οι αρχικές διαφορικές εξισώσεις είναι γραμμικές, με αγνώστους τους συντελεστές u_i της εξίσωσης (21).

Εναλλακτικά, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος πεπερασμένων όγκων (ΜΠΟ) η οποία ανήκει στις ολοκληρωτικές μεθόδους αριθμητικής επίλυσης των διαφορικών εξισώσεων μερικών παραγώγων. Στις ολοκληρωτικές μεθόδους η διακριτοποιημένη εξίσωση, που χρησιμοποιείται για την εύρεση της αριθμητικής λύσης, προκύπτει από την ολοκλήρωση στον πεπερασμένο όγκο ελέγχου των εξισώσεων μεταφοράς (Μαρκάτος κ.α., 1995).

2.3.4. Αυθαίρετη μέθοδος Lagrange- Euler (Arbitrary Lagrangian-Eulerian - ALE)

Η ανάγκη εφαρμογής της μεθόδου ALE οφείλεται στη συρρίκνωση του φρούτου. Συγκεκριμένα, η απομάκρυνση της περιεχόμενης υγρασίας από το προϊόν οδηγεί στη συρρίκνωση του και στη μεταβολή του όγκου του με την πάροδο του χρόνου ξήρανσης. Αν τα όρια του μελετώμενου χωρίου παρέμεναν σταθερά, τότε το πλέγμα του χωρίου θα αποτελούνταν από σταθερές γραμμές. Ωστόσο, η υποχώρηση του εξωτερικού συνόρου στο μελετώμενο χωρίο (η ύπαρξη δηλαδή κινούμενων συνόρων) επιβάλλει την εφαρμογή ειδικών τεχνικών για την παρακολούθηση της κίνησης των γραμμών του πλέγματος.

Η μέθοδος ALE είναι μια διαμόρφωση (formulation) πεπερασμένων στοιχείων στην οποία το υπολογιστικό χωρίο δεν είναι εκ των προτέρων σταθερό στο χώρο ή συνδεδεμένο με κάποιο υλικό. Χρησιμοποιείται για την αριθμητική προσομοίωση σε πολυδιάστατα προβλήματα στη ρευστομηχανική και σε μη γραμμικά συστήματα μηχανικής στερεών. Κυριότερη εφαρμογή βρίσκει σε προβλήματα κινούμενων συνοριακών συνθηκών (Moving Boundaries).

Όταν χρησιμοποιείται η τεχνική ALE, το υπολογιστικό πλέγμα στο εσωτερικό του χωρίο μπορεί να κινηθεί αυθαίρετα για τη βελτιστοποίηση των σχημάτων των στοιχείων, ενώ το πλέγμα στα όρια και τις διασυνδέσεις των υποχωρίων μπορεί να κινηθεί μαζί με τα υλικά για να παρακολουθούνται με ακρίβεια τα όρια και οι διασυνδέσεις ενός συστήματος πολλών υλικών (Wang et al., 1997).

Στον αλγόριθμο που χρησιμοποιήθηκε από τον Lagrange κάθε κόμβος του υπολογιστικού πλέγματος (κυκλικά σημεία στο Σχήμα 2-2) ακολουθεί το αντίστοιχο υλικό σημείο (τετράγωνα σημεία στο Σχήμα 2-2) κατά την κίνηση. Το υπολογιστικό πλέγμα, σε αυτήν την περίπτωση ακολουθεί το συνεχές μέσο στην κίνηση του και οι κόμβοι του πλέγματος παραμένουν συνεχώς συνδεδεμένοι με το υλικό. Αυτό μπορεί να είναι σημαντικό πλεονέκτημα για τους υπολογισμούς, εκτός αν το χωρίο υφίσταται μεγάλες παραμορφώσεις ή εμφανίζονται δίνες ρευστών (Donea et al., 2004).



Σχήμα 2-2 Σχηματική απεικόνιση πλέγματος Lagrange (en.wikiversity.org)

Αντίστοιχα, από τον Euler χρησιμοποιήθηκε ένας διαφορετικός αλγόριθμος, ο οποίος εφαρμόζεται κυρίως σε προβλήματα μηχανικής ρευστών. Σε αυτόν τον αλγόριθμο το υπολογιστικό πλέγμα είναι σταθερό (κυκλικά σημεία στο Σχήμα 2-3) και το συνεχές μέσο κινείται σύμφωνα με το πλέγμα (τετράγωνα σημεία στο Σχήμα 2-3). Οι μεγάλες παραμορφώσεις μπορούν να αντιμετωπιστούν με αρκετή ευκολία σε αυτό το μοντέλο.



Σχήμα 2-3 Σχηματική απεικόνιση του πλέγματος Euler (stochasticandlagrangian.blogspot.gr)

Επειδή ο κάθε αλγόριθμος ξεχωριστά περιορίζει τους κόμβους του πλέγματος αναπτύχθηκε η μέθοδος ALE, κατά την οποία αυτοί μπορούν είτε να κινούνται μαζί με το συνεχές μέσο, όπως στη μέθοδο Lagrange, είτε να παραμένουν σταθεροί όπως στη μέθοδο Euler, είτε κάποιοι να παραμένουν σταθεροί και κάποιοι να κινούνται. Η ελευθερία κινήσεων που προσφέρει η μέθοδος ALE επιτρέπει το χειρισμό μεγαλύτερων παραμορφώσεων από εκείνων που επιτρέπει η μέθοδος Lagrange και με μεγαλύτερη ακρίβεια λύσης από εκείνη που προσφέρει μέθοδος Euler (Wang et al., 1997).

Κατά την εκτέλεση της μεθόδου ALE, δημιουργείται ένα πλέγμα το οποίο επανασχεδιάζεται στο τέλος κάθε χρονικού βήματος μέσα από μια διαδικασία που απαιτεί ως δεδομένο εισόδου την ταχύτητα μετατόπισης των κόμβων του πλέγματος ή τη χωρική μετατόπιση τους.

Οι τεχνικές που χρησιμοποιεί το πλέγμα για να επανασχεδιάζεται είναι δύο. Η κανονικοποίηση του πλέγματος (mesh refinement) και η προσαρμογή του πλέγματος (mesh adaption). Η πρώτη αποτελεί τεχνική γεωμετρικής φύσης και προσπαθεί να διατηρήσει το πλέγμα όσο το δυνατόν πιο κανονικό προκειμένου να αποφευχθούν οι παραμορφώσεις και οι συμπιέσεις. Στην κανονικοποίηση του πλέγματος απαιτείται ο προσδιορισμός των συντεταγμένων των κόμβων του πλέγματος σε κάθε υπολογιστικό βήμα. Σε προβλήματα αλληλεπίδρασης ανάμεσα σε ρευστό και στερεό, οι μερικές διαφορικές εξισώσεις επιλύονται στους στερεούς κόμβους με αλγόριθμους Lagrange ενώ οι κόμβοι ρευστού θεωρούνται σταθεροί ή ανανεώσιμοι βάσει κάποιας διαδικασίας παρεμβολής.

Η προσαρμογή του πλέγματος έχει ως στόχο τον προσδιορισμό του βέλτιστου υπολογιστικού πλέγματος προκειμένου να επιτευχθεί συγκεκριμένη ακρίβεια λύσης. Στη διαδικασία αυτή ο αριθμός των κόμβων καθώς και η συνδεσιμότητα των στοιχείων παραμένουν σταθερά. Η μέθοδος αυτή βρίσκει εφαρμογή στη ρευστομηχανική, επειδή λαμβάνει υπόψη της την κατεύθυνση κίνησης ενός ρευστού.



Σχήμα 2-4 Εφαρμογή της προσαρμογής πλέγματος (www.eng.ox.ac.uk)

2.3.5. Levenberg – Marquardt

Η διεργασία της ξήρανσης μελετήθηκε υπολογιστικά συγκρίνοντας την απόκλιση των προβλεπόμενων θεωρητικών τιμών από τις πειραματικές μετρήσεις (curvefitting). Αυτό έγινε με σκοπό τον προσδιορισμό της βέλτιστης λύσης σε συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα. Η μέθοδος Levenberg-Marquardt είναι μια κλασική τεχνική που χρησιμοποιείται για την επίλυση μη γραμμικών προβλημάτων με τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων. Στη μελετώμενη περίπτωση, υπολογίζεται η τιμή μίας συνάρτησης, η απόκλιση αυτής της τιμής από την αντίστοιχη πειραματική τιμή και τελικά υπολογίζεται το άθροισμα των τετραγώνων όλων των αποκλίσεων, το οποίο χρησιμοποιείται ως αντικειμενική συνάρτηση ελαχιστοποίησης. Ουσιαστικά αποτελεί συνδυασμό δύο μεθόδων ελαχιστοποίησης, της βαθμιδωτής καθοδικής μεθόδου (gradient descent method) και της μεθόδου Gauss-Newton. Η διαφορά των παραπάνω έγκειται στο ότι η πρώτη μειώνει το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων προς την κατεύθυνση της μεγαλύτερης μείωσης της αντικειμενικής συνάρτησης, ενώ η δεύτερη θεωρεί τη συνάρτηση ελαχίστων τετραγώνων τοπικά τετραγωνική και βρίσκει το ελάχιστο της τετραγωνικής συνάρτησης.

Πιο συγκεκριμένα, η μέθοδος βαθμιδωτής καθόδου ανανεώνει τιμές των παραμέτρων σε κατεύθυνση αντίθετη εκείνης της βαθμίδας της αντικειμενικής συνάρτησης. Η μέθοδος αυτή ενδείκνυται για προβλήματα μεγάλου πλήθους παραμέτρων βελτιστοποίησης.

Αντίθετα, η μέθοδος Gauss-Newton είναι πιο εύχρηστη σε προβλήματα «μεσσαίου μεγέθους» και συγκλίνει πιο γρήγορα.

Στη μέθοδο Levenberg-Marquardt ορίζεται η παράμετρος λ η οποία, ανάλογα με τις τιμές που παίρνει, χρησιμοποιεί μία από τις παραπάνω μεθόδους ή συνδυασμό αυτών. Αναλυτικότερα, μικρές τιμές της παραμέτρου λ οδηγούν στην ανανέωση της λύσης μέσω της μεθόδου Gauss-Newton ενώ μεγάλες τιμές του λ οδηγούν στην ανανέωση των λύσεων μέσω της μεθόδου βαθμιδωτής καθόδου.

2.3.6. Sparse Nonlinear Optimizer (SNOPT)

Η μέθοδος SNOPT αποτελεί έναν αλγόριθμο Διαδοχικού Τετραγωνικού Προγραμματισμού (ΔΤΠ) για βελτιστοποίηση υψηλής κλίμακας περιορισμών. Οι αλγόριθμοι ΔΤΠ (ευρέως γνωστοί ως Sequential Quadratic Programming (SQP)) είναι πολύ αποτελεσματικοί στην επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς. Γενικώς έχουν χρησιμοποιηθεί επιλύτες όπως ο NPSOL (Nonlinear Programming Systems Optimization Laboratory), ο οποίος έχει τη δυνατότητα επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης με 2,000 περιορισμούς και 1,000 ανεξάρτητες μεταβλητές. Ωστόσο η ανάγκη για επίλυση πιο σύνθετων προβλημάτων οδηγεί στη συνεχή βελτίωση των αλγορίθμων ΔΤΠ (Gill et al., 2005).

Ο αλγόριθμος SNOPT βασίζεται στην ελαχιστοποίηση κάποιας αντικειμενικής συνάρτησης σύμφωνα με την εντολή:

minimize f(x), $x \in \mathbb{R}$

όπου f(x) μια γραμμική ή μη γραμμική αντικειμενική συνάρτηση, και στην ικανοποίηση κάποιων περιορισμών ανώτατου και κατώτατου ορίου:

$$\ell \leq \begin{pmatrix} x \\ g(x) \\ Ax \end{pmatrix} \leq h$$
(26)

όπου ℓ το κατώτατο επιτρεπτό όριο (KEO), h το ανώτατο επιτρεπτό όριο (AEO), g(x) το διάνυσμα περιορισμών g_i(x) και Α αραιός πίνακας.

Η γενική ιδέα του ΔΤΠ είναι να επιλύσει ένα πρόβλημα με μη γραμμικούς περιορισμούς λύνοντας μια σειρά υπο-προβλημάτων τετραγωνικού προγραμματισμού (ΤΠ). Ουσιαστικά, οι λύσεις κάθε υπο-προβλήματος αποτελούν γραμμικοποιήσεις της λύσης του αρχικού προβλήματος και η αντικειμενική συνάρτηση ενός υπο-προβλήματος είναι μία τετραγωνική προσέγγιση της συνάρτησης Lagrange. Πιο συγκεκριμένα, κάθε υπο-πρόβλημα ΤΠ ελαχιστοποιεί ένα τετραγωνικό μοντέλο μιας συγκεκριμένης συνάρτησης Lagrange, το οποίο υπόκειται σε γραμμικοποιημένους περιορισμούς. Προκειμένου να εξασφαλιστεί η σύγκλιση της μεθόδου μειώνεται κάποια συνάρτηση αξίας σε κάθε επανάληψη.

Ο ΔΤΠ περιλαμβάνει επαναλήψεις υψίστης και ήσσονος σημασίας. Οι επαναλήψεις υψίστης σημασίας χρησιμοποιούνται στο ΔΤΠ για να παράγουν μια σειρά αποτελέσμάτων σημείων (x_k,y_k) που συγκλίνουν στην τελική λύση (x₁,y₁). Αφού προσδιοριστεί το σημείο (x_k,y_k) , οι επαναλήψεις μικρής σημασίας εφαρμόζονται στον ΤΠ σε κάποιο υποπρόβλημα, προκειμένου να βρεθεί η κατεύθυνση προς την οποία βρίσκεται το επόμενο σημείο (x_{k+1},y_{k+1}). Η επίλυση με ΤΠ σε ένα υποπρόβλημα αποτελεί από μόνη της μια επαναληπτική διαδικασία.

Η μέθοδος SNOPT είναι ουσιαστικά ένας αλγόρίθμος ΔΤΠ που εκμεταλλεύεται την Ιακωβιανή ορίζουσα και διατηρεί μία προσέγγιση λύσης για μικρό χρονικό διάστημα.

3. ΥΛΙΚΑ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΙ

Το πείραμα που διεξήχθη και προσομοιώθηκε ήταν μια ισοθερμοκρασιακή ασυνεχής ξήρανση η οποία μελετήθηκε σε τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες. Στην ενότητα αυτή περιγράφονται αναλυτικά οι συνθήκες διεξαγωγής των πειραματικών μετρήσεων και το μοντέλου προσομοίωσης που αναπτύχθηκε, ξεκινώντας από το σχεδιασμό του χωρίου στο υπολογιστικό πρόγραμμα Comsol Multiphysics και αναλύοντας τις εξισώσεις με τις οποίες περιγράφηκε και επιλύθηκε το πρόβλημα. Από την πειραματική διαδικασία και τη μοντελοποίηση της βρέθηκαν αποτελέσματα για το φαινόμενο συντελεστή διάχυσης του νερού στο βερίκοκο και το συντελεστή μεταφοράς μάζας.

Αντίστοιχη έρευνα σε αυτά τα μεγέθη έχει προηγηθεί σε σύκα (Xanthopoulos et al., 2009), τομάτες (Xanthopoulos et al., 2012b), φράουλες (Xanthopoulos et al., 2012a), μήλα και πατάτες (Saravacos, 1967) κα. Η παρούσα μελέτη πραγματοποιήθηκε σε βερίκοκα ποικιλίας Tom Cot.

3.1. Περιγραφή πειράματος ξήρανσης

Για την ορθή διεξαγωγή ενός πειράματος απαιτείται η κατάλληλη επιλογή του δείγματος που θα μελετηθεί, η σωστή αποθήκευση και προετοιμασία μέχρι την ολοκλήρωση του πειράματος, ο κατάλληλος πειραματικός εξοπλισμός και ο σωστός χειρισμός αυτού. Ακόμα και αν όλα τα παραπάνω τηρηθούν, πάντα υπάρχουν πειραματικά σφάλματα στις μετρήσεις που προκύπτουν. Τα σφάλματα αυτά μπορεί να είναι τυχαία (π.χ. να πραγματοποιηθούν ακούσια από τον πειραματιστή) ή συστηματικά (π.χ. σφάλμα στην ένδειξη ενός ζυγού ή ενός θερμομέτρου.

Πριν από τη δημιουργία του μοντέλου και την προτυποποίηση, πρέπει να ελεγχθεί η αξιοπιστία των πειραματικών αποτελεσμάτων, δηλαδή η επαναληψιμότητα και η ευαισθησία των πειραματικών μετρήσεων.

3.1.1. Εξοπλισμός

Η ξήρανση των δειγμάτων πραγματοποιήθηκε σε φούρνο (ξηραντήριο) βεβιασμένης συναγωγής, Binder FD115 (BINDER Gmbh, Germany) του εργαστηρίου Γεωργικής Μηχανολογίας του Γεωπονικού Πανεπιστημίου Αθηνών (Γ.Π.Α.).



Σχήμα 3-1 Φούρνος που πραγματοποιήθηκε η ξήρανση των δειγμάτων (www.binder-world.com)

Το ξηραντήριο εμφανίζει συστηματικό σφάλμα ±1 ^oC από την προεπιλεγμένη θερμοκρασία ξήρανσης. Η θερμοκρασία και η υγρασία του ρεύματος αέρα εντός του ξηραντήριου καταγράφονταν με ενσύρματους αισθητήρες καταγραφής θερμοκρασίας και υγρασίας Hobo 8H (Onset Computer Corp., Southern MA, 146 USA) και οι μετρήσεις αποθηκεύονταν αυτόματα σε σταθμό αποθήκευσης δεδομένων HOBO Micro Station Data Loggers H21-002 (Onset Computer Corp., Southern MA, USA) από όπου τα δεδομένα μπορούν να επεξεργαστούν σε λογιστικά φύλλα τύπου Excel.

Οι ζυγίσεις των δειγμάτων πραγματοποιήθηκαν με ηλεκτρονικό ζυγό τύπου FY-300 ακριβείας ±0.02g και διακριτικής ικανότητας 0,01g. Η μέτρηση των διαστάσεων των δειγμάτων γινόταν με παχύμετρο ακριβείας ±0.02 mm και ο προσδιορισμός του όγκου γινόταν με τη μέθοδο της εμβάπτισης.

3.1.2. Ισοθερμοκρασιακή ξήρανση

Τα πειράματα σταθερής θερμοκρασίας πραγματοποιήθηκαν σε 3 διαφορετικές σειρές πειραμάτων (65°C, 55°C και 45°C). Το δείγμα κάθε πειράματος αποτελούταν από 14 βερίκοκα σε μορφή ημισφαιρίου χωρίς τον πυρήνα, τα οποία, προτού τοποθετηθούν στο ξηραντήριο, είχαν εμβαπτιστεί σε διάλυμα ασκορβικού οξέος αναλογίας 34 g/L για δέκα λεπτά για να αποφευχθεί η ενζυματική καστάνωση.

Η ζύγιση των δειγμάτων λάμβανε χώρα ανά μία ώρα, ενώ τέσσερα εξ αυτών ογκομετρούνταν ανά δύο ώρες. Στις ζυγίσεις και τις ογκομετρήσεις χρησιμοποιούνταν πάντοτε τα ίδια δείγματα.

Τα πειράματα ισοθερμοκρασιακής ξήρανσης έλαβαν χώρα για 27 ώρες στους 65°C, για 49 ώρες στους 55°C και για 52 ώρες στους 45°C. Όπως είναι λογικό, για

υψηλότερη θερμοκρασία ξήρανσης απαιτείται μικρότερο χρονικό διάστημα για να επιτευχθεί ισορροπία.

Με την ολοκλήρωση της ξήρανσης σε κάθε θερμοκρασία έγινε προσδιορισμός της ξηράς ουσίας των δειγμάτων. Η ξηρά ουσία προσδιορίστηκε μετά την παραμονή των δειγμάτων σε κλίβανο σε θερμοκρασία 105°C για 24 ώρες.

3.2. Γεωμετρική αναπαράσταση δείγματος (φρούτου)

Χάριν απλούστευσης του προβλήματα κατά την προτυποποίηση, έγιναν ορισμένες παραδοχές κατά την αναπαράσταση του δείγματος για το σχήμα και τη γεωμετρία του. Συγκεκριμένα, το βερίκοκο θεωρήθηκε σφαίρα και η αναπαράσταση του έγινε από ένα ημισφαίριο γνωστού όγκου, από το οποίο έχει αφαιρεθεί ο αντίστοιχος όγκος του πυρήνα.

Στους παρακάτω πίνακες παρουσιάζονται οι μετρήσεις όγκου και πάχους στα δείγματα στις διαφορετικές θερμοκρασίες ξήρανσης. Ο προσδιορισμός του όγκου έγινε με τη μέθοδο της ογκομέτρησης σε διάλυμα και ο προσδιορισμός του πάχους, τόσο των δειγμάτων όσο και των πυρήνων τους, με παχύμετρο.

Πίνακας 3-1 Πειραματικές τιμές για το αρχικό πάχος (ευθύγραμμο τμήμα BD βλ. Σχήμα 3-2) και τον αρχικό όγκο των δειγμάτων στους $45^{\circ}\rm C$

	A11	A12	A13	A14
Αρχικό Πάχος (mm)	18,00	16,84	18,50	15,75
Αρχικός Όγκος (cm³)	15,97	11,08	14,95	11,47

Πίνακας 3-2 Πειραματικές τιμές για το αρχικό πάχος (ευθύγραμμο τμήμα BD βλ. Σχήμα 3-2) και τον αρχικό όγκο των δειγμάτων στους $55^{\circ}\mathrm{C}$

	B11	B12	B13	B14
Αρχικό Πάχος (mm)	20,63	19,12	18,17	20,25
Αρχικός Όγκος (cm³)	15,99	15,82	12,66	15,14

Πίνακας 3-3 Πειραματικές τιμές για το αρχικό πάχος (ευθύγραμμο τμήμα BD βλ. Σχήμα 3-2) και τον αρχικό όγκο των δειγμάτων στους 65 °C

	C11	C12	C13	C14
Αρχικό Πάχος (mm)	18.4	14.87	17.54	20.00
Αρχικός Όγκος (cm³)	14.84	10.79	11.95	14.91

Στους παρακάτω πίνακες παρουσιάζεται το πάχος των πυρήνων των δειγμάτων:

Κουκούτσι	Πάχος d _i (mm)	Βάρος (g)
1	12,10	2,54
2	12,75	2,75
3	12,73	2,40
4	12,02	2,27
5	11,82	2,05
6	12,38	2,31
7	11,86	2,45
M.O.	12,24	mm

Πίνακας 3-4 Πειραματικές μετρήσεις πάχους (ευθύγραμμο τμήμα AC βλ. Σχήμα 3-2) για τους πυρήνες των δειγμάτων στους 45°C

Πίνακας 3-5 Πειραματικές μετρήσεις πάχους (ευθύγραμμο τμήμα AC βλ. Σχήμα 3-2) για τους πυρήνες των δειγμάτων στους 55°C

Κουκούτσι	Πάχος d _i (mm)	Βάρος (g)
1	12,60	2,90
2	13,08	2,00
3	12,05	2,85
4	10,54	2,95
5	12,25	2,92
6	12,38	2,89
7	12,91	2,50
М.О.	12,26	mm

Πίνακας 3-6 Πειραματικές μετρήσεις πάχους (ευθύγραμμο τμήμα AC βλ. Σχήμα 3-2) για τους πυρήνες των δειγμάτων στους $65^{\circ}\mathrm{C}$

Κουκούτσι	Πάχος d _i (mm)	Βάρος (g)
1	12,31	2,47
2	12,26	2,88
3	12,47	2,5
4	12,12	2,69
5	12,59	2,73
6	12,64	3,08
7	12,74	2,62
8	12,23	2,47
М.О.	12,42	mm

Η ακτίνα του πυρήνα (R_{stone}) θεωρήθηκε ίση με το μισό του μέσου πάχους των δειγμάτων, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3-2.

Για τον υπολογισμό του μέσου όγκου δειγμάτων χρησιμοποιήθηκε, για μεγαλύτερη ακρίβεια, ο γεωμετρικός μέσος όρος όπως δίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$\bar{V} = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^{n} V_i}$$
(27)

όπου η το πλήθος των δειγμάτων, Vi ο όγκος του δείγματος i.

Στο Σχήμα 3-2 φαίνεται ο μέσος όγκος των δειγμάτων σε αξονική συμμετρία.

Για τον υπολογισμό της ακτίνας του πυρήνα (R_{stone} – ευθύγραμμο τμήμα BC βλ.Σχήμα 3-2) υπολογίστηκε ο αριθμητικός μέσος όρος του πάχους των δειγμάτων, ο οποίος θεωρήθηκε ίσος με τη διάμετρο του πυρήνα, σύμφωνα με την εξίσωση:

$$\bar{d} = \frac{\sum_{i=1}^{n} d_i}{n} \tag{28}$$

όπου di το πάχος του δείγματος i.



Σχήμα 3-2 Γεωμετρική αναπαράσταση δείγματος σε αξονική συμμετρία, με ακτίνα δείγματος r, μέσο όγκο \overline{V} και ακτίνα πυρήνα ίση με το ήμισυ του πάχους του πυρήνα ($R_{stone}=\overline{d}/2$)

Στο Σχήμα 3-3 παρουσιάζεται δείγμα της μελετώμενης ποικιλίας:



Σχήμα 3-3. Βερίκοκα ποικιλίας Tom Cot (www.fruitsinfo.com)

Από τα παραπάνω, το βερίκοκο σχεδιάστηκε στο υπολογιστικό μοντέλο ως ένα ημικύκλιο με αξονική συμμετρία. Συγκεκριμένα, έγινε η παραδοχή ότι τόσο ο πυρήνας όσο και το βερίκοκο είναι σφαίρες, και από τον όγκο των δειγμάτων υπολογίστηκε η ακτίνα, και το χωρίο που προέκυψε είναι αυτό που φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 3-4 Γεωμετρία του βερίκοκου όπως προσομοιώθηκε στο Comsol 4.3b
Αξονική συμμετρία

Με την επιλογή της αξονικής συμμετρίας, πρακτικά αντικαθιστούνται οι τρεις διαστάσεις του δείγματος με δύο. Αν επιλέξουμε την αναπαράσταση του μελετώμενου χωρίου σε τρεις διαστάσεις, προκύπτει μία σφαίρα ακτίνας ίσης με την αρχική ακτίνα του δείγματος, από το εσωτερικό της οποίας έχει αφαιρεθεί μία σφαίρα ακτίνας ίσης με την ακτίνα του πυρήνα.

Η γεωμετρία στους τρεις άξονες φαίνεται στο σχήμα:



Σχήμα 3-5 Η γεωμετρία του μελετώμενου χωρίου στους 3 άξονες του χώρου

3.3. Μοντέλα

Για τη δημιουργία του υπολογιστικού μοντέλου υιοθετήθηκαν, όπως προαναφέρθηκε, ορισμένες παραδοχές. Επελέγησαν στο πρόγραμμα Comsol Multiphysics 4.3b το μοντέλο μεταφοράς μάζας μέσω διάχυσης νερού, το μοντέλο κινούμενου πλέγματος και το μοντέλο βελτιστοποίησης. Παρακάτω γίνεται εκτενής αναφορά στις συνθήκες που επελέγησαν στο κάθε μοντέλο και στις παραμέτρους που ορίστηκαν για την επίλυσή τους.

3.3.1. Διάχυση

Για τον ορισμό του προβλήματος της διάχυσης επελέγη το «Add Physics» από το Model Wizard, στη συνέχεια επελέγη το Chemical Species Transport, και τελικά το μοντέλο Transport of Diluted Species. Στην επιλογή Studies, επελέγη το Present Studies και ορίστηκε το πρόβλημα ως Time Dependent. Στο Coordinate System επελέγη το Global (προεπιλογή) και στην επιλογή Bulk Material επιλέγεται None. Η σταθερά Diffusion Coefficient, D_c, θεωρήθηκε User Defined. Στη συνέχεια ορίστηκαν οι θεμελιώδεις εξισώσεις που περιγράφουν το φαινόμενο της διάχυσης στο υπολογιστικό χωρίο αλλά και στη διεπιφάνεια (συνοριακές συνθήκες) του χωρίου.

3.3.1.1. Εξισώσεις χωρίου

Οι εξισώσεις που ορίζονται στο μοντέλο διάχυσης από το πρόγραμμα δίνονται παρακάτω:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (D_i \nabla c_i) = 0$$
⁽²⁹⁾

Και

$$\boldsymbol{N}_{\boldsymbol{i}} = -\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{c}_{\boldsymbol{i}} \tag{30}$$

όπου D_i ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης, N_i η ροή μάζας, c_i η περιεχόμενη υγρασία.

3.3.1.2. Συνοριακές συνθήκες

Στις συνοριακές συνθήκες επελέγη αρχικά η αξονική συμμετρία, Axial Symmetry 1, στα όρια 1 και 2 όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 3-6 Επιλογή αξονικής συμμετρίας στα όρια 1 και 2

Στη συνέχεια επελέγη No Flux για τα όρια 4 και 5 (θεωρώντας ότι η μεταφορά μάζας γίνεται μόνο από το εξωτερικό όριο) όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 3-7 Επιλογή αδιαπέρατων στην κίνηση του νερού τοιχωμάτων στα όρια 4 και 5 στο χωρίο

Τελικά στα όρια 3 και 6 επελέγη ροή μάζας, Flux, σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση:

$$-\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{N}_{i} = k_{c,j}(c_{b,j} - c_{i}) \tag{31}$$

όπου n το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια του χωρίου, $k_{c,j}$ ο συντελεστής μεταφοράς μάζας, $c_{b,j}$ η συγκέντρωση του κενού.

Τα σύνορα στα οποία επελέγη μεταφορά μάζας (νερού) παρουσιάζονται παρακάτω:



Σχήμα 3-8 Σύνορα 3 και 6 του χωρίου στα οποία θεωρήθηκε ότι μεταφέρεται η μάζα

Ο συντελεστής μεταφοράς μάζας ορίζεται ως k_m και προσδιορίζεται, όπως ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης, από τη διαδικασία βελτιστοποίσης. Η συγκέντρωση της υγρασίας στην επιφάνεια του ημισφαιρίου c_b (σύνορο 3 και 6) υπολογίστηκε συναρτήσει της ισόρροπης περιεχόμενης υγρασίας για κάθε θερμοκρασία ξήρανσης σύμφωνα με την εξίσωση:

$$c_b = \left(1 - \frac{1}{M_e + 1}\right) * \frac{\rho_{prod}}{M_w} \tag{32}$$

Στη συνέχεια, εισήχθη η περιεχόμενη υγρασία ισορροπίας για κάθε θερμοκρασία, όπως προσδιορίστηκε από την καμπύλη περιεχόμενης υγρασίας – χρόνου. Η ισόρροπη περιεχόμενη υγρασία είναι η ελάχιστη υγρασία στο δείγμα, η οποία παραμένει πρακτικά σταθερή από κάποια χρονική στιγμή μέχρι το πέρας της ξήρανσης για τις συγκεκριμένες συνθήκες ξήρανσης (θερμοκρασία, πίεση και σχετική υγρασία αέρα ξήρανσης).

Η περιεχόμενη υγρασία για την κάθε θερμοκρασία δίνεται στον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 3-7. Ισόρροπη περιεχόμενη υγρασία για κάθε θερμοκρασία ξήρανσης

т (°С)	M _e (kg _w /kg _{dm})
45	0.47
55	0.33
65	0.32

Σημειώνεται ότι τα αποτελέσματα του μοντέλου δεν διαφοροποιούνται αν θεωρηθεί ότι η ροή συμβαίνει στα όρια 4 και 5 αντί στα όρια 3 και 6 (δηλαδή αν θεωρήσουμε ότι η μεταφορά μάζας συμβαίνει στο εσωτερικό του χωρίου), ωστόσο για τη διευκόλυνση του κινούμενου πλέγματος σε αξονική συμμετρία κρίθηκε σκόπιμο να θεωρηθεί ότι μεταφορά μάζας συμβαίνει στο εξωτερικό σύνορο του χωρίου.

3.3.2. Κινούμενο πλέγμα (moving mesh)

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο ορίστηκε η συρρίκνωση των δειγμάτων. Η συνολική συρρίκνωση υπολογίστηκε ως ο λόγος της διαφοράς του όγκου του δείγματος μετά το πέρας της ξήρανσης από την αρχική τιμή του όγκου του δείγματος προς τον αρχικό όγκο. Υπολογίστηκε για τις τρεις θερμοκρασίες ξήρανσης σε 4 δείγματα κάθε φορά.

45°C	55 °C	65 °C	
86.2%	83.5%	87.9%	
81.5%	85.2%	83.8%	
85.4%	77.8%	83.0%	
80.6%	81.9%	84.6%	
M.O. 83.4%	82.1%	84.8%	

Πίνακας 3-8. Ποσοστό μείωσης του αρχικού όγκου των 4 δειγμάτων σε κάθε θερμοκρασία ξήρανσης

Βάσει των υπολογισθέντων ποσοστών συρρίκνωσης συμπεραίνεται ότι η συρρίκνωση των δειγμάτων σε κάθε θερμοκρασία ξήρανσης είναι πάνω από 80% και προφανώς δεν μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα.

Για την εισαγωγή της συρρίκνωσης στο υπολογιστικό μοντέλο επελέγη από το Model Builder το Moving Mesh (ale) το οποίο χρησιμοποιεί τη μέθοδο ALE που προαναφέρθηκε για τον υπολογισμό της μεταβολής του όγκου του μελετώμενου υπολογιστικού χωρίου.

Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται το αρχικό πλέγμα που ορίστηκε προκειμένου να λυθεί το πρόβλημα:



Σχήμα 3-9 Πλέγμα κόμβων στο αρχικό μελετώμενο χωρίο

3.3.2.1. Εξισώσεις υπολογιστικού χωρίου

Στην επιλογή Moving Mesh (ale) προστέθηκε αρχικά η επιλογή Domains με τις υποεπιλογές Fixed Mesh 1 – Selection: All Domains και Free Deformation 1 - Selection: Manual και επελέγη το χωρίο και το προσθέτουμε. Ουσιαστικά θεωρήθηκε ότι η παραμόρφωση του χωρίου εξαρτάται από τις ΣΣ.

3.3.2.2. Συνοριακές συνθήκες

Στη συνέχεια προστέθηκε η επιλογή Boundaries ως υποεπιλογή του Moving Mesh και ορίστηκαν τα εξής:

- Prescribed Mesh Displacement 1 Επιλέγονται τα όρια 1 και 2 και επιλέγεται μετατόπιση στο Prescribed r Displacement dr = 0 και στο Prescribed z Displacement το dz αφήνεται ελεύθερο (μετατόπιση υποκείμενη στις συνοριακές συνθήκες και μόνο).
- Prescribed Mesh Displacement 2 Επιλέγονται τα όρια 4 και 5 και τόσο στο Prescribed r Displacement όσο και στο Prescribed z Displacement θεωρούμε dr = dz = 0.
- Prescribed Mesh Velocity 1 Επιλέγονται τα όρια 3 και 6 και στις επιλογές Prescribed r Velocity και Prescribed z Velocity συμπληρώνεται η έκφραση -Vr*nr και -Vz*nz αντίστοιχα, όπου nr και nz οι συνιστώσες του n στη διεύθυνση r και z αντίστοιχα και Vr και Vz οι συνιστώσες του V (ταχύτητα μείωσης του όγκου) στη διεύθυνση r και z αντίστοιχα

Η ταχύτητα μείωσης του όγκου του δείγματος προσδιορίστηκε από τις πειραματικές τιμές συρρίκνωσης με τη χρήση του στατιστικού προγράμματος Statgraphics Centurion XVI (Statpoint Technologies, Inc, VA, USA). Για την εύρεση της βέλτιστης εξίσωσης συσχέτισης της ταχύτητας συρρίκνωσης με την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία υιοθετήθηκε η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων Ρ≤0.05 και ελέγχθηκαν διάφορα μοντέλα από τα οποία υιοθετήθηκε αυτό που περιγράφεται στον παρακάτω πίνακα:

Πίνακας 3-9 Ταχύτητα μείωσης του όγκου του χωρίου συναρτήσει της σχετικής υγρασίας σε κάθε θερμοκρασία ξήρανσης

I/L - J(MR) [11/5]		
T [°C]	Εξίσωση	R ² [%]
45	exp(-16.97 + 4.75×MR)	99.25
55	exp(-16.30 + 4.28×MR)	99.58
65	exp(-15.86 + 4.0836×MR)	99.14

r/t = f(MR) [m/s]

Για να γίνει αποδεκτή μία συνάρτηση συρρίκνωσης, ο συντελεστής προσδιορισμού, R², πρέπει να είναι μεγαλύτερος από 95%.

Ο όγκος του δείγματος συναρτήσει της ακτίνας, οποιαδήποτε χρονική στιγμή, t, δίνεται από την εξίσωση:

$$V = \frac{2}{3}\pi r^3 - \frac{2}{3}\pi R_{stone}^3$$
(33)

όπου r η ακτίνα τη χρονική στιγμή t και R_{stone} η ακτίνα του πυρήνα.

Λύνοντας την εξίσωση (33) ως προς την ακτίνα προκύπτει η εξίσωση:

$$r = \sqrt[3]{\frac{3}{2\pi}V + R_{stone}^3}$$
(34)

η οποία χρησιμοποιήθηκε για τον προσδιορισμό του λόγου r/t, δηλαδή της ταχύτητας συρρίκνωσης.

Στα παρακάτω σχήματα παρουσιάζονται αντίστοιχα οι εξισώσεις όπως προέκυψαν από τη στατιστική επεξεργασία των πειραματικών μετρήσεων συρρίκνωσης:

Plot of Fitted Model r/t_[m/s] = exp(-16,9725 + 4,7565*MR)



Σχήμα 3-10 Ταχύτητα συρρίκνωσης στους 45°C συναρτήσει της αδιάστατης περιεχόμενης υγρασίας, MR



Σχήμα 3-11 Ταχύτητα συρρίκνωσης στους 55°C συναρτήσει της αδιάστατης περιεχόμενης υγρασίας, MR

Plot of Fitted Model r/t_[m/s] = exp(-15,8589 + 4,0836*MR)



Σχήμα 3-12 Ταχύτητα συρρίκνωσης στους 65°C συναρτήσει της αδιάστατης περιεχόμενης υγρασίας, MR

3.3.3. Βελτιστοποίηση (optimization)

Η βελτιστοποίηση επελέγη ως τρόπος αντιμετώπισης της ύπαρξης περισσότερων από μία λύσεων στο εξεταζόμενο πρόβλημα. Η διαδικασία της βελτιστοποίησης βρίσκει υπολογιστικές λύσεις, τις οποίες τις συγκρίνει με τις πειραματικές τιμές, με σκοπό την αποδοχή της καλύτερης λύσης, υπολογίζοντας σε κάθε επανάληψη την εγγύτητα της αναζητούμενης λύσης με τα πειραματικά δεδομένα. Δηλαδή το μοντέλο που δημιουργήθηκε προέβλεπε μία λύση σε ικανοποιητική συμφωνία με τις πειραματικές τιμές.

Για τη βελτιστοποίηση του προβλήματος, επιλέγεται από το Model Builder το μοντέλο Optimization και σε αυτό ορίζονται εν συνεχεία τα:

Global Least Squares 1 όπου ως input χρησιμοποιείται ένα αρχείο στο οποίο καταγράφονται η περιεχόμενη υγρασία (kg νερού ανά kg ξηράς ουσίας) και ο χρόνος ξήρανσης (s). Για τη δημιουργία του αρχείου αυτού χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα Curve Expert 1.4. Μετά την εισαγωγή, ως input στο πρόγραμμα, του χρόνου των μετρήσεων και των αντίστοιχων τιμών της περιεχόμενης υγρασίας, εφαρμόστηκε γραμμική παρεμβολή (Linear Interpolation) και ως output εξήχθη ένας πίνακας με τις τιμές της υγρασίας σε κάθε ώρα. Η επιλογή αυτή έγινε επειδή οι πειραματικές μετρήσεις δεν ήταν ακριβώς ανά ώρα. Στη συνέχεια προστίθεται η επιλογή Time Column και η επιλογή Value Column όπου στο κελί Expression συμπληρώνεται η εξίσωση υπολογισμού της περιεχόμενης υγρασίας από τα πειραματικά δεδομένα.

Global Control Variables 1 όπου ορίστηκαν οι παράμετροι που θα συμμετείχαν στη βελτιστοποίηση και οι αρχικές τους τιμές.

Variable	Initial Value
k _m	0.001 [m/s]
Ea	55000 [J/mol]
M ₁	0.10

Πίνακας 3-10 Ορισμός μεταβλητών ελέγχου κατά το στάδιο της βελτιστοποίησης -45°C

Πίνακας 3-11 Ορισμός μεταβλητών ελέγχου κατά το στάδιο της βελτιστοποίησης -55°C

Variable	Initial Value
k _m	0.001 [m/s]
Ea	59000 [J/mol]
M_1	0.10

Πίνακας 3-12 Ορισμός μεταβλητών ελέγχου κατά το στάδιο της βελτιστοποίησης -65°C

Variable	Initial Value
k _m	0.001 [m/s]
Ea	65000 [J/mol]
M1	0.10

Η αρχική τιμή της ενέργειας ενεργοποίησης (Ε_a) επιλεγόταν μεγαλύτερη για υψηλότερες θερμοκρασίες ξήρανσης. Το μέγεθος αύξησης της ενέργειας ενεργοποίησης (Ε_a) ανάλογα με την αύξηση της θερμοκρασίας υπολογίστηκε μετά από αρκετές δοκιμές για την κάθε θερμοκρασία.

3.3.4. Solvers

Για την επίλυση του προβλήματος επελέγη ένας Time Dependent Solver και ένας Optimization Solver. Για τη βελτιστοποίηση επελέγη αρχικά, η μέθοδος Levenberg-Marquardt ορίζοντας μόνο αρχικές τιμές στις παραμέτρους βελτιστοποίησης. Η επιλογή αυτή έγινε επειδή σε προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων, η μέθοδος αυτή συγκλίνει ταχύτερα, ωστόσο δε λειτουργεί με περιορισμούς (Lower & Upper Bounds). Μετά την επίλυση με τη μέθοδο βελτιστοποίησης Levenberg-Marquardt, έχοντας μια καλύτερη αρχική προσέγγιση των παραμέτρων βελτιστοποίησης, χρησιμοποιήθηκαν τα αποτελέσματα αυτά ως αρχικές τιμές για την εφαρμογή της μεθόδου βελτιστοποίησης SNOPT με όρια κοντινά στις αρχικές τιμές.

4. ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Μετά την προτυποποίηση της διεργασίας και την ολοκληρωμένη επίλυση του μοντέλου, προσδιορίστηκε ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης (D_{eff}) στα υπό ξήρανση δείγματα, με βάση την πειραματική καμπύλη ξήρανσης. Συγκεκριμένα, μετά την επιλογή αρχικών τιμών στις παραμέτρους βελτιστοποίησης (ενέργεια ενεργοποίησης (E_a), συντελεστής μεταφοράς μάζας (k_m) και λογαριθμική παράμετρος (M₁)) συγκρινόταν το διάγραμμα της περιεχόμενης υγρασίας που προέκυπτε από την υπολογιστική επίλυση με το αντίστοιχο διάγραμμα των πειραματικών μετρήσεων. Η επίλυση για κάθε θερμοκρασία θεωρήθηκε ως ολοκληρωμένη όταν η απόκλιση των πειραματικών και των υπολογιστικών τιμών

Ο υπολογισμός των σφαλμάτων, F, προκειμένου να βρεθεί η βέλτιστη λύση, έγινε από την εξίσωση:

$$F = \left| \frac{MC_{pre} - MC_{exp}}{MC_{exp}} \right|$$
(35)

όπου *MC_{pre}* η περιεχόμενη υγρασία ξηρής βάσης, όπως προβλέπεται από το μοντέλο (predicted) και *MC_{exp}* η περιεχόμενη υγρασία ξηρής βάσης όπως μετρήθηκε πειραματικά (experimental).

Αντίστοιχα, ο υπολογισμός του μέσου σχετικού σφάλματος (ΜΣΣ - Mean Relative Error, MRE) έγινε από την εξίσωση:

$$MRE = 100 * \frac{\overline{F}}{n}$$
(36)

όπου \overline{F} η μέση τιμή των σφαλμάτων και
η το πλήθος των μετρήσεων.

Ένα άλλο χρήσιμο μέγεθος αποτελεί η αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία, ο προσδιορισμός της οποίας έγινε από την εξίσωση:

$$MR = \frac{MC_{db}}{MC_{db_{in}}} \tag{37}$$

όπου MC_{db} η περιεχόμενη υγρασία ξηρής βάσης και $MC_{db_{in}}$ η αρχική της τιμή.

Η σχετική περιεχόμενη υγρασία χρησιμοποιήθηκε ως ανεξάρτητη μεταβλητή για τον προσδιορισμό της συρρίκνωσης του προϊόντος και του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης.

Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία και η μεταβολή της σε σχέση με το χρόνο για κάθε μία από τις εξεταζόμενες θερμοκρασίες.



Σχήμα 4-1 Μεταβολή της σχετικής υγρασίας όπως μετρήθηκε πειραματικά στις θερμοκρασίες 45, 55 και $65^{\circ}\mathrm{C}$

Για να γίνει καλύτερα αντιληπτή η διαφορά στους χρόνους ξήρανσης σε κάθε θερμοκρασία, μελετήθηκε ο απαιτούμενος χρόνος ξήρανσης μέχρι το σημείο όπου η περιεχόμενη αδιάστατη υγρασία ισορροπίας ισούται με 0.06 (πέρας της ξήρανσης). Παρατηρήθηκε ότι, ο χρόνος της ξήρανσης του προϊόντος μειώνεται με την αύξηση της θερμοκρασίας, ξεκινώντας από 52 ώρες στους 45°C, 28 ώρες στους 55°C και μόλις 17 ώρες στους 65°C.

Παρακάτω παρουσιάζονται τα πειραματικά και υπολογιστικά αποτελέσματα προσομοίωσης συναρτήσει της περιεχόμενης υγρασία των υπό ξήρανση δειγμάτων.

4.1. Περίπτωση ξήρανσης στους 45 °C

Στην ενότητα αυτή παρατίθενται τα πειραματικά και υπολογιστικά αποτελέσματα για τη ξήρανση στους 45°C.

4.1.1. Περιεχόμενη υγρασία

Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται η περιεχόμενη υγρασία συναρτήσει του χρόνου ξήρανσης, όπως αυτή προσδιορίστηκε από τις πειραματικές μετρήσεις και το υπολογιστικό μοντέλο:



Σχήμα 4-2 Μεταβολή περιεχόμενης υγρασίας, MC, σε σχέση με το χρόνο στους $45^{\rm o}{\rm C}$

Όπως παρατηρείται, η απόκλιση των υπολογιζόμενων τιμών από τις πειραματικές μετρήσεις είναι πολύ μικρή και το μέγιστο σφάλμα, που εμφανίζεται στις 46 ώρες, είναι 0.52%. Το ΜΣΣ υπολογίστηκε ίσο με 0.47%.

4.1.2. Συντελεστής διάχυσης

Ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης (D_{eff}) επηρεάζεται κυρίως από τη θερμοκρασία ξήρανσης, αλλά και σε μικρότερο βαθμό από την περιεχόμενη υγρασία (Xanthopoulos et al., 2012b). Για τον υπολογισμό και την προτυποποίηση του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης χρησιμοποιήθηκε η εξίσωση η οποία και αναπτύχθηκε στα πλαίσια αυτής της εργασίας λόγω της απλότητας της και των λιγότερων παραμέτρων που συμμετέχουν στη βελτιστοποίηση:

$$D_{eff} = \exp(\frac{M_1}{MR} - \frac{E_a}{R_i T})$$
(38)

όπου M_1 και E_a παράμετροι βελτιστοποίησης.

Για τη μοντελοποίηση του συντελεστή διάχυσης έχουν προταθεί αρκετές εξισώσεις. Η επικρατέστερη αυτών αποτελεί η εξίσωση (16), δηλαδή η μεταβολή του συντελεστή διάχυσης σύμφωνα με τη σχέση Arrhenius, όπως χρησιμοποιήθηκε και από τον Doymaz (2004) για τον προσδιορισμό του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης σε καρότα. Στην εξίσωση αυτή, όμως, δε λαμβάνεται υπόψη η εξάρτηση του D_{eff} από την περιεχόμενη υγρασία.

Η προσπάθεια που έγινε για τον προσδιορισμό του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης κατά τη ξήρανση φρούτων αποτυπώνεται παρακάτω.

Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζεται η εξάρτηση του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης από την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία, όπως αυτή προέκυψε από την προσομοίωση της διεργασίας της ξήρανσης και τη μοντελοποίηση του προβλήματος:



Σχήμα 4-3 Μεταβολή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης με την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία στους $45^{\circ}\mathrm{C}$

Για τους 45 °C ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης κυμαίνεται μεταξύ $1.685 \times 10^{-10} - 1.701 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Η μέση τιμή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης σε αυτή τη θερμοκρασία βρέθηκε ίση με $1.69 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$.

Οι Σαραβάκος και Μαρούλης (2001) ανέφεραν ότι η αύξηση του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης με τη μείωση της περιεχόμενης υγρασίας είναι χαρακτηριστικό του πορώδους των τροφίμων. Η αύξηση του D_{eff} σε διαστήματα χαμηλής περιεχόμενης υγρασίας (MR <0,4) διευκολύνει τη μεταφορά του νερού στο εσωτερικό του προϊόντος ξήρανσης λόγω του σχηματισμού πορώδους. Σε πολύ χαμηλή περιεχόμενη υγρασία (MR <0,1), το ισχυρά δεσμευμένο νερό στους πόρους των τροφίμων, προκαλεί κατακόρυφη μείωση στην ικανότητα διάχυσης του νερού. To 2012 ο Ruiz-Lopez ερμήνευσε την παρατηρούμενη αύξηση του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης στα αρχικά στάδια ξήρανσης στηριζόμενος στην αύξηση της θερμοκρασίας του προϊόντος ξήρανσης δεδομένου ότι ο Deff εξαρτάται ισχυρά από τη θερμοκρασία και σε μικρότερο βαθμό από την υγρασία. Στο τελευταίο στάδιο της ξήρανσης, η απότομη μείωση του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης οφείλεται στη μη διαθεσιμότητα του νερού στα κύτταρα του τροφίμου, παρόλο που η θερμοκρασία του προϊόντος είναι ίση με τη θερμοκρασία του αέρα ξήρανσης (Xanthopoulos et al., 2012b).

Η μεταβολή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης με το χρόνο ξήρανσης δίνεται παρακάτω:



Schur 4-4 Metabolh tou suntelesth diacushs me to cróno zhransh; stouz 45 $^{\rm o}{\rm C}$

Παρατηρείται ότι, εφόσον η σχετική περιεχόμενη υγρασία μειώνεται με το χρόνο, η κλίση στα διαγράμματα 4-3 και 4-4 είναι αντίθετη.

Στο σημείο αυτό πρέπει να αναφέρουμε ότι το Σχήμα 4-3 που απεικονίζει τη μεταβολή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης με την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία έχει προέλθει από την προσομοίωση με το πρόγραμμα Comsol 4.3b και λαμβάνει υπόψη τη βελτιστοποίηση του μοντέλου. Οι τιμές που έχουν χρησιμοποιηθεί για το Σχήμα 4-4 είναι οι ίδιες με εκείνες από το οποίες προέκυψε το προηγούμενο σχήμα.

4.1.3. Συρρίκνωση

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται τόσο η μείωση της ακτίνας του υπολογιστικού χωρίου σε σχέση με το χρόνο ξήρανσης, όσο και η κατανομή της σχετικής περιεχόμενης υγρασίας στο μελετώμενο χωρίο, μετά το πέρας της ξήρανσης.

Στο επόμενο σχήμα βλέπουμε τη μείωση της ακτίνας σε σχέση με την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία.



Σχήμα 4-5 Μείωση της ακτίνας του μελετώμενου χωρίου σε σχέση με την αδιάστατη υγρασία στους $45^{\circ}\mathrm{C}$

Όπως φαίνεται η ακτίνα μειώνεται κατά 50% στη θερμοκρασία αυτή, δηλαδή, με βάση την εξίσωση (33) το υπολογιστικό μοντέλο προέβλεψε μείωση του όγκου κατά 80%, αποτέλεσμα που βρίσκεται σε συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα που φαίνονται στον πίνακα 3-8.

Αρχικά παρατηρείται μία γραμμική μείωση της ακτίνας και η οποία στη συνέχεια μειώνεται εκθετικά, όπως ήταν αναμενόμενο από την εξίσωση συρρίκνωσης που προέκυψε από τη στατιστική επεξεργασία των πειραματικών μετρήσεων. Ο όγκος σε οποιαδήποτε στιγμή αλλά και στην κατάσταση ισορροπίας υπολογίζεται από το πρόγραμμα από την εξίσωση (33) και η συρρίκνωση, η οποία φαίνεται στο επόμενο διάγραμμα, από την εξίσωση (17).



Σχήμα 4-6 Υπολογιζόμενη συρρίκνωση του δείγματος συναρτήσει της μέσης περιεχόμενης υγρασίας στους 45 °C

Τέλος στο επόμενο σχήμα παρουσιάζεται η αρχική γεωμετρία του σχήματος (με τη μαύρη γραμμή στο περίγραμμα), η γεωμετρία του χωρίου μετά τη συρρίκνωση εξαιτίας της απομάκρυνσης της περιεχόμενης υγρασίας κατά τη ξήρανση (με την μπλε γραμμή στο επίπεδο) και η κατανομή της υγρασίας στο πέρας των 52 ωρών ξήρανσης στους 45°C.



Σχήμα 4-7 Τρισδιάστατη απεικόνιση της περιεχόμενης αδιάστατης υγρασίας και της συρρίκνωσης κατά τη ξήρανση στους 45 $^{\rm o}{\rm C}$

Η δεξιά κλίμακα αναφέρεται στην περιεχόμενη αδιάστατη υγρασία κατά την προσομοίωση του ημισφαιρίου στους τρεις άξονες, ενώ η κλίμακα που βρίσκεται αριστερά είναι η κλίμακα της αδιάστατης περιεχόμενης υγρασία της προβολής του χωρίου στους δύο άξονες του επιπέδου.

4.2. Περίπτωση ξήρανσης στους 55°C

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα πειραματικά και υπολογιστικά αποτελέσματα, όπως προέκυψαν για τη ξήρανση στους 55°C.

4.2.1. Περιεχόμενη υγρασία

Η μεταβολή της περιεχόμενης υγρασίας συναρτήσει του χρόνου ξήρανσης δίνεται παρακάτω.





Οι αποκλίσεις των προβλεπόμενων από το υπολογιστικό μοντέλο τιμών από τις πειραματικές μετρήσεις είναι ελαφρώς μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες των 45°C, ωστόσο το αντίστοιχο μέγιστο σφάλμα ήταν 0.76 % το οποίο εντοπίζεται στις 24 ώρες και το ΜΣΣ βρέθηκε ίσο με 0.88%.

4.2.2. Συντελεστής διάχυσης

Αντίστοιχα, προσδιορίστηκε ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης στη θερμοκρασία ξήρανσης των 55 °C ο οποίος παρουσιάζεται συναρτήσει της αδιάστατης περιεχόμενης υγρασίας παρακάτω.



Σχήμα 4-9 Μεταβολή του συντελεστή διάχυσης με την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία για τους 55°C

Ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης υπολογίστηκε στο εύρος τιμών 2.89×10⁻¹⁰ - 2.95×10⁻¹⁰ m²/s. Το διάστημα στο οποίο κυμαίνεται ο συντελεστής διάχυσης σε αυτή τη θερμοκρασία είναι μικρότερο από την προηγούμενη μελετώμενη περίπτωση. Ωστόσο, ο συντελεστής διάχυσης αυξήθηκε, αυξανομένης της θερμοκρασίας. Η αύξηση του συντελεστή διάχυσης οφείλεται στην αυξημένη κινητικότητα των μορίων νερού καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία.

Η μέση τιμή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης σε αυτή τη θερμοκρασία, βρέθηκε ίση με 2.91×10^{-10} m²/s, δηλαδή ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης στους 55° C υπολογίστηκε κατά 72% μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο στους 45° C.

Η μεταβολή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης με το χρόνο ξήρανσης δίνεται παρακάτω.



Σχήμα 4-10 Εξέλιξη του συντελεστή διάχυσης σε σχέση με το χρόνο στους 55°C

4.2.3. Συρρίκνωση

Η ξήρανση στη θερμοκρασία αυτή διήρκησε 35 ώρες κατά τη μοντελοποίηση, ωστόσο η συρρίκνωση του δείγματος αναμένεται να είναι της ίδιας τάξης, δεδομένου ότι οι εξισώσεις συρρίκνωσης για τις θερμοκρασίες των 45 και 55 °C είναι σχεδόν ταυτόσημες. Αυτό οφείλεται στο ότι η συρρίκνωση του προϊόντος εξαρτάται (σε αντίθεση με το συντελεστή διάχυσης) κυρίως από την περιεχόμενη υγρασία και όχι από τη θερμοκρασία της ξήρανσης (Xanthopoulos et al., 2012b).

Παρακάτω παρατίθενται τα αντίστοιχα διαγράμματα μείωσης της ακτίνας και της συρρίκνωσης για τους 55 $^{\rm o}$ C.



Σχήμα 4-11 Μείωση της ακτίνας συναρτήσει της σχετικής περιεχόμενης υγρασίας για τους 55 $^{\circ}\mathrm{C}$

Όπως παρατηρείται, η ακτίνα μειώνεται εξίσου σε αυτή τη θερμοκρασία, ωστόσο η κλίση της ευθείας αρχικά (περιοχή αδιάστατης υγρασίας: 0.78-1.0) είναι μικρότερη από την αντίστοιχη κλίση για τους 45 °C.

Στο επόμενο σχήμα φαίνεται η αδιάστατη μεταβολή του όγκου του χωρίου, σε σχέση με την περιεχόμενη υγρασία του δείγματος.



Σχήμα 4-12 Μεταβολή της συρρίκνωσης συναρτήσει της μέσης περιεχό
μενης υγρασίας στους 55 $^{\rm o}{\rm C}$

Όπως φαίνεται, η συρρίκνωση που επιτυγχάνεται στους 55°C είναι ελαφρώς μικρότερη από εκείνη στους 45 °C, λίγο κάτω από 0.05 σε σχέση με το 0.1 των 45°C.

Στο επόμενο τρισδιάστατο σχήμα φαίνεται πιο καθαρά η διαφορά αυτή στη συρρίκνωση του προϊόντος:



Σχήμα 4-13 Τρισδιάστατη απεικόνιση της περιεχόμενης αδιάστατης υγρασίας και της συρρίκνωσης του μελετώμενου χωρίου στους 55 °C

4.3. Περίπτωση ξήρανσης στους 65°C

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα υπολογιστικά και πειραματικά αποτελέσματα όπως προέκυψαν για τη θερμοκρασία των 65°C.

4.3.1. Περιεχόμενη υγρασία

Στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζεται η μείωση της περιεχόμενης υγρασίας συναρτήσει του χρόνου ξήρανσης στους 65°C.



Σχήμα 4-14 Μεταβολή περιεχόμενης υγρασίας, MC, σε σχέση με το χρόνο στους $65^{\rm o}{\rm C}$

Το μέγιστο σφάλμα ανάμεσα στις πειραματικές μετρήσεις και τις προβλεπόμενες υπολογιστικές τιμές βρέθηκε ίσο με 0.596% και το ΜΣΣ ίσο με 1.32%. Η σχετικά αυξημένη τιμή του ΜΣΣ μπορεί να οφείλεται και στον περιορισμένο (συγκριτικά με τις άλλες δύο θερμοκρασίες) αριθμό μετρήσεων.

4.3.2. Συντελεστής διάχυσης

Αντίστοιχα, προσδιορίστηκε ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης στη θερμοκρασία ξήρανσης των 65°C, ο οποίος παρουσιάζεται συναρτήσει της αδιάστατης περιεχόμενης υγρασίας στο σχήμα 4-15.



Σχήμα 4-15 Μεταβολή του συντελεστή διάχυσης με τη σχετική περιεχό
μενη υγρασία για τους $65^{\circ}\mathrm{C}$

Ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης σε αυτή τη θερμοκρασία κυμαίνεται μεταξύ $4.0 \times 10^{-10} - 9.0 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Ο μέσος συντελεστής διάχυσης που υπολογίστηκε τους 65° C ήταν $6.56 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Το διάστημα κύμανσης του D_{eff} στη θερμοκρασία αυτή, μπορεί να εξηγηθεί από τη μεγάλη απόκλιση της αρχικής θερμοκρασίας του προϊόντος από τη θερμοκρασία του φούρνου ξήρανσης.

Ο μέσος φαινόμενος συντελεστής διάχυσης στη θερμοκρασία αυτή είναι περίπου 1.3 φορές μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο στους 55°C και 2.9 φορές μεγαλύτερος από τον αντίστοιχο στους 45°C. Η μεταβολή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης με το χρόνο ξήρανσης δίνεται παρακάτω.



Σχήμα 4-16 Εξέλιξη του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης σε σχέση με το χρόνο για τους $65^{\circ}\mathrm{C}$

4.3.3. Συρρίκνωση

Στην ενότητα αυτή παρατίθενται τα διαγράμματα μείωσης της ακτίνας, συρρίκνωσης του ημισφαιρίου και κατανομής της υγρασίας μετά το πέρας της ξήρανσης για τη θερμοκρασία των 65°C.



Σχήμα 4-17 Μείωση της ακτίνας συναρτήσει της σχετικής περιεχόμενης υγρασίας για τους 65 $^{\circ}\mathrm{C}$

Σημειώνεται ότι ενώ στους 45 και 55°C η ακτίνα μειώθηκε από 0.022 σε 0.011m (μείωση ακτίνας κατά 50%, δηλαδή μείωση όγκου κατά 80%), στη θερμοκρασία αυτή η τελική ακτίνα ήταν 0.013m, 2 χιλιοστά μεγαλύτερη από τις προηγούμενες θερμοκρασίες.

Στο επόμενο σχήμα φαίνεται η συσχέτιση της συρρίκνωσης με την περιεχόμενη υγρασία.



Σχήμα 4-18 Μεταβολή συρρίκνωσης σε σχέση με την περιεχόμενη υγρασία για τους $65^{\circ}\mathrm{C}$

Αντίστοιχα με το σχήμα 4-17, συγκρίνοντας τη συρρίκνωση στους 65°C, η οποία φτάνει μόλις στο 0.15 με τη συρρίκνωση στις θερμοκρασίες των 45°C που υπολογίστηκε ίση με 0.1 και με τη εκείνη των 55°C που υπολογίστηκε ίση με 0.05, παρατηρούμε ότι η τελική συρρίκνωση στη θερμοκρασία αυτή ήταν η μικρότερη.

Στο επόμενο σχήμα φαίνεται η κατανομή της αδιάστατης περιεχόμενης υγρασίας καθώς και η συρρίκνωση του ημισφαιρίου μετά το πέρας της ξήρανσης στους 65°C.



Σχήμα 4-19 Τρισδιάστατη απεικόνιση της περιεχόμενης σχετικής υγρασίας και της συρρίκνωσης του μελετώμενου χωρίου στους 65 $^{\rm o}{\rm C}$

4.4. Συμπεράσματα

Στο επόμενο σχήμα φαίνεται η σύγκλιση πειραματικών τιμών (σημεία πάνω στο γράφημα) και υπολογιστικού μοντέλου (συνεχείς γραμμές στο γράφημα), καθώς και το πέρας της ξήρανση (MR=0.06) για κάθε θερμοκρασία



Σχήμα 4-20 Συνολική απεικόνιση πειραματικών μετρήσεων και προβλεπόμενων τιμών

Ο μέσος φαινόμενος συντελεστής διάχυσης σε κάθε θερμοκρασία προσδιορίστηκε ως η μέση τιμή των υπολογισμένων τιμών σε κάθε θερμοκρασία σύμφωνα με την εξίσωση:

$$D_{eff_average} = \frac{1}{t_f} \sum_{t=0}^{t_f} D_t$$
(39)

όπου $D_{eff_average}$ ο μέσος φαινόμενος συντελεστής διάχυσης και D_t ο χρονικά μεταβαλλόμενος φαινόμενος συντελεστής διάχυσης.

Στην εξίσωση (38) υπολογίστηκε επίσης η ενέργεια ενεργοποίησης E_a , ο συντελεστής μεταφοράς μάζας k_m και η λογαριθμική παράμετρος βελτιστοποίησης M_1 .

Τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη βελτιστοποίηση παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα:

Έχοντας υπολογίσει το φαινόμενο συντελεστή διάχυσης σε κάθε θερμοκρασία, καθώς και την εξάρτησή του τόσο από το χρόνο ξήρανσης όσο και την περιεχόμενη υγρασία, κρίνεται σκόπιμο να μελετηθεί η εξάρτηση του μέσου φαινόμενου συντελεστή διάχυσης από τη θερμοκρασία. Η σχέση αυτή παρουσιάζεται στο επόμενο σχήμα.

^{45°}C 55°C 65°C k_m [m/s] 1.00×10⁻⁵ 9.99×10⁻⁵ 0.85×10^{-2} M₁ 0.104 0.009 0.052 E_a [kJ/mol] 59.6 60.0 60.8 1.69×10^{-10} 2.91×10^{-10} 6.67×10⁻¹⁰ $D_{eff_{average}} [m^2/s]$

Πίνακας 4-1 Αποτελέσματα βελτιστοποίησης για το συντελεστή μεταφοράς μάζας, τη λογαριθμική παράμετρο, την ενέργεια ενεργοποίησης και το μέσο φαινόμενο συντελεστή διάχυσης για κάθε θερμοκρασία



Σχήμα 4-21 Μέσος φαινόμενος συντελεστής διάχυσης συναρτήσει της θερμοκρασίας ξήρανσης

Φαίνεται ότι, με την αύξηση της θερμοκρασίας αυξάνεται ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης του φρούτου. Αυτό οφείλεται προφανώς στην αύξηση της κινητικότητας των μορίων νερού με την αύξηση της θερμοκρασίας και στη μεγαλύτερη τάση τους να μεταφερθούν στην αέρια κατάσταση (Kazimierz, 1978). Πέρα από τη φυσική σημασία, η εξάρτηση του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης από τη θερμοκρασία ερμηνεύεται και μαθηματικά από τη σχέση (16).

Στη συνέχεια παρατίθεται η εξάρτηση της ενέργειας ενεργοποίησης από τη θερμοκρασία, όπως αυτή υπολογίστηκε από το μοντέλο προσομοίωσης.



Σχήμα 4-22 Εξάρτηση της ενέργειας ενεργοποίησης από τη θερμοκρασία ξήρανσης

Όπως φαίνεται, η ενέργεια ενεργοποίησης αυξάνεται από 50.6 kJ/mol στους 45°C σε περίπου 60 kJ/mol στους 55° C και φτάνει 60.8 kJ/mol στους 65° C.

Δεδομένου ότι οι πειραματικές μετρήσεις ογκομέτρησης έγιναν σε τέσσερα δείγματα ανά θερμοκρασία, προκειμένου να βρεθεί μια ικανοποιητική πειραματική σχέση ανάμεσα στη συρρίκνωση και τη σχετική περιεχόμενη υγρασία, χρησιμοποιήθηκαν οι μετρήσεις από τα δείγματα σε όλες τις θερμοκρασίες.



Σχήμα 4-23 Εξάρτηση της συρρίκνωσης από τη σχετική περιεχόμενη υγρασία σε όλες τις θερμοκρασίες

Η συρρίκνωση που προέκυψε από τα πειραματικά δεδομένα ήταν τελικά 0.1 στην τελευταία ογκομέτρηση των δειγμάτων. Το υπολογιστικό μοντέλο προέβλεψε συρρίκνωση 0.05 για τους 55°C, 0.1 για τους 45°C και 0.2 για τους 65°C. Η συρρίκνωση εμφανίζεται γραμμική σε σχέση με την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία, ωστόσο λόγω έλλειψης πειραματικών μετρήσεων στην περιοχή αδιάστατης περιεχόμενης υγρασίας από 0.85 έως 1.00 (επειδή σε εκείνο το διάστημα η απομάκρυνση του νερού γίνεται ταχύτατα) στο Σχήμα 4-23 δεν είναι εμφανής η μεταβολή της κλίσης όπως φαίνεται στα Σχήματα 4-6, 4-12 και 4-18.

5. ΣΥΝΟΨΗ

Μελετήθηκε η διεργασία της ξήρανσης και τα φαινόμενα μεταφοράς μάζας που τη διέπουν. Προσδιορίστηκε ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης του νερού στο βερίκοκο, η ενέργειας ενεργοποίησης της διεργασίας και ο συντελεστής μεταφοράς μάζας στη διεπιφάνεια ανταλλαγής μάζας σε τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες, των 45, 55 και 65° C. Ο φαινόμενος συντελεστής διάχυσης, D_{eff}, βρέθηκε ότι κυμαίνεται αντίστοιχα σε αυτές τις θερμοκρασίες στα διαστήματα $16.85 - 17.01 \times 10^{-11}$, $28.8 - 29.5 \times 10^{-11}$ και $45 - 90 \times 10^{-11}$ m²/s, τα οποία βρίσκονται στα συνήθη όρια για τα τρόφιμα. Η διεργασία προσομοιώθηκε υπολογιστικά στο πρόγραμμα Comsol Multiphysics 4.3b. Χρησιμοποιήθηκαν τα πειραματικά δεδομένα προκειμένου να λυθεί το μοντέλο του προβλήματος με τις μεθόδους βελτιστοποίησης Levenberg-Marquardt και SNOPT.

Ο συντελεστής μεταφοράς μάζας, k_m, προσδιορίστηκε ίσος με 10^{-5} , 9.98× 10^{-5} και 0.85× 10^{-2} m/s για τις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65°C αντίστοιχα. Η ενέργεια ενεργοποίησης υπολογίστηκε ίση με 59.6, 59.9 και 60.8 kJ/mol για τις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65°C αντίστοιχα. Το μέσο σχετικό σφάλμα ανάμεσα στις πειραματικές μετρήσεις και τις προβλεπόμενες τιμές βρέθηκε ίσο με 0.47, 0.88 και 1.32% για τις θερμοκρασίες των 45, 55 και 65°C αντίστοιχα, σύγκλιση σε βαθμό μεγαλύτερο του 95%.

Το κίνητρο για την παρούσα διπλωματική ήταν να γίνει καλύτερα αντιληπτή η διάχυση κατά τη ξήρανση φρούτων και να μελετηθεί ένα πρόβλημα το οποίο είναι ακόμα «φρέσκο» στην επιστημονική κοινότητα, δηλαδή η συνδυασμένη μελέτη της συρρίκνωσης ως αποτέλεσμα της ξήρανσης και της βελτιστοποίησης στον προσδιορισμό του συντελεστή διάχυσης.

Αυτή η εργασία έδειξε την εξάρτηση της συρρίκνωσης από την περιεχόμενη υγρασία, την εξάρτηση του συντελεστή μεταφοράς μάζας από τη θερμοκρασία καθώς και την εξάρτηση του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης από τη θερμοκρασία και την περιεχόμενη υγρασία.

Για μελλοντική μελέτη, προτείνεται ο πειραματικός έλεγχος και η υπολογιστική προσομοίωση σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Επιπλέον, προτείνεται να μελετηθεί το βερίκοκο ως έλλειψη προκειμένου να περιοριστεί το σφάλμα της παραδοχής σφαιρικής γεωμετρίας και να γίνει η προτυποποίηση στους 3 άξονες του χώρου. Ακόμα, θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν διαφορετικά προγράμματα προσομοίωσης και περισσότερες μέθοδοι βελτιστοποίησης καθιστώντας τα αποτελέσματα πιο αξιόπιστα. Τέλος, προτείνεται η άρση της παραδοχής ότι η μεταφορά μάζας γίνεται μόνο στο ένα όριο του χωρίου (ελεύθερο όριο) και ο προσδιορισμός του ποσοστού συμμετοχής της φλούδας στη μεταφορά μάζας.
ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΝΤΟΜΟΓΡΑΦΙΩΝ

Arbitrary Lagrangian-Eulerian	ALE
Finite Element Method	FEM
Lower Boundary	LB
Mean Relative Error	MRE
Nonlinear Programming Systems Optimization Laboratory	NPSOL
Partial Differential Equations	PDE
Sequential Quadratic Programming	SQP
Sparce Nonlinear Optimizer	SNOPT
Upper Boundary	UB
Ανώτατο Επιτρεπτό Όριο	AEO
Διαδοχικός Τετραγωνικός Προγραμματισμός	ΔΤΠ
Κατώτατο Επιτρεπτό Όριο	KEO
Μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών	ΜΠΔ
Μέθοδος Πεπερασμένων Όγκων	МПО
Μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων	ΜΠΣ
Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις	ΜΔΕ
Μέσο Σχετικό Σφάλμα	ΜΣΣ
Πρόβλημα Αρχικών Τιμών	ΠΑΤ
Πρόβλημα Συνοριακών Τιμών	ΠΣΤ
Συνήθεις Διαφορικές Εξισώσεις	ΣΔΕ
Συνοριακές Συνθήκες	ΣΣ
Τετραγωνικός Προγραμματισμός	ΤΠ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ

ΣΧΗΜΑΤΑ

Σχήμα 2-1 Σημαντική μεταβολή όγκου κατά τη συρρίκνωση νωπών αγροτικών προϊόντα (www.stapleton-spence.com))v 20
∇x ήμα 2-2 Σχηματική απεικόνιση πλένματος Lagrange (en wikiversity org)	20
Σχήμα 2-3 Σχηματική απεικόνιση του πλέγματος Euler (stochasticandlagrangian.blogspo	20 ot.gr) 26
Σχήμα 2-4 Εφαρμογή της προσαρμογής πλέγματος (www.eng.ox.ac.uk) Σχήμα 3-1 Φούρνος που πραγματοποιήθηκε η ξήρανση των δειγμάτων (www.binder- world.com)	27 31
Σχήμα 3-2 Γεωμετρική αναπαράσταση δείγματος σε αξονική συμμετρία, με ακτίνα δείγμ	ιατος
r, μέσο όγκο V και ακτίνα πυρήνα ίση με το ήμισυ του πάχους του πυρήνα ($R_{stone}=d/2$)	34
Σχήμα 3-3. Βερίκοκα ποικιλίας Tom Cot (www.fruitsinfo.com)	35
Σχήμα 3-4 Γεωμετρία του βερίκοκου όπως προσομοιώθηκε στο Comsol 4.3b	35
Σχήμα 3-5 Η γεωμετρία του μελετώμενου χωρίου στους 3 άξονες του χώρου	36
Σχήμα 3-6 Επιλογή αξονικής συμμετρίας στα όρια 1 και 2	37
Σχήμα 3-7 Επιλογή αδιαπέρατων στην κίνηση του νερού τοιχωμάτων στα όρια 4 και 5 σ	το
χωρίο	38
Σχήμα 3-8 Σύνορα 3 και 6 του χωρίου στα οποία θεωρήθηκε ότι μεταφέρεται η μάζα Σχήμα 3-9 Πλέγμα κόμβων στο αρχικό μελετώμενο χωρίο	39 41
Σ_{χ} ήμα 3-10 Ταγώτητα συροίκυωσης στους 45° C συναρτήσει της αδιάστατης περιεγόμενη	+1 nc
2χημα 3-10 Ταχυτητα συρρικνωσης στους 43 C συναρτησει της αυιαστατης περιεχομενη υνοασίας. MR	15 43
Σχήμα 3-11 Ταχύτητα συρρίκνωσης στους 55°C συναρτήσει της αδιάστατης περιεχόμενι υνρασίας. MR	ης 43
Σχήμα 3-12 Ταχύτητα συρρίκνωσης στους 65°C συναρτήσει της αδιάστατης περιεχόμενι υνρασίας. MR	ης 44
Σχήμα 4-1 Μεταβολή της σχετικής υγρασίας όπως μετρήθηκε πειραματικά στις θερμοκρ 45, 55 και 65°C	ασίες 47
Σγήμα 4-2 Μεταβολή περιεγόμενης υγρασίας, MC, σε σγέση με το γρόνο στους 45°C	48
Σχήμα 4-3 Μεταβολή του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης με την αδιάστατη περιεχόμε υνρασία στους 45°C	ενη 50
Σχήμα 4-4 Μεταβολή του συντελεστή διάχυσης με το χρόνο ξήρανσης στους 45 °C Σχήμα 4-5 Μείωση της ακτίνας του μελετώμενου χωρίου σε σχέση με την αδιάστατη υγρ στους 45°C	51 σασία 52
Σχήμα 4-6 Υπολογιζόμενη συρρίκνωση του δείγματος συναρτήσει της μέσης περιεχόμεν υγρασίας στους 45 °C	′ης 53
Σχήμα 4-7 Τρισδιάστατη απεικόνιση της περιεχόμενης αδιάστατης υγρασίας και της	54
$Supple Value 4.8$ Ματαβολή περιοχόμει με ανοαπίας MC σε σχάση με το χρόμο στους 55° C	J4 55
Σχήμα 4-9 Μεταβολή του συντελεστή διάχυσης με την αδιάστατη περιεχόμενη υγρασία	33 για
τους 55°C	56
Σχήμα 4-10 Εξέλιξη του συντελεστή διάχυσης σε σχέση με το χρόνο στους 55°C	57
Σχήμα 4-11 Μείωση της ακτίνας συναρτήσει της σχετικής περιεχόμενης υγρασίας για το 55 °C	ως 58
Σχήμα 4-12 Μεταβολή της συρρίκνωσης συναρτήσει της μέσης περιεγόμενης υγρασίας ο	στους
55 °C	59

Σχήμα 4-13 Τρισδιάστατη απεικόνιση της περιεχόμενης αδιάστατης υγρασίας και της
συρρίκνωσης του μελετώμενου χωρίου στους 55 °C
Σχήμα 4-14 Μεταβολή περιεχόμενης υγρασίας, MC, σε σχέση με το χρόνο στους 65°C 61
Σχήμα 4-15 Μεταβολή του συντελεστή διάχυσης με τη σχετική περιεχόμενη υγρασία για τους 65°C
Σχήμα 4-16 Εξέλιξη του φαινόμενου συντελεστή διάχυσης σε σχέση με το χρόνο για τους
65°C
Σχήμα 4-17 Μείωση της ακτίνας συναρτήσει της σχετικής περιεχόμενης υγρασίας για τους
65 °C
Σχήμα 4-18 Μεταβολή συρρίκνωσης σε σχέση με την περιεχόμενη υγρασία για τους $65^{\circ}C$. 65
Σχήμα 4-19 Τρισδιάστατη απεικόνιση της περιεχόμενης σχετικής υγρασίας και της
συρρίκνωσης του μελετώμενου χωρίου στους 65 °C
Σχήμα 4-20 Συνολική απεικόνιση πειραματικών μετρήσεων και προβλεπόμενων τιμών 66
Σχήμα 4-21 Μέσος φαινόμενος συντελεστής διάχυσης συναρτήσει της θερμοκρασίας
ξήρανσης
Σχήμα 4-22 Εξάρτηση της ενέργειας ενεργοποίησης από τη θερμοκρασία ξήρανσης
Σχήμα 4-23 Εξάρτηση της συρρίκνωσης από τη σχετική περιεχόμενη υγρασία σε όλες τις
θερμοκρασίες

ΠΙΝΑΚΕΣ

Πίνακας 1-1 Ενδεικτικές τιμές φαινόμενου συντελεστή διάχυσης για τρόφιμα σε
διαφορετικές θερμοκρασίες
Πίνακας 2-1 Τάξη μεγέθους του συντελεστή διάχυσης ανάλογα με τη φυσική κατάσταση του
συστατικού
Πίνακας 3-1 Πειραματικές τιμές για το αρχικό πάχος (ευθύγραμμο τμήμα AD βλ.Σχήμα 3-2)
και τον αρχικό όγκο των δειγμάτων στους 45° C
Πίνακας 3-2 Πειραματικές τιμές για το αρχικό πάχος (ευθύγραμμο τμήμα AD βλ.Σχήμα 3-2)
και τον αρχικό όγκο των δειγμάτων στους 55° C
Πίνακας 3-3 Πειραματικές τιμές για το αρχικό πάχος (ευθύγραμμο τμήμα AD βλ.Σχήμα 3-2)
και τον αρχικό όγκο των δειγμάτων στους 65 $^{\rm o}{\rm C}$
Πίνακας 3-4 Πειραματικές μετρήσεις πάχους (ευθύγραμμο τμήμα ΑC βλ. Σχήμα 3-2) για
τους πυρήνες των δειγμάτων στους 45°C
Πίνακας 3-5 Πειραματικές μετρήσεις πάχους (ευθύγραμμο τμήμα ΑC βλ. Σχήμα 3-2) για
τους πυρήνες των δειγμάτων στους 55° C
Πίνακας 3-6 Πειραματικές μετρήσεις πάχους (ευθύγραμμο τμήμα ΑC βλ. Σχήμα 3-2) για
τους πυρήνες των δειγμάτων στους 65° C
Πίνακας 3-7. Ισόρροπη περιεχόμενη υγρασία για κάθε θερμοκρασία ξήρανσης
Πίνακας 3-8. Ποσοστό μείωσης του αρχικού όγκου των 4 δειγμάτων σε κάθε θερμοκρασία
ξήρανσης
Πίνακας 3-9 Ταχύτητα μείωσης του όγκου του χωρίου συναρτήσει της σχετικής υγρασίας σε
κάθε θερμοκρασία ξήρανσης42
Πίνακας 3-10 Ορισμός μεταβλητών ελέγχου κατά το στάδιο της βελτιστοποίησης -45°C 45
Πίνακας 3-11 Ορισμός μεταβλητών ελέγχου κατά το στάδιο της βελτιστοποίησης -55°C 45
Πίνακας 3-12 Ορισμός μεταβλητών ελέγχου κατά το στάδιο της βελτιστοποίησης -65°C 45
Πίνακας 4-1 Αποτελέσματα βελτιστοποίησης για το συντελεστή μεταφοράς μάζας, τη
λογαριθμική παράμετρο, την ενέργεια ενεργοποίησης και το μέσο φαινόμενο συντελεστή
διάχυσης για κάθε θερμοκρασία

Simulation Setup in Comsol Multiphysics 4.3b for calculations

\Rightarrow Name

- Global Definitions
 - Parameters

MC_in (μέση περιεχόμενη αρχική υγρασία)

 M_{e} 45, M_{e} 55, M_{e} 65 (περιεχόμενη υγρασία στο σημείο ισορροπίας κάθε θερμοκρασίας)

Τ (θερμοκρασία ξήρανσης)

R_ext (αρχική εξωτερική ακτίνα χωρίου)

R_stone (ακτίνα πυρήνα)

Ri (παγκόσμια σταθερά αερίων)

rho_prod (πυκνότητα βερίκοκου)

M_w (κιλά νερού ανά mol νερού)

A (σταθερά ίση με 1 m/s)

B (σταθερά ίση με 1 m²/s)

- Variables
 - Variables1

Name	Expression	Description		
c_in	((1-1/(MC_in+1))*rho_prod)/M_w	(μέση συγκέντρωση εισόδου συναρτήσει του MC_in)		
c_b_45	$((1-1/(M_e_45+1))*rho_prod)/M_w$	(συγκέντρωση κενού στους 45°C συναρτήσει Μ _e _45)		
c_b_55	$((1-1/(M_{e}55+1))*rho_prod)/M_w$	(συγκέντρωση κενού στους 55°C συναρτήσει M _e _55)		
c_b_65	((1-1/(M _e _65+1))*rho_prod)/M_w	(συγκέντρωση κενού στους 65°C συναρτήσει Μ _e _65)		

- Functions
- Load and Constraint Groups

➤ Model1

Unit System (SI)

- Definitions
 - Variables
 - c_aver = aveop1(c) (μέση συγκέντρωση στο χωρίο)
 - MC_aver = aveop1(1/(1-(c*M_w)/rho_prod)-1) (μέση περιεχόμενη υγρασία στο χωρίο
 - Deff = $B^{exp}(-Ea/(Ri^{T})+M1/MR)$ (φαινόμενος συντελεστής διάχυσης)
 - Deff_aver = aveop1(Deff) (μέσος φαινόμενος συντελεστής διάχυσης)
 - MR = $(1/(1-(c*M_w)/rho_prod)-1)/MC_in$ (σχετική περιεχόμενη υγρασία)

- $S = ((r^3)-(R_stone^3))/(R_ext^3)$ (συρρίκνωση του χωρίου)
- Vr =Vz =A*exp(Q+P*MR) (ταχύτητα συρρίκνωσης, Q,P σταθερές για κάθε θερμοκρασία)
- Functions
- Probes
- Model Couplings
 - ♦ Average1
 - Operator name: aveop1 Geometric entinty level: Domain Selection: All Domains Domain 1 – Select + Integration order: 5 Frame: Spatial (r, phi, z) Check: Compute integral in revolved geometry
- Coordinate Systems
 - Boundary System1 Identifier: sys1 Frame type: Deformed configuration Create first tangent direction from: Global Cartesian (spatial) Axis: 2
- Domain Properties
- Views
 - ♦ View1
 - Axis
- Geometry1

- Circle1
 - Type: Solid Radius: R_ext Sector angle: 180 Base: Center r: 0 z: 0 Rotation angle: -90
- Circle2
 - Type: Solid Radius: R_stone Sector angle: 180 Base: Center r: 0 z: 0 Rotation angle: -90

- Difference1 Check: Keep interior boundaries Relative repair tolerance: 1.0E-6
- Form Union Finalization method: Form a union Relative repair tolerance: 1.0E-6
- Material
- Transport of Diluted Species
 - Domains
 - Diffusion
 Study 1, Time Dependent
 Coordinate System: Global coordinate system
 Bulk Material: None
 Diffusion coefficient: User Defined
 Deff
 Isotropic
 - Initial Values1
 c_in
 - Boundaries
 - Axial Symmetry Select 1,2, add
 - ♦ No flux
 - Select 4,5 , add Study1, Time Dependent Apply for Check species c
 - ♦ Flux1
 - Select 3,6, add Study1, Time Dependent Flux type: External forced Convection Check species c Mass transfer coefficient: km Bulk concentration: c_b_45/ c_b_55/ c_b_65 respectively
 - Points
 - Global
 - Equation View
 - Moving Mesh
 - Domains
 - Fixed Mesh (overridden)
 - Free Deformation
 - Selectction: Manual
 - Check domain, add
 - Initial mesh displacement: dro=0, dzo=0

- Boundaries
 - Prescribed Mesh Displacement1 Select boundaries 1,2, add Global Coordinate System Check prescribed r displacement: dr=0 Unchecked prescribed z displacement
 - Prescribed Mesh Displacement2 Select boundaries 4,5 Global coordinate system Check prescribed r displacement: dr=0 Check prescribed z displacement: dz=0
 - Prescribed Mesh Velocity1 Select boundaries 3,6, add Global coordinate system Check prescribed r velocity: -Vr*nr Check prescribed z velocity: -Vz*nz
- Points
- Equation View
- Optimization
 - Domains
 - Boundaries
 - Points
 - Global
 - Global Least Squares Objective1
 - Browse .txt file $MC_exp = f(t)$
 - Time Column
 - Value Column
 - Expression: aveop1(1/(1-(c*M_w)/rho_prod)-1)
 - Variable name: MC_exp
 - Column contribution weight: 1
 - Global Control Variables1

Variable	Initial Value	Lower bound	Upper bound
km	0.001 [m/s]	1e-6	1e-1
Ea	55 [kJ/mol]	50	60
M1	0.1	1e-2	1
*6 1500			

*for 45°C

- Equation View
- Mesh1

User-controlled mesh

- Size Calibrate for: General physics
 - Predefined: Finer
- Free Triangular1

Geometric entity level: Entire geometry

- ➤ Study1
 - Step 1: Time Dependent Times: range(0,3600,187200) *for 45 °C (αρχική τιμή, βήμα, τελική τιμή) Relative tolerance: 1e-3
 - Solver Configurations
 - Solver2
 - Compile Equations: Time Dependent Use study: Study 1 Use study step: Step 1: Time Dependent
 - Dependent Variables 1
 Defined by study step: Step 1: Time Dependent Scaling method: Automatic

Keep solution: Initial values of variables solved for

- mod1.c
 Check store in output
 Method: From parent
- ➤ mod1.gcvar11

Check store in output

- mod1.rz
 Check store in output
 Method: From parent
- Time-Dependent Solver 1
 - ➢ Direct − disabled
 - ➢ Advanced
 - Matrix Symmetry: Automatic
 - Matrix format: Automatic
 - Check Row equilibrium
 - Null-space function: Automatic
 - Check Stop when undefined mathematical operation is detected
 - Solver log: Normal
 - Fully Coupled 1
 - Linear Solver: Direct 1
 - Method and Termination
 - Nonlinear method: Constant (Newton)
 - Damping factor: 1e-3
 - Jacobian update: On every iteration
 - Termination technique: Tolerance
 - Maximum number of iterations: 4
 - Tolerance factor: 1
 - Direct 1
 - Solver: PARDISO
 - Preordering algorithm: Nested dissection multithreaded

Scheduling method: Auto Check only Row preordering Pivoting perturbation: 1e-8 ➢ Information 1 **Μετά την επίλυση του προγράμματος, θα λάβετε το μήνυμα "Warning: Inverted mesh element near coordinates (0,0)" to οποίο οφείλεται στο ότι έχει αφαιρεθεί ο πυρήνας στο χωρίο. • Optimization Solver 1 ↓General Defined by study step: User defined Optimality tolerance: 1.e-2 Maximum number of objective evaluations: 10000 ↓Optimization Solver Method: SNOPT Objective condributions: All Gradient method: Numeric Difference interval: 1e-6 Central difference interval: 1e-6 Store functional sensitivity: On QP solver: Cholskey ↓Results while solving Check Plot Plot group: MC_aver Probes: All Time Dependent Solver 1 ↓General Defined by study step: User defined Time: range(0,3600,187200) *for45°C Relative Tolerance: 1e-3 ↓Absolute Tolerance Global method: Scaled Tolerance:1e-4 Direct 1 . Solver: PARDISO Preordering algorithm: Nested dissection multithreaded Scheduling method: Auto Check only Row preordering Pivoting perturbation: 1e-8 Fully Coupled 1 Linear Solver: Direct 1 Method and Termination Nonlinear method: Constant (Newton) Damping factor: 1e-3

Jacobian update: Minimal Termination technique: Tolerance Maximum number of iterations: 4 Tolerance factor: 1

Advanced

 Advanced
 Matrix Symmetry: Automatic
 Matrix format: Automatic
 Check Row equilibrium
 Null-space function: Automatic
 Check Stop when undefined mathematical operation is detected

- Solver log: Normal
- Job Configurations

Results

- Data Sets
 - Solution 2
 - Solution: Solver 2 Model: Model 1 (mod1) Frame: Spatial (r,phi,z) Soution at angle: 0 Scale factor: 1
 - Mesh 1 Mesh: Mesh1
- Views
 - View 2D
 - View 3D
- Derived Values
 - Global Evaluation km Data Set: Solution 2 Time Selection: All Expression: km Unit: m/s Description: m/s Operation: None
 - Global Evaluation Ea Data Set: Solution 2 Time selection: All Expression: Ea Unit: J/mol Description: J/mol Operation: None
 - Global Evaluation M1 Data set: Solution 2

Time selection: All Expression: M1 Operation: None

- Global Evaluation MC_aver Data set: Solution 2 Time selection: All Expression: aveop1(1/(1-(c*M_w)/rho_prod)-1) Unit: 1 Description: MC_aver [dry bases] Operation: None
- Global Evaluation Deff
 Data set: Solution 2
 Time Selection: All
 Expression: B*aveop1(exp(-Ea/(Ri*T)+M1/MR))
 Unit: m²/s
 Description: Deff_aver
 Operation: None
- Tables
 - Table 1 (km)
 - Table 2 (Ea)
 - Table 3 (M1)
 - Table 4 (T)
 - Table 5 (Deff)
 - Table 6 (MC_aver)

• 1D Group plot

- Data set: Selection 2
- Time Selection: All
- x-axis label: Drying time (h)
- y-axis label: MC_aver (kgw/kgdm)
- ↓Axis
- Check Manual axis limits
- x minimum: 0
- x maximum: 52
- y minimum: 0
- y maximum: 8
- Global 1
 - Data set: From parent
 - y-Axis Data
 - Expression: MC_aver
 - x-Axis Data
 - Parameter: Expression
- Expression: t
- Shrinking r_m

Data set: Solution 2 Time Selesction: All x-axis label: MR y-axis label: Spatial coordinate r(m) ↓Axis Check Manual axis limits x minimum: 0 x maximum:1 • Point Graph 1 Data set: From parent Selection: Manual Choose point 6 y-Axis Data Expression: r Unit: m x-Axis Data Parameter: Expression Expression: aveop1(1/1-(c*M_w)/rho_prod)-1)/MC_in Unit: 1 Description: MR Deff_aver Data set: Solution 2 Time Selection: All x-axis label: MR y-axis label: Deff (m2/s) • Global 1 Data set: Solution 2 Time selection: All y-axis label Expression: B*aveop1(exp(-Ea/Ri*t)+M1/MR)) x-axis label Parameter: Expression Expression: aveop1(1/1-(c*M_w)/rho_prod)-1)/MC_in Shrinkage =f (MCdb) Data set: Solution 2 Time Selection: All x-axis label: MC_aver [kg/kg] y-axis label: S [m³/m³] • Point graph Choose point 6: add 2D Plot Group 5_MR=f(t) Data set: Solution 2 Time: 1.872e5 $(for 45^\circ)$

View: Automatic Check show hidden objects Check plot data set edges Color: custom Frame: Material (R, PHI, Z)

Surface 1
 Data set: Solution 2
 Time: 1.872e5
 Expression: MR
 Unit: 1
 Description : MR

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Askar A., Heikal, Y., Ghonaim, S. M., Abdel-Fadeel, M. G., Ali A. M., and Abd El-Gaied, I. O. (1996). Osmotic and solar dehydration of peach fruits. *Fruit Processing*, 7, 258–262.
- Berinstain C.I., Azuara, E., Cortes, R., and Garcia, H. S. (1990). Mass transfer during osmotic dehydration of pineapple rings. *International Journal of Food Science and Technology*, 25, 576–582
- Caglar A., Togrul I.T., Togrul H. (2009). Moisture and thermal diffusivity of seedless grape under infrared drying. *Food and Bioproducts Processing*.87: 292 - 300
- Celma A.R., Cuadros F., López-Rodríguez F. (2009). Characterisation of industrial tomato by-products from infrared drying process. *Food and Bioproducts Processing*.87: 282-291
- Chapman S. and Cowling T.G. (1990) The mathematical theory of nonuniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conductivity and diffusion in gases 3rd Edition. Cambridge University Press
- Corrêa, P.C., Oliveira G.H.H., Botelho F.M., Goneli A.L.D. and Carvalho F.M.. (2010). Mathematical modeling and determination of thermodynamic properties of coffee (Coffea arabica L.) during the drying process. *Revista Ceres* 57:595-601
- Corzo O., Bracho N., Alvarez C.. (2008). Water effective diffusion coefficient of mango slices at different maturity stages during air drying. *Journal of Food Engineering.* 87: 479-484
- Donea J., Huerta A., Ponthot J.-Ph. and Rodriguez-Ferran A.. (2004). Arbitrary Lagrangian–Eulerian Methods. *Encyclopedia of Computational Mechanics*
- Doymaz I. (2004). Convective air drying characteristics of thin layer carrots. *Journal of Food Engineering*, 61, 359-364.
- Gavin. H.P. (2013) The Levenberg-Marquardt method for nonlinear least squares curve-fitting problems. *Department of Civil and Environmental Engineering, University of Duke*
- Gill P.E., Murray W., Saunders M.A.. (2005). SNOPT: An SQP Algorithm for Large-Scale Constrained Optimization. *Society for Industrial and Applied Mathematics*.47: 99-131
- Haghi K.. (2001). A Mathematical Model of the Drying Process, Acta Polytechnica. 41.
- Hall. C.W. (1987). The Evolution and Utilization of Mathematical Models of Drying, *Mathematical Modelling* .8: 1-812
- Hansen W. (1987). Drying Shrinkage Mechanisms in Portland Cement Paste. Department of Civil Engineering, The University of Michigan. 70 (5): 323-328
- Hawkes J., and Flink, J. M. (1978). Osmotic concentration of fruit slices prior to freeze dehydration. *Journal of Food Processing and Preservation*, 2, 265–284.
- Kazimierz K., Green C.D., and Sawyer D., (1978) Pressure and temperature dependence of self-diffusion in water. *Faraday Discuss. Chem. Soc.*, 1978,66, 199-208

- Kowar R. (2013). Analysis of a causal diffusion model and its backwards diffusion problem. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*. 400: 222-238
- Kowar R.. (2012). On the causality of real-valued semigroups and diffusion. *Mathematical Methods in theApplied Sciences.* 35: 207-227
- Lalit M.Bal, Santosh S., Naik S.N.. (2010). Solar dryer with thermal energy storage systems for drying agricultural food products: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews.* 14: 2298-2314
- Lazarides H. N., Gekas V., and Mavroudis N. (1997). Apparent mass diffusivities in fruit and vegetable tissues undergoing osmotic processing. *Journal of Food Engineering*, 31, 315–324.
- Lewis W.K. (1921). The rate of drying of solids materials. *The Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 13, (5):427-432,
- Luikov A.V. (1975). Systems of differential equations of heat and mass transfer in capillary-porous bodies. *Heat and Mass Transfer*. 18. 1-13
- Mauro M. A., and Menegalli F.C. (1995). Evaluation of diffusion coefficients in osmotic concentration of banana. *International Journal of Food Science and Technology*, 30, 199–213
- Mayor L. and Sereno A.M.. (2004). Modelling shrinkage during convective drying of food materials: a review, *Journal of food engineering*. 61: 373-386
- McCabe, Smith and Harriot. (2008). Βασικές Διεργασίες Χημικής Μηχανικής 6^η Έκδοση. Εκδ.Τζιόλα
- McCarty P. and . Horsthemke W. (1988). Effective diffusion coefficient for steady two-dimensional convective flow. Phys. Rev. A 37, 2112
- Mota C.L., Luciano C., Dias A., Barroca M.J., Guinéa R.P.F. (2010). Convective drying of onion: Kinetics and nutritional evaluation. *Food and Bioproducts Processing.* 88: 115-123
- Mulet (1994). Drying modeling and water diffusivity in carrots and potatoes. *Journal of Food Engineering*, 22:329–348.
- Ni H., Datta A.K., and Torrance K.E. (1999). Moisture transport in intensive microwave heating of biomaterials: a multiphase porous media model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*.31: 1501-1512
- Prosini P.P., Lisi M., Daniela Zane, Mauro Pasquali. (2002). Determination of the chemical diffusion coefficient of lithium in LiFePO₄, *Solid State Ionics*. 148: 45-51
- Qi H., Sharma S. K., and Le Maguer M. (1999). Modeling multicomponent mass transfer in plant material in contact with aqueous solutions of sucrose and sodium chloride during osmotic dehydration. *International Journal of Food Properties*, 2, 39–54.
- Quintero-Ramos, A., De La Veja, C., Hernandez, E., and Anzaldua- Morales, A. (1993). Effect of conditions of osmotic treatment on the quality of dried apple dices. *Aiche Symposium Series*, 89, 108–113.
- Ramos I.N., Brandao T.R.S., and Silva C.L.M.. (2003). Structural Changes During Air Drying of Fruits and Vegetables.

- Rastogi N. K., Raghavarao, K.S.M.S., and Niranjan, K. (1997). Mass transfer during osmotic dehydration of banana: Fickian diffusion in cylindrical configuration. *Journal of Food Engineering*, 31, 423–432.
- Ruiz-Lopez II, Ruiz-Espinosa H, Arellanes-Lozada P, Barcenas-Pozos ME, Garcia-Alvarado MA. (2012) Analytical model for variable moisture diffusivity estimation and drying simulation of shrinkable food products. *Journal of Food Engineering* 108:427–35
- Saravacos G.D. (1967) Effect of drying method on the water sorption of dehydrated apple and potato, *Journal of Food engineering*, 3, 81–84.
- Shahari N.A. (2012). Mathematical Modelling of Drying Food Products: Application to Tropical Fruits. *University of Nottingham*
- Togrul I.T. and Pehlivan D. (2003) Modelling of drying kinetics of single apricot. *Journal of Food Engineering*, v.58, 1:23-32,
- Wang J., Gadala M.S. (1997) Formulation and survey of ALE method in nonlinear solid mechanics. Finite Elements in Analysis and Design, v.24, 4: 253-269
- Whitaker S. (1986). Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law. *Transport in Porous Media*.3-25
- Wilke C.R. and Chang P. (1955). Correlation of Diffusion Coefficients in Dilute Sollutions. *University of Berkeley.* 264-270
- Xanthopoulos G., Koronaki E.D. and Boudouvis A.G., (2012a). Mass transport analysis in perforation-mediated modified atmosphere packaging of strawberries. *Journal of Food Engineering*. 111: 326-335
- Xanthopoulos G., Yanniotis S. and Boudouvis A.G., (2012b). Numerical simulation of variable water diffusivity during drying of peeled and unpeeled tomato, *Journal of Food Science*, (10), E287-E296.
- Xanthopoulos G., Yanniotis S. and Lambrinos Gr., (2009). Water diffusivity and drying kinetics of air drying of figs. *Drying Technology*, 27(3), 502-512.
- Young D.M. and Kincaid D.R. (2003) Partial Differential Equations. *Encyclopedia of Computer Science*. 4: 1367-1370
- Zogzas N. P. and Maroulis Z. B.. Effective moisture diffusivity estimation from drying data. A comparison between various methods of analysis. *Drying Technology*,14:1542–1573, 1996.
- Κροκίδα Μ., Μαρίνος Κουρής Δ., Μαρούλης Ζ. (2003). Σχεδιασμός
 Θερμικών Διεργασιών. Εκδ. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Ε.Μ.Π.
- Λυγερού Β., Ασημακόπουλος Κ., Αραμπατζής Γ. (2005). Μεταφορά Μάζας. Εκδ.Παπασωτηρίου
- Μαρκάτος Ν., Ασημακόπουλος Δ. (1995). Υπολογιστική Ρευστομηχανική.
 Εκδ. Παπασωτηρίου
- Μπουντουβής Α. (1992). Υπολογιστική Μηχανική με τη Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων. Εκδ. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Ε.Μ.Π.

Διαδίκτυο

- Διεύθυνση διαδικτύου: http://en.wikiversity.org. Index of images
- Διεύθυνση διαδικτύου: http://stochasticandlagrangian.blogspot.gr. Image
- Διεύθυνση διαδικτύου: *http://www.binder-world.com*. Index of images
- Διεύθυνση διαδικτύου: *http://www.eng.ox.ac.uk/.* Thermofluids
- Διεύθυνση διαδικτύου: *http://www.fruitsinfo.com*. Apricot fruits gallery
- Διεύθυνση διαδικτύου: http://www.stapleton-spence.com. Image
- Διεύθυνση διαδικτύου: http://www.comsol.com/products