

Akademie věd České republiky

Teze disertace k získání vědeckého titulu "doktor věd" ve skupině chemických věd

Modelování a diagnostika fluidních vrstev

Komise pro obhajoby doktorských disertací v oboru Teorie chemické techniky

Jméno uchazeče Miroslav Punčochář

Pracoviště uchazeče ÚCHP AV ČR, v. v. i., Praha -Suchdol

Místo a datum Praha 26. 12. 2007

1. Úvod

Předkládaná práce je tvořena dvěma případovými studiemi, zabývajícími se modelováním fluidní vrstvy. Tyto studie představují v podstatě komentované propojení mých prací, dotýkajících se této problematiky.

První studie začíná stručnou analýzou problémů určení struktury porésní vrstvy, která přechází v návrh použití jisté metody fraktální geometrie pro řešení tohoto problému (Q17 Ω). Dále tato studie pokračuje rozborem problematiky určení obecné funkce tortuosity pro kapilární model (Q12 Ω).

V nejobsáhlejší části je komentován souhrn prací ($Q5\Omega - Q7\Omega$, $Q11\Omega$ a $Q26\Omega$) podávajících alternativní přístup k hodnocení kvality fluidace oproti klasické práci Geldarta. Tento přístup zároveň ústí v řešení problému určení meze aplikovatelnosti libovolného (obecného) kapilárního modelu pro tlakový spád ve fluidní vrstvě. Je podán principiálně nový způsob vymezení oblasti parametrů g/s fluidace, pro které nelze použít kapilární model vrstvy. Navržený postup je testován na několika modelech vrstvy a porovnáván s pracemi, které určují hranici aplikovatelnosti mezi konkrétním kapilárním a konkrétním partikulárním modelem pomocí iteračního výpočtu jako oblast, kdy oba modely poskytují srovnatelnou přesnost odhadu tlakového spádu přes vrstvu.

Tento soubor představuje v podstatě výsledek mého úsilí o určité řešení problému paralelní existence dvou, svými představami značně odlišných, modelů popisu toku tekutiny vrstvou zrnitého materiálu. Tento děj zatím stále uniká fundamentálnějšímu fyzikálnímu popisu, a tak jsou empirické a semiempirické modely používány na základě praktických zkušeností a inženýrské intuice, často ovšem značně nekriticky.

Druhá studie představuje příspěvek k řešení problematiky analýzy dynamických fluktuací stavových veličin dvoufázových reaktorů. Konkrétněji řečeno se jedná o analýzu dynamického tlakového signálu, který je z praktického hlediska nejsnáze měřitelný. Předkládaný soubor prací je z podstatné části založen na experimentálních výsledcích, jež vznikly v rámci existence bývalé skupiny diagnostiky a řízení chemicko-inženýrských systémů v ÚTZCHT pod vedením J. Čermáka a později J. Drahoše. V rámci této skupiny byla rovněž rozvinuta metodika amplitudové, korelační a spektrální analýzy časového signálu. Tuto metodiku jsem převzal a její popis není náplní předkládané práce. Osobně jsem se podílel na implementaci metod fraktální geometrie k analýze signálu (R/S analýza) a metod založených na parametrických modelech náhodných procesů. Ve většině prací se jedná o analýzu g/s systémů v režimu bublající fluidní vrstvy, resp. v režimu pístování. Výjimku tvoří práce (Q9^O a Q16^O) zabývající se analýzou g/l systémů. Tyto práce byly do souboru zahrnuty proto, že první používá k analýze časového průběhu tlakových fluktuací metody fraktální geometrie a druhá se zabývá indikací přechodu k chaotickému chování aplikací AR modelů.

V práci (Q1⁽¹⁾) je podán originální způsob on line určování prahové rychlosti fluidace na základě měření tlakových fluktuací ve fluidní vrstvě. Vztah pro určení prahové rychlosti fluidace je teoreticky interpretován pomocí kinetické energie částic ve vrstvě. Na modelové představy analogie fluidní vrstvy s kapalinou naznačené v (Q1⁽¹⁾) navazuje práce (Q33⁽¹⁾), ve které je učiněn pokus o definici fyzikální entropie bublající fluidní vrstvy. Následující práce (Q35⁽¹⁾) se zabývá hlouběji modelováním bublajících fluidních vrstev na základě analýzy rozdělení disipované energie. Konkrétně je v této práci provedena analýza původu tlakových fluktuací měřených v heterogenní (bublající) fluidní vrstvě.

Problematikou pístující fluidní vrstvy se zabývají práce ($Q3\square$ a $Q4\square$). V práci ($Q4\square$) je podán model pístující fluidní vrstvy zatímco práce ($Q3\square$) se zabývá problémem objektivní diagnostiky tohoto mezního režimu fluidace. Jako diskriminant pro určení pístování je použit řád AR modelu popisujícího časový průběh tlakových fluktuací.

V práci (Q9^Q) byl k popisu časových řad tlakových fluktuací použit model frakcionovaného Brownova pohybu, který je zobecněním R/S analýzy časových řad. Teoretický koncept byl použit k rozlišení homogenního a turbulentního režimu probublávané kolony.

2. Modelování g/s systémů – meze použitelnosti kapilárního a partikulárního modelu fluidní vrstvy

Parciálně skalované fraktály pro analýzu porézních materiálů - Q17

Analýza porésních materiálů metodami fraktální geometrie vychází většinou z předpokladu, že daná plocha, respektive obecněji tvar, je "hotovým" fraktálem. Toto pojetí naráží na dvě úskalí, první spočívá v tom, že soběpodobnost je u reálných objektů omezena dolní a horní hranicí. Toto omezení lze obvykle bez problému určit na základě experimentálních dat. Druhý problém je v tom, že daný objekt často nelze analyzovat jako ukončený, ale je třeba vzít v potaz jeho dynamický vývoj. Jak už bylo řečeno, fraktální objekty vznikají v procesu následných iterací, přičemž konečný objekt je limitou těchto iterací. Jeví se proto účelným zkoumat vývoj jednotlivých iterací, tzv. prefraktálů. Jako příklad lze uvést vznik ostrovů v procesu geomorfologického utváření krajiny nebo katalyzátor s porésní strukturou, kterou protéká proud reagujících složek. Reagující složky na jedné straně degradují povrch katalyzátoru, na straně druhé pak abrazí vzniká nový aktivní povrch. Lze říci, že morfologie vnitřního povrchu prochází vývojem. V případě vzniku ostrova, jehož kontura postupně konverguje k fraktální křivce, se některé okrajové části střídavě zaplavují a vynořují z vody. V obou případech má smysl ptát se, jaký charakter má limitní oblast, která nebyla nikdy v průběhu vývoje těmito ději zasažena. V jazyce fraktální geometrie hovoříme o tzv. jádře fraktálního objektu, které definujeme jako průnik všech členů posloupnosti prefraktálů. Jednoduše řečeno, jde o určení oblasti, která nikdy nebyla pod vodou a v případě katalyzátoru o oblast ve které nikdy nedocházelo k reakci.

V práci (Q17⁽¹⁾) je provedena teoretická studie iteračního vývoje matematického fraktálu zvaného Kochův ostrov. Na obr. 2.1 je vidět 5. aproximace tohoto fraktálu. Budeme sledovat evoluci tohoto ostrova jako proces konvergence posloupnosti prefraktálů. Při konstrukci těchto prefraktálů se používá iniciátor, jímž jsou v tomto případě strany jednotkového čtverce, a generátor ve formě lomené křivky vytvořené spojením stejně dlouhých úseček. Konstrukce probíhá tak, že počínaje iniciátorem jsou v každém kroku nahrazeny všechny úsečky tvořící hranici objektu zmenšenou kopií generátoru. Na obrázku 2.2 je znázorněn generátor. Kochův ostrov se tak vyvíjí z původně jednoduchého útvaru do stále komplexnější podoby. Jádro tohoto fraktálního ostrova nyní definujeme jako část, která byla vždy souší.



Obr. 2.1 Pátá aproximace Kochova ostrova



Obr. 2.2 Generátor Kochovy křivky

Toto jádro může být rovněž zkonstruováno, podobně jako původní fraktál, pomocí iterací typu iniciátor – generátor. Započneme s jednotkovým čtvercem jako iniciátorem (podobně jako u originálního Kochova ostrova) a použijeme generátor, který je zobrazen na obr. 2.3. Principiální rozdíl oproti generátoru původní Kochovy křivky spočívá v tom, že druhá část generátoru není skalovaná.



Obr. 2.3 Generátor parciálně skalované fraktální křivky

Je zřejmé, že takto konstruovaný objekt se vyvíjí ke stále větší složitosti, avšak o striktní soběpodobnosti nelze v tomto případě mluvit vzhledem k narušení symetrie způsobené parciálním skalováním. Fraktální dimenzi strany Kochova ostrova vypočteme snadno podle r.(2.1), kde N je počet segmentů a δ redukční faktor,

$$D = \frac{\ln N}{\ln 1/\delta} = \frac{\ln 8}{\ln 4} = \frac{3}{2}$$
(2.1)

neboť generátor se skládá z osmi segmentů zmenšovaných v každém kroku na jednu čtvrtinu. Takto vypočtená dimenze se nazývá podobnostní a je, zhruba řečeno, speciálním případem obecné fraktální dimenze – dimenze Hausdorffovy, D_H . Vzhledem k tomu, že jádro není soběpodobné, je nutno ověřit fraktální charakter jeho hranice přímým výpočtem Hausdorffovy dimenze. Po krátkém výpočtu dostaneme:

$$D_H = \frac{\ln(N-b)}{\ln 1/\delta} \tag{2.2}$$

b v této rovnici značí počet neskalovaných segmentů. Porovnáním obrázků (2.2) a (2.3) zjistíme snadno, že v našem případě je b = 3, a tudíž $D_H = ln 5/ln 3 > 1$. Ze vztahu (2.2) tedy přímo vyplývá (nesamozřejmý) závěr, že hranice oblasti, která v průběhu vývoje Kochova ostrova nebyla nikdy zasažena procesem vytváření tohoto objektu má rovněž fraktální charakter. Znamená to, že i když v procesu vytváření ostrova dojde vlivem interakcí s fluidní fází ke kontaminaci zasažené oblasti, vykazuje přesto kontura oblasti nekontaminované fraktální charakter. Převedeme-li naši úvahu z fraktální linie na fraktální plochu (např. tak, že

uvažujeme fraktální křivku prodlouženou v každém bodě kolmo k nákresně), dojdeme k závěru, že proces tvorby fraktálního povrchu porésního materiálu se může odehrávat tímto alternativním scénářem.

Omezená fraktalita může rovněž nalézt uplatnění při vytváření umělých fraktálních objektů, např. katalyzátorů s fraktální sítí pórů. Dokonalé soběpodobnosti totiž často brání prostorový překryv částí fraktálu. Vyložená metoda parciálního skalování byla využita při analýze takového objektu – Ďáblova hřebenu.

Problém určení tortuosity - Q12

Tato kapitola se zabývá definicí a významem pojmu tortuosita tak, jak byl podán v práci (Q12⁽¹⁾). Vycházíme při tom z definice tortuosity jako poměru skutečné délky póru a výšky vrstvy:

$$\tau = \frac{L_e}{L} \tag{2.3}$$

Tortuositu obecně zahrnujeme do kapilárního modelu proto, aby byl zmírněn rozpor mezi skutečnou dráhou tekutiny sypanou či fluidující vrstvou mající charakter nepravidelných, zakroucených, kanálků a modelovou představou svazku kapilár. Můžeme ji definovat na základě (zjednodušených) modelů geometrie vrstvy nebo ji uvažovat jako nastavitelný parametr a určit její hodnotu experimentálně. Pro sypané lože se například běžně užívá představa kapilár svírajících s osou toku úhel 45° . Tento model dává hodnotu $\tau = \sqrt{2}$. V literatuře je uváděna řada dalších, konstantních, hodnot pro tortuositu sypaných vrstev (např. $\sqrt{\pi/2}$ nebo $\sqrt{1.5}$). Někteří autoři navrhli složitější výrazy založené na modelových představách o geometrii vrstvy. Tyto modely však vyžadují vesměs numerická řešení příslušných soustav rovnic. Praktické problémy spojené s řešením takovýchto modelů způsobují, že se většina badatelů omezuje na pravoúhlé prostorové sítě kruhových pórů, které se navzájem protínají. Aby byla zajištěna platnost tortuositní funkce pro větší obor operačních podmínek, např. od sypaného lože po expandující fluidní vrstvu, musí tato funkce klesat s rostoucí mezerovitostí s limitní podmínkou:

$$\lim_{\varepsilon \to 1} \tau(\varepsilon) = 1 \tag{2.4}$$

V práci (**Q12**) byl navržen funkční vztah mezi tortuositou a mezerovitostí, který splňuje výše uvedenou podmínku a odráží poměrně dobře experimentálně zjištěné závislosti. Základní předpoklady předkládaného modelu jsou následující:

Uvažujeme element tekutiny pohybující se vrstvou ve směru tlakového gradientu. Dráha elementu tekutiny bude v důsledku srážek s částicemi vrstvy z tohoto směru vychylována do různých směrů. Průměrná dráha může být tedy nahrazena lomenou čarou skládající se z úseků přímky o různé délce. Tyto úseky můžeme vyjádřit jako násobek charakteristické délky δ , která odpovídá střední volné dráze tekutiny v loži. Některé z těchto segmentů dráhy jsou orientovány ve směru (průměrného) gradientu tlaku, tj. axiálně, zbytek je odchýlen od tohoto směru o nějaký, zatím nespecifikovaný, průměrný úhel α . Předpokládáme nyní, že pravděpodobnost toho, že element tekutiny se střetne s částicí lože je před každým elementárním přírůstkem dráhy δ konstantní a tudíž nezávislá na dosud

vykonané dráze a jeho hodnota je rovna $I - \varepsilon$, kde ε je mezerovitost vrstvy^{*}. Pravděpodobnost postupu elementu tekutiny o dráhu δ v axiálním směru je pak logicky dána jako mezerovitost vrstvy, tj. ε . Při použití všech výše uvedených předpokladů dostaneme pro tortuositu následující výraz:

$$\tau(\varepsilon,\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \left[(i - (i - 1)\cos\alpha \varepsilon (1 - \varepsilon)^{i-1} \right] + \frac{(1 - \varepsilon)^{n}}{\cos\alpha}$$
(2.5)

V rovnici (2.5) je n je přirozené číslo splňující podmínku:

$$n-1 < \frac{1}{\cos\alpha} \le n \tag{2.6}$$

Daný model obsahuje nastavitelný parametr α , který musí být určen z experimentálních dat nebo odhadnut z geometrických úvah. Jako nejjednodušší a přirozená možnost se nabízí použít modifikaci Carmanovy domněnky, že kapiláry svírají s osou toku úhel 45° . Zvolíme-li tedy v našem modelu $\alpha = 45^{\circ}$, dostaneme pro $\varepsilon = 0,4$ (mezerovitost odpovídající sypané vrstvě) hodnotu 1,22. Jedná se o slušnou shodu s Carmanem udávanou hodnotou tortuosity, $\tau = \sqrt{2}$. Úhel 45° můžeme brát jako průměr z intervalu $\langle 0^{\circ}, 90^{\circ} \rangle$. Tímto předpokladem se ovšem implicitně deklaruje, že se elementy tekutiny protékající vrstvou neodchylují od axiálního směru o více než 90° a následně se vylučuje možnost lokálního zpětného toku, což je zjevně nekorektní. Přijatelnější je uvažovat jako obor možných odchylek celý interval $\langle 0^{\circ}, 180^{\circ} \rangle$ a dát větší váhu úhlům odchýlení menším než 90° . Z této úvahy vyplývá, že hodnota parametru α by měla ležet v intervalu $\langle 45^{\circ}, 90^{\circ} \rangle$. Tato hodnota vede pro sypanou vrstvu k poněkud vyšší tortuositě než udává Carman.

Chceme-li verifikovat odvozenou rovnici (2.5) pro expanzi, vyjdeme z empirické rovnice pro tlakový spád ve fluidní vrstvě pro laminární režim toku. Funkce mezerovitosti je

$$(1-\varepsilon)^2$$

u této rovnice zapsána ve tvaru ε^4 . Porovnáním s obecnou rovnicí pro tlakový spád vycházející z kapilárního modelu dostaneme pro tortuositu rovnici:

$$\tau(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \tag{2.7}$$

Vzhledem k tomu, že výše uvedená funkce mezerovitosti se osvědčila pro výpočet tlakové ztráty pro expandující fluidní vrstvy, můžeme rovnici (2.7) používat pro tyto systémy. Zbývá ověřit, zda r. (2.7) odpovídá fyzikálně přijatelné hodnotě úhlu α tak, jak bylo výše diskutováno. Jednoduchým numerickým výpočtem zjistíme, že r.(2.7) dobře koresponduje s hodnotou $\alpha = 63^{\circ}$ v rovnici (2.5).

Porovnání s experimentálními výsledky různých autorů nám umožňuje konstatovat, že navrženou funkci tortuosity, r. (2.5), lze použít v širokém rozmezí operačních podmínek při aplikaci kapilárního modelu. Navrženou funkci $l/\sqrt{\varepsilon}$ lze pak doporučit, přes její jednoduchost, pro výpočty expandujících fluidních vrstev.

^{*} Foscolo P. U., Gibilaro L. G., Waldram S. P.: A unified model for particulate expansion of fluidised beds and flow in fixed porous media. Chem. Eng. Sci. **38**, 1251(1983)

Kritérium kvality fluidace - Q5⁽¹¹⁾, Q6⁽¹¹⁾, Q7⁽¹¹⁾, Q11⁽¹¹⁾

Geldart publikoval v roce 1973 práci^{*}, v níž se pokusil o kategorizaci částic pevné fáze při g/s fluidizaci. Výsledkem této práce je diagram, který v logaritmickém souřadném systému $(d_p, \rho_p - \rho_f)$ vymezuje čtyři oblasti, jimž přísluší čtyři základní typy fluidizace zrnitých materiálů A - D. Slovy samotného autora klasifikace: "Materiály ve skupině A vykazují expanzi husté fáze v oblasti mezi prahem fluidace a nástupem bublin. Materiály ve skupině B tvoří bublající vrstvu od dosažení prahové rychlosti fluidace. Materiály ve skupině C je všeobecně obtížné fluidovat a materiály ve skupině D mohou tvořit stabilní tryskající vrstvu."

Podrobnější popis vlastností jednotlivých materiálů klasifikovaných Geldartem udává, že skupina A je tvořena "menšími a lehčími" částicemi, typickými představiteli jsou průmyslové katalyzátory s velikostí zrn zhruba v rozmezí 20 až 100 μ m. Základní vlastností těchto částic je už výše zmíněná schopnost expanze po dosažení prahu fluidace. Existuje tedy oblast *homogenní (partikulární) fluidace* mezi prahovou rychlostí fluidace, (ε_{mf} , U_{mf}), a počátkem tvorby bublin, (ε_{mb} , U_{mb}). Skupina B se oproti tomu vyznačuje tím, že tvorba bublin následuje bezprostředně po dosažení prahové rychlosti fluidace. Typickými představiteli této skupiny jsou materiály s vyšší hustotou jako sklo, písek, ruda nebo lehčí částice s průměrem nad 150 μ m. Bubliny u tohoto typu materiálu mohou dosáhnout koalescencí značného průměru, u vyšších reaktorů srovnatelnému s jeho průměrem. Tento typ fluidace označujeme jako *fluidaci heterogenní (agregativní)*.

Materiály typu C jsou ještě menší a lehčí nežli u typu A a kohezivní síly hrají v jejich chování bezesporu důležitou úlohu. Síly soudržnosti částic jsou tak velké, že je obtížné přivést tyto systémy k fluidaci a plyn jeví tendenci ke tvorbě kanálků – kanálkování. Částice tvoří často aglomeráty držené pohromadě povrchovými silami. Typická velikost pro tyto materiály je obvykle pod 20 mikronů.

Poslední skupinou jsou materiály typu D, které jsou tvořeny velkými částicemi řádu milimetrů. Liší se od skupiny B v tom, že při vyšších rychlostech plynu se může vytvořit tryskající vrstva. Odpovídající fluidní vrstvy se obecně vyznačují vysokou nehomogenitou husté fáze.

V literatuře lze nalézt několik pokusů o fundamentálnější zdůvodnění Geldartovy práce, či dokonalejší klasifikaci. Žádný z nich se však neujal, neboť z praktického hlediska nepřinesly nic podstatně nového. Nicméně účinnost provozování g/s fluidních reaktorů, vyjádřená v pojmech přenosu hmoty a tepla, závisí do značné míry na hydrodynamickém režimu fluidace. Kvalita fluidace, intuitivně chápána v prvním přiblížení, je přímo korelovatelná se vzorky bublin protékajícími vrstvou a s odpovídajícím mícháním a tokem částic pevné fáze. V následující části bude popsáno zavedení empirického kritéria kvality fluidace spočívající v posuzování relativní změny síly vazkého odporu (třecí síly) působící na částice vrstvy. Toto kritérium je zároveň použito pro klasifikaci fluidních materiálů. Předkládané úvahy se omezují na nekohezivní systémy, tj. částice B a D skupiny Geldartovy klasifikace a posléze jsou zobecněny i pro materiály skupiny A.

Po dosažení prahu fluidace definovaném rychlostí U_{mf} a mezerovitostí ε_{mf} je třecí síla F_d , kterou působí proudící plyn na částice fluidní vrstvy rovna tíze částic zmenšené o vztlak. Můžeme říci, že v tomto bodě je dosaženo nejvolnějšího uspořádání pevné fáze, při němž jsou částice lože stále ještě ve vzájemném kontaktu. Předpokládáme nyní, že při vzrůstu rychlosti nad U_{mf} není možná další expanze vrstvy (zabýváme se materiály skupin B a D) a v oblasti distributoru plynu dojde k lokální kompresi. Uvažujeme nyní malý objem husté fáze v blízkosti distributoru. Díky lokálnímu stlačení dojde k porušení rovnováhy sil

^{*} Geldart D.: Types of gas fluidization. Powder Technology 7, 285(1973)

působících na tento element. Výsledkem je pohyb elementu směrem vzhůru a tvorba nehomogenity – bubliny. Intensita tohoto procesu tvorby bublin může být vyjádřena jako jednoduchý poměr sil ($Q5\Omega$, $Q7\Omega$):

$$Q_{mf} = -\frac{1}{G} \left(\frac{\partial F_d}{\partial \varepsilon} \right)_{mf}$$
(2.8)

Vidíme, že Q_{mf} může být chápáno jako měřítko poruchy lokální rovnováhy sil v oblasti distributoru. Čím vyšší je hodnota Q_{mf} , tím nižší porucha mezerovitosti je třeba ke tvorbě bubliny a naopak. Odtud plyne, že vyšší hodnoty kritéria povedou ke snazší tvorbě bublin a tudíž k systémům s režimem volného bublání, nízké hodnoty Q_{mf} naopak k lokálnímu kanálkování nebo tvorbě tryskající vrstvy.

Pro použití kritéria kvality fluidace je nutno odvodit vhodný aplikační vzorec. Třecí sílu můžeme vyjádřit pomocí rovnice $\Delta p A = F_d$, kde Δp je tlakový spád přes vrstvu a A je průřez lože. K vyčíslení tlakové ztráty přes vrstvu použijeme Ergunovu rovnici (2.9):

$$-\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{\mu U}{(\phi d_p)^2} \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} + 1,75 \frac{\rho_f U^2}{\phi d_p} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}$$
(2.9)

Výsledný vztah dostaneme ve tvaru (Q5⁽¹⁾, Q7⁽¹⁾):

$$Q_{mf} = \frac{1}{1 - \varepsilon_{mf} + 0.012 \,\phi \operatorname{Re}_{mf}} + \frac{3}{\varepsilon_{mf}}$$
(2.10)

Rovnice (2.10) spojuje tři parametry důležité pro charakter fluidace: poměr sil na levé straně, mezerovitost na prahu fluidace jako parametr geometrický a konečně Reynoldsovo kritérium jako parametr hydrodynamický. Přímé použití této rovnice předpokládá experimentální zjištění mezerovitosti a hodnoty Reynoldsova kritéria na prahu fluidace. Problém ovšem představuje věrohodné určení hodnoty sféricity částic, ϕ . Nabízí se možnost experimentálního určení metodami analýzy obrazu, které jsou teoreticky náročné a výsledek často neodpovídá vynaloženému úsilí, druhou možností je formálně dopočítat sféricitu z Ergunovy rovnici při znalosti všech ostatních členů.

Z grafického vyjádření r. (2.10) v prostoru (Q, (ε, Re))_{mf} rovnou plyne možnost hodnotit kvalitu fluidace (Q7 \square). První, hrubá, klasifikace fluidních systémů je podána v práci (Q5 \square).

Rovnice (2.10) byla odvozena z originální formy Ergunovy rovnice a koeficient 0,012 u součinu sféricity s Reynoldsovým kritériem dán jako poměr číselných koeficientů členů této rovnice: $0,012 \sim 1,75/150$. Naskýtá se možnost zobecnění kritéria (2.10) ve dvou směrech (Q6,Q11,Q1). V prvé řadě uvážíme, že podmínky prahu fluidace pro neexpandující částice jsou prakticky identické s počátkem tvorby bublin. Můžeme tudíž použít kritérium kvality fluidace i pro expandující materiály skupiny A dle Geldarta s tím, že logaritmická derivace třecí síly je brána v bodě počátku tvorby bublin a označována Q_{mb} .

Druhá oblast zobecnění spočívá ve zkoumání zobecněné Ergunovy rovnice, popřípadě aplikace jiných typů korelací pro tlakový spád přes vrstvu. V této fázi budeme předpokládat tortuositu nezávislou na mezerovitosti a připustíme naopak závislost koeficientů u členů r. (2.9) na lineární rychlosti:

$$\left(-\frac{\Delta P}{L}\right)_{U,\varepsilon} = f_1(U) \frac{\mu U}{\left(\phi d_p\right)^2} \frac{\left(1-\varepsilon\right)^2}{\varepsilon^3} + f_2(U) \frac{\rho_f U^2}{\phi d_p} \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} (2.11)$$

 f_1 a f_2 jsou blíže nespecifikované funkce lineární rychlosti zahrnující v sobě rovněž tortuositu. Zavedeme nyní kritérium Q pro rovnici (2.11):

$$Q = \left(-\frac{1}{F_d} \frac{\partial F_d}{\partial \varepsilon}\right)_{U,\varepsilon} = \frac{1}{1 - \varepsilon + \operatorname{Re}^*} + \frac{3}{\varepsilon}$$
(2.12)

$$\operatorname{Re}^{*} = \frac{f_{2}(U)}{f_{1}(U)} \phi \operatorname{Re}$$
 (2.13)

Z obr. (2.4) vidíme, že pro $Re^* < 0.577$ mají křivky Q vs. ε minimum. To by vzhledem k podané interpretaci Q_{mb} znamenalo, že systémy s vysokou hodnotou mezerovitosti na prahu tvorby bublin, ε_{mb} , by měly vzrůstající tendenci k režimu volného bublání. Experimentální zkušenosti s neexpandujícími materiály však ukazují, že nejvyšší hodnoty ε_{mb} nacházíme u velkých částic nepravidelného tvaru, které při fluidaci jeví vysokou tendenci k lokálnímu kanálkování. Tento rozpor vede k závěru, že platnost r. (2.12) je omezena výlučně na klesající část této funkce (Q6^(C)). Nalezenému minimu ($\partial Q/\partial \varepsilon = 0$) odpovídá funkce:

$$\varepsilon = 0,634 (\text{Re}^* + 1)$$
 (2.14)

Z rovnic (2.12) a (2.14) dostaneme následující výraz pro Q:

$$Q = \left(-\frac{1}{F_d} \frac{\partial F_d}{\partial \varepsilon}\right)_{U,\varepsilon} = \frac{4,732}{\varepsilon}$$
(2.15)

Rovnice (2.15) představuje analytické vyjádření křivky omezující platnost r. (2.12), viz obr. (2.5).

V dalším použijeme pro vyjádření F_d model obtékání soustavy částic (partikulární model), ze kterého plyne:

$$F_d = N F_{D0} g(\varepsilon) \tag{2.16}$$

 F_{D0} je síla vazkého odporu pro izolovanou obtékanou částici, N je počet částic. Závislost na mezerovitosti je v r. (2.16) separována pouze do členu $g(\varepsilon)$. Ten zvolíme na základě řady experimentálních prací, viz (Q6Q), ve formě $g(\varepsilon) = \varepsilon^{-n}$ s hodnotou exponentu n mezi 4,6 a 4,8. Tato funkce mezerovitosti byla odvozena na základě Richardson – Zakiho vztahu pro expanzi^{*} a vyhovuje proto s výše uvedeným exponentem dobře pro popis expanze l/s fluidních vrstev. V literatuře^{**} je však nárokováno i její použití pro expanzi g/s vrstev.

Výpočet Q poskytne následující vztah:

^{*} Richardson J.F. and Zaki W.N.: Sedimentation and fluidization: Part I. Trans. Trans. IChemE **32**, 35(1954) ^{**} Foscolo P. U., Gibilaro L. G., Waldram S. P.: A unified model for particulate expansion of fluidised beds and flow in fixed porous media. Chem. Eng. Sci. **38**, 1251(1983).

$$Q = \left(-\frac{1}{F_d}\frac{\partial F_d}{\partial \varepsilon}\right)_{U_{\varepsilon}} = \frac{n}{\varepsilon}$$
(2.17)



Obr. 2.4 Závislost Q na ε podle r (2.12)

Z porovnání je zřejmá praktická identita rovnic (2.15) a (2.17). Z fyzikálního hlediska můžeme tuto identitu interpretovat tak, že g/s fluidní systémy (popsatelné r. (2.11)) konvergují s rostoucí expanzí k fluidaci l/s systémů, tj. prakticky neomezené expanzi s absencí bublin. Tento stav lze zároveň považovat za mezní stav g/s fluidace. Zároveň identita r. (2.15) a (2.17) poskytuje chybějící pojítko mezi popisem fluidace na základě kapilárního modelu a Richardson – Zakiho vztahem pro expanzi.

Použití rovnic (2.12) a (2.15) pro bod počátku tvorby bublin umožňuje nyní porovnávat kvalitu fluidace expandujících i neexpandujících fluidních vrstev (s výjimkou vysoce kohezivních materiálů třídy C). Podle naznačené koncepce konvergence g/s systémů k limitní křivce bychom vlastně měli vystačit pouze se vztahem (2.12), což by bylo pravda, kdybychom pro každý systém znali "správnou" Ergunovu rovnici. Ve skutečnosti ovšem máme vždy k dispozici pouze přibližné korelace. Postupujeme proto při klasifikaci fluidace podle kritéria Q tak, že v případě, kdy hodnota Q_{mb} vypočtená z r. (2.12) pro U_{mb} a ε_{mb} spadá na klesající část křivky $Q - \varepsilon$, bereme tuto hodnotu. V případě, že Q_{mb} neleží na klesající části křivky použijeme r. (2.15) pro model obtékání soustavy částic. Klasifikace byla provedena pomocí našich experimentálních údajů (Q5🚇) i dostupných dat z literatury, podrobnosti jsou uvedeny v práci (Q111). Z řady vyvozených závěrů zmíním pouze nejzajímavější poznatek, že Q_{mb} odráží podobnost způsobu fluidizace velkých nepravidelných částic a kohezivních materiálů o malém průměru zrn. Na jedné straně se jedná o tendenci k lokálnímu obtékání a tryskající fluidní vrstvě, na straně druhé ke kanálkování. Jistým vysvětlením tohoto faktu může být hypotéza, že malé částice se vlivem kohezivních sil spojují do větších nepravidelných agregátů, kterým přísluší podobné hodnoty Reynoldsova kritéria jako částicím D skupiny Geldartovy klasifikace.



Obr. 2.5 Mezní křivka pro rovnici (2.12)

Určení mezí aplikovatelnosti kapilárního modelu – Q26

Nejpoužívanější korelací pro odhad tlakového spádu v pevných i fluidních vrstvách (výjimku tvoří vrstvy vysoce expandované) je Ergunova rovnice. Důvodem její oblíbenosti je zřejmě jednoduchost a robustnost, která umožňuje její aplikaci s "rozumnou" chybou v širokém rozmezí podmínek. V průběhu doby byla vypracována celá řada modelů, které slouží ke zpřesnění Ergunovy rovnice. Cenou za tuto přesnost však bývá zmenšení oblasti, v níž lze danou korelaci aplikovat. Vzniká tak důležitá otázka, jak rozpoznat bez nutnosti náročných experimentů meze aplikovatelnosti různých typů kapilárního modelu. Řešením tohoto problému se zabývá práce (Q26).

Postupem používaným v literatuře je výpočet tlakového spádu pomocí konkrétního kapilárního a partikulárního modelu a jejich porovnání. Meze aplikovatelnosti modelů se pak určí numerickým řešením rovnice^{*}:

$$\left(-\frac{\Delta P}{L}\right)_{cap} = \left(-\frac{\Delta P}{L}\right)_{part} \tag{2.18}$$

Práce (Q26) představuje alternativní metodu určení aplikovatelnost daného kapilárního modelu, založenou na fenomenologickém přístupu. Vyjdu z r.(2.11), která představuje obecnou verzi kapilárního modelu – místo funkcí f_1 a f_2 píšu nyní kvůli vhodné fyzikální interpretaci $A\tau(\varepsilon)^2$ a $B\tau(\varepsilon)^3$. Kritérium Q pro tuto rovnici dává:

^{*} Mauret E. and Renaud M.: Transport phenomena in multi-particle systems – I. Limits of applicability of capillary model in high voidage beds – application to fixed beds of fibers and fluidized beds of spheres. Chem. Eng. Sci. **52**, 1807(1997)

$$Q = \left(-\frac{1}{F_d}\frac{\partial F_d}{\partial \varepsilon}\right)_{U,\varepsilon} = \frac{1 - \partial \tau / \partial \varepsilon (B/A)\operatorname{Re}}{1 - \varepsilon + \tau (B/A)\operatorname{Re}} + \frac{3}{\varepsilon} - \frac{2 \partial \tau / \partial \varepsilon}{\tau}$$
(2.19)

Platnost r. (2.19) je omezena na klesající část křivky, tj. na splnění podmínky $\partial Q / \partial \varepsilon \leq 0$. Hraniční křivka omezující platnost modelu daného r. (2.11) je potom definována rovnicí:

$$\frac{\partial Q}{\partial \varepsilon} = 0 \tag{2.20}$$

R. (2.20) byla vyřešena pro řadu tlakových korelací nalezených v literatuře. Uvedené práce byly vybrány tak, aby představovaly pokud možno reprezentativní vzorek v praxi používaných kapilárních modelů. Dosažené výsledky jsou znázorněny v obr. (2.6). Šedivý pruh označuje pásmo, v němž se nachází všechny mezní křivky uvažovaných kapilárních modelů. Z obrázku je vidět, že tyto křivky tvoří poměrně úzký pás v oblasti $0 \le Re \le 1$. Tento pás se značně rozšiřuje pro vyšší hodnoty Re (je třeba vzít v úvahu logaritmickou souřadnici). Vzhledem k výše konstatované reprezentativnosti použitých kapilárních modelů je možno vyslovit hypotézu, že pro oblast nad "šedivou zónou" je obecně nevhodné použít k výpočtu tlakového spádu kapilární model.



Obr. 2.6 Rozsah mezních křivek pro aplikaci kapilárního modelu (Q26

3. Studium dynamického tlakového signálu vícefázových soustav

Parametrické modely systémů - Q3⁽¹⁾, Q16⁽¹⁾

Lineární parametrické metody poskytují v podstatě ekvivalentní informaci jako modely neparametrické (výkonová spektrální hustota, korelační funkce), odpadá však nutnost kvantifikace informace obsažené např. ve spektrech (cenou za to je samozřejmě předem zvolená struktura modelu). Další výhodou parametrických modelů je skutečnost, že si většinou vystačíme s kratšími časovými řadami, než při zpracování signálu metodami neparametrickými. V krajním případě můžeme použít metod rekurzivních, které počítají hodnoty koeficientů s každou novou naměřenou hodnotou sledované veličiny. Tohoto způsobu se často používá pro online identifikaci soustav při řízení v reálném čase. V těchto případech se často s měnícím se provozním režimem reaktoru mění i dynamika a rekurzivní metody umožňují tyto změny postihnout v průběžně vypočítávaných hodnotách vektoru parametrů. Pro offline identifikaci systémů jsou většinou tyto algoritmy zbytečné, neboť narůstající kapacita počítačových pamětí umožňuje bezproblémové uchovávání i relativně velkého množství dat. V naší práci jsme se takřka výhradně věnovali offline identifikaci, a z toho důvodu nebyla metodika rekurzivních algoritmů rozvíjena.

V práci (Q3⁽¹⁾) byl řešen problém objektivní detekce pístování fluidní vrstvy. K tomuto účelu byl použit autoregresní model tlakových fluktuací. Vyšli jsme z faktu, že dynamický model bublající fluidní vrstvy lze přirovnat k soustavě spřažených oscilátorů, které můžeme popsat soustavou diferenciálních rovnic druhého řádu nebo jednou diferenciální rovnicí řádu vyššího, zatímco k popisu pístující vrstvy postačuje rovnice jednoduchého oscilátoru, tj. rovnice druhého řádu. Z toho vyplývá, že k určení rozdílu mezi oběma režimy lze použít optimalizace řádu AR modelu. Pro režim pístování by měl být optimální druhý řád, zatímco pro režim bublající vrstvy bude optimální řád vyšší. Získané výsledky potvrdily oprávněnost tohoto předpokladu a umožnily návrh jednoduchého kritéria pro indikaci přechodu mezi bublající a pístující fluidní vrstvou.

Pro další výklad je třeba pouze uvést jako fakt, že základní vlastností systému vykazujícího chaotické chování (deterministický chaos) je citlivost na počáteční podmínky, tj. dvě trajektorie ve fázovém prostoru vycházející z navzájem blízkých počátečních bodů se ve svém časovém vývoji exponenciálně vzdalují. Z uvedené vlastnosti je zřejmé, že deterministický chaos mohou vykazovat pouze systémy nelineární. Predikce tohoto chování je u reálných soustav velmi důležitá, neboť implikuje silnou odezvu soustavy na malou poruchu. K indikaci deterministického chaosu se používají často metody založené na fraktálním charakteru geometrického znázornění atraktoru^{*}.

V práci (Q16⁽¹⁾) byla použita alternativní metoda indikace chaotického chování při přechodu dvou režimů v horizontálním potrubí protékaném plynokapalnou směsí. Konkrétně se jednalo o přechod od periodického režimu elongovaných bublin k pístovému toku. Základním předpokladem použité metody bylo, že nelineární (lokální) model signálu musí, díky nelineárním interakcím charakteristickým pro systém vykazující deterministický chaos, popsat signál z takovéhoto systému lépe než jakýkoliv model lineární (globální). Oba typy modelů byly konstruovány jako AR prediktory n-tého řádu. V případě lineárním byly koeficienty rovnice vypočteny jednorázově pomocí Youle-Walkerových rovnic, tj. koeficienty jsou invariantní vzhledem k časovému posunu. Pro nelineární prediktor byly autoregresní koeficienty určovány v závislosti na časovém posunu. Oba navržené prediktory byly pro danou časovou řadu porovnány z hlediska optimální k-stupňové predikce dat. Metoda byla aplikována na dynamický tlakový signál v horizontálním potrubí a výsledky

^{*} Marek M., Schreiber I.: Chaotic Behaviour of Deterministic Dissipative Systems. Academia, Praha, 1991.

ukázaly existenci slabě chaotického režimu v oblasti přechodu mezi režimem elongovaných bublin a režimem pístování.

Fraktální analýza režimů v probublávané koloně - Q9🚇

Vzhledem k tomu, že většina metod klasické statistické analýzy náhodných procesů vychází z předpokladu o vzájemné nezávislosti náhodných veličin a jejich identickém rozdělení (nejlépe normálním), je použití těchto technik při studiu časových řad popisujících hydrodynamiku vícefázových systémů problematické. V těchto případech totiž často nejsou výše uvedené podmínky splněny ani přibližně^{*}. Jednou z metod umožňujících zmíněné problémy překonat a získat užitečné charakteristiky časových řad je *fraktální analýza*.

Fraktální analýza časových řad vychází z toho, že na záznamy časových řad se můžeme dívat jako na křivky vykazující fraktální rysy. Prvním případem takovéto analýzy, vzniklým ještě před vytvořením vlastní fraktální geometrie, je tzv. *R/S analýza*. Tuto metodu zavedl britský vědec Hurst v roce 1951. Hurst analyzoval obsáhlý soubor dat obsahujících průtoky řek, vydatnost srážek a kolísání hladin v přehradních nádržích^{**}. Zjistil přitom zajímavou skutečnost: označíme-li kapacitu optimálního reservoáru ve sledovaném časovém intervalu τ jako $R(\tau)$ a směrodatnou odchylku posloupnosti hodnot výtoku z reservoáru jako $S(\tau)$, platí v určitém rozsahu hodnot τ úměra:

$$\frac{R(\tau)}{S(\tau)} \approx \tau^H , \qquad (3.1)$$

kde H je tzv. Hurstův exponent, který nabývá hodnot mezi 0,5 a 1.

Pozdější analýza ukázala, že časové řady vykazující chování, jež popsal Hurst, vykazují rysy soběodpovídajících (self-affine) fraktálů a lze je modelovat pomocí zobecněné náhodné procházky⁺. Vychází se přitom z faktu, že u náhodné procházky dostaneme invarianci měřítka příslušné náhodné veličiny, když transformaci časového měřítka

$$t \to \delta t$$
 (3.2)

přiřadíme transformaci měřítka náhodné veličiny X(t),

$$X(t) \to \delta^{1/2} X(t) \tag{3.3}$$

Náhodnou funkci polohy částice X(t) při jednorozměrném náhodné procházce lze zavést pomocí rovnice (3.4):

$$X(t) - X(t_0) \approx \xi |t - t_0|^H$$
, (3.4)

Kde $\{\xi\}$ je normalizovaný nezávislý Gaussovský náhodný proces a H = 1/2. Je zřejmé, že veličina $X(t) - X(t_0)$ splňuje relace (3.2) a (3.3).

Mandelbrot a van Ness⁺ zavedli koncepci *frakcionovaného Brownovu pohybu (fBm)* jako zobecnění náhodné funkce X(t) pro všechny hodnoty exponentů parametru H z intervalu (0, 1). Funkci X(t) nyní označujeme $B_H(t)$, abychom zdůraznili význam parametru H. Z jednoduchého výpočtu korelační funkce vyplývá, že pro $H = \frac{1}{2}$ je proces $B_H(t)$ nezávislým

^{*} Drahoš J.: Analýza a diagnostika hydrodynamického režimu dvoufázových chemických reaktorů. Doktorská disertační práce, VŠCHT Praha, Fakulta chemicko-inženýrská, Praha 1998.

^{**} Hurst H. E.: Long-term storage capacity of reservoirs. Trans. Am. Soc. Civil Engrs 116, 770 (1951).

⁺ Mandelbrot B. B., Ness van J. V.: Fractional Brownian motions, fractional noise and applications. SIAM Rev. **10**, 422 (1968)

náhodným procesem, tj. jeho hodnoty v různých časech nejsou korelovány. Pro H > 1/2 má posloupnost $\Delta B_H(t)$ kladnou korelační funkci a stupeň korelace roste s rostoucí hodnotou H. Proces v tomto případě vykazuje dlouhé periody výskytu hodnot vyšších (nebo nižších) než střední hodnota, tj. proces má ve svém průběhu výrazné trendy. Tento typ procesů nazýváme *persistentní*. Pro $H < \frac{1}{2}$ se procesy vyznačují významnými fluktuacemi následných hodnot vzhledem ke střední hodnotě a nazýváme je procesy *antipersistentními*. Jde o procesy se silnou šumovou složku.

Fraktální dimenze soběodpovídajících fraktálů není jednoznačně definována. Často používaným výrazem pro časové řady je:

$$D = 2 - H \tag{3.5}$$

Tímto způsobem je uveden do souvislosti Hurstův exponent s fraktální dimenzí grafického znázornění časové řady.

Frakcionovaný Brownův pohyb byl využit k analýze časových řad tlakových fluktuací v probublávané koloně (Q9⁽¹⁾). Hurstův exponent byl vypočten jednak pomocí R/S analýzy, r. (3.1), jednak pomocí vztahu (3.5). Hodnota fraktální dimenze kumulované časové řady byla odhadnuta metodou pokrývání čtverci (box-counting,). Oba způsoby výpočtu dávaly srovnatelné výsledky a analýza ukázala, že tlakové fluktuace v homogenním režimu vykazují silně persistentní charakter s hodnotami H > 0,85. Fyzikálně tomu odpovídalo pomalé kolísání úrovně hladiny, způsobené velkým množstvím bublin malého průměru. Fluktuace tlaku v turbulentním režimu odpovídaly modelu ve tvaru superpozice periodického signálu a pásmově omezeného šumu s odpovídajícími hodnotami $H \approx 0,6$.

Analýza tlakových fluktuací v bublající fluidní vrstvě - Q1, Q33, Q35

Tlakové fluktuace jsou z praktického hlediska nejsnadněji měřitelnou fyzikální veličinou, a proto jsou časové řady změn tlaku hojně užívány při analýze hydrodynamiky vícefázových systémů. Experimentální jednoduchost a robustnost je však vyvážena integrálním charakterem tlakového signálu ztěžující interpretaci výsledků ve formě fyzikálních modelů popisujících strukturu těchto systémů. Na druhou stranu, pro účely diagnostiky stavů nebo řízení v uzavřené smyčce nepředstavuje tato okolnost principiální závadu.

V práci (Q1⁽¹⁾) byla nalezena lineární závislost směrodatné odchylky tlakových fluktuací σ_p na lineární rychlosti plynu ve tvaru:

$$\sigma_P = A + BU \tag{3.6}$$

Rovnice (3.6) platí pro částice B a D Geldartovy klasifikace, kde prahová rychlost fluidace U_{mf} je prakticky shodná s prahovou rychlostí tvorby bublin. Vzhledem k tomu, že tlakové fluktuace ve vrstvě jsou způsobeny přítomností bublin, můžeme psát:

$$0 = A + BU_{mf}$$

$$U_{mf} = -\frac{A}{B}$$
(3.7)

Rovnice (3.7) dává možnost určení prahové rychlosti fluidace z dat naměřených ve fluidním stavu (na rozdíl od tradiční metody, kdy je třeba k určení U_{mf} provést řadu měření tlakového spádu pro rozsah lineárních rychlostí odpovídajících přechodu pevné lože \rightarrow fluidní vrstva). Hodnoty koeficientů A a B v r. (3.7) mohou být vyhodnocovány v reálném čase, a tak je k dispozici průběžná hodnota prahové rychlosti fluidace, která může být použita k řízení fluidního reaktoru^{*}.

Vztah (3.6) byl teoreticky interpretován pomocí modelu založeného na kinetické energii částic fluidní vrstvy. V práci Furukawa a Ohmae^{**}, která se zabývá analogií mezi fluidní vrstvou a kapalinou byl odvozen vztah určující lineární rychlost plynu při homogenní fluidizaci jako ekvivalent teploty u kapaliny. V návaznosti na tento výsledek a (Q1⁽¹⁾) byl v práci (Q33⁽¹⁾) učiněn pokus definovat fyzikální entropii emulzní fáze bublající fluidní vrstvy. Výsledný výraz pro normovanou rychlost růstu entropie byl porovnán s korelací navrženou v literatuře⁺ pro Kolmogorovovu entropii fluidního lože. Navzdory značné různosti fyzikálních představ vedoucích k definici obou pojmů byla shledána značná podobnost ve funkční závislosti obou typů entropie na lineární rychlosti plynu.

Fluidní reaktory s bublající vrstvou (heterogenní fluidace) představují z průmyslového hlediska zdaleka nejdůležitější typ g/s fluidních reaktorů. Spolehlivý popis vlastností fluidní vrstvy v závislosti na řídících parametrech reaktoru (průtoky plynné a pevné fáze, odvod či přívod tepla do vrstvy, apod.) představuje nutnou podmínku pro optimální provozování těchto zařízení. Mezi nejdůležitější charakteristiky vrstvy patří bezesporu velikost a rychlost bublin, kteréžto vlastnosti přímo ovlivňují intenzitu promíchávání částic pevné fáze a následně i přenos hmoty a energie v systému. Na druhé straně ovlivňuje velikost bublin kontakt částic katalyzátoru s plynnou fází a tím i účinnost reakcí ve fluidní vrstvě. Přímé měření bublin ve vrstvě je, obzvláště v případě trojrozměrného lože, značně experimentálně náročné a z provozního hlediska stěží proveditelné. Ukazuje se, že namísto přímého měření bublin je možné použít tlakové fluktuace generované stoupajícími bublinami jako nepřímou míru velikosti a rychlosti bublin. Jednou z výhod této metody je, že tlakové fluktuace lze často měřit i v komoře roštu, a tak se lze vyhnout problémům spojeným s přítomností sondy v prostoru reaktoru. Běžně používanou metodou analýzy tlakových signálů je spektrální analýza. Výkonová spektrální hustota poskytuje ve frekvenční oblasti nejúplnější informaci o měřeném signálu, avšak při fyzikální analýze této informace musíme mít na zřeteli, že tlakové fluktuace ve fluidním loži pocházejí z několika různých zdrojů. Konkrétně je časový průběh tlakového signálu superpozicí:

- (i) lokálních fluktuací zapříčiněných stoupajícími bublinami anebo turbulencí
- (ii) rychle se šířícími tlakovými vlnami vznikajícími v důsledku tvorby bublin, jejich koalescence a erupce na povrchu vrstvy.

K rozlišení těchto dvou základních zdrojů dynamického tlakového signálu může být použita koherenční funkce⁺⁺. Tlakové vlny se pohybují ložem nahoru a dolů od místa svého vzniku. Ve směru vzhůru klesá jejich amplituda lineárně se vzdáleností od místa vzniku, avšak neklesá ve směru dolů⁺⁺. Tyto vlny mohou být tedy měřeny i v komoře roštu a budou koherentní se signálem naměřeným ve vrstvě. Na rozdíl od toho produkují stoupající bubliny pouze lokální fluktuace tlaku, které nemohou být detekovány v komoře roštu. Koherence mezi signálem měřeným v komoře roštu a signálem měřeným ve vrstvě tedy určuje, zda jsou

^{*} Punčochář M., Čermák J., Drahoš J., Selucký K., Svoboda K.: Způsob určování prahových rychlostí fluidace. Czech. Pat. AO 238 677 (1985).

^{**} Furukawa J. and Ohmae T.: Liquidlike properties of fluidized systems. Ind. Eng. Chem. Fundam. **50**, 821 (1958).

⁺ Schouten J. C., Vander Stapen M. L. M., Van den Bleek C. M.: Scale-up of chaotic fluidized bed hydrodynamic. Chem. Eng. Sci. **51**, 1991 (1996).

⁺⁺ Van der Schaaf J., Schouten J. C., Johnsson F., Van den Bleek C. M.: Non-intrusive determination of bubble and slug length scales in fluidized beds by decomposition of the power spectral density of pressure time series. Int. J. Multiphase Flow **28**, 865 (2002).

dominantním zdrojem tlakového signálu rychle se šířící vlny (vysoká koherence) nebo stoupající bubliny (popř. turbulence), vykazující nízkou koherenci.

Van der Schaaf⁺⁺ využil inkoherentní část integrálu výkonové spektrální hustoty k definici variance tlakových fluktuací, $\sigma_{P,i}^2$, ve tvaru:

$$\sigma_{P,i}^2 = \int_0^\infty (1 - \chi_{xy}^2) \Phi_{yy} \, df \quad , \tag{3.8}$$

Směrodatná odchylka $\sigma_{P,i}$ vypočtená z r. (3.8) byla pak korelována do užitečného empirického vztahu pro velikost bublin ve vrstvě:

$$D_B \approx \frac{\sigma_{P,i}}{\rho_s g (1 - \varepsilon_{mf})}$$
(3.9)

Ze vztahu (3.9) plyne (Q35), že směrodatná odchylka tlakových fluktuací vypočtená z inkoherentní části signálu je úměrná výrazu $(U - U_{mf})^{0,4}$. Z práce (Q1) však vyplynul pro směrodatnou odchylku jednoznačně experimentálně dokázaný vztah (3.6). σ_p použité ve vztahu (3.6) odpovídá ovšem varianci vypočtené z celkového tlakového signálu, tj. integrálu $\int \Phi_{yy} df$. Fakt, že vztah pro směrodatnou odchylku počítaný z lokálního tlakového signálu a z celkového signálu měřeného ve vrstvě vykazují takovou odlišnost na lineární rychlosti plynu je odrazem výše zmíněných mechanismů vzniku tlakových fluktuací a zaslouží si hlubší kvantitativní rozbor.

V práci (Q35) je takovýto rozbor podán. Pro výpočet směrodatné odchylky tlakových fluktuací odpovídající tlakovému signálu stoupajících bublin, $\sigma_{P,i}$, je použit zjednodušený model vycházející z výpočtu rozložení tlakového pole kolem izolované bubliny, obr. (3.1), pohybující se ve fluidním loži na prahu fluidace^{*}. Tento model je odvozen z dvoufázové teorie bublající fluidní vrstvy a při porovnání s experimentálními daty se ukázal, navzdory své jednoduchosti, jako vyhovující.



Obr. 3.1 Rozložení tlakového pole kolem bubliny

^{*} Davidson J. F. and Harrison D.: Fluidized Particle. Cambridge University Press, Cambridge, 1963.

Z obr. (3.1) vyplývají základní zjednodušující předpoklady (Q35^[]):

- Tlakové pole je symetrické vzhledem k k rovině procházející centrem bubliny a kolmé k axiální ose a významně zasahuje do objemu daného koulí o průměru 3R_B. Pokud jsou bubliny v tomto objemu rovnoměrně rozmístěny, což lze přinejmenším u režimu rovnoměrného bublání předpokládat, bude superpozice tlakového signálu těchto bublin, průměrována přes dostatečně dlouhý časový interval, zanedbatelná.
- 2. Příspěvek bublin protínajících aktuálně senzor představuje rozhodující podíl z celkového tlakového signálu.
- 3. Bubliny mají kulový tvar bez úplavu.

Přijetí těchto tří předpokladů umožňuje poměrně snadno obdržet rovnici pro výpočet směrodatné odchylky nekoherentní části tlakového signálu, σ_{P_i} , ve tvaru:

$$\sigma_{P_i} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\rho_s - \rho_f) g (1 - \varepsilon_{mf}) D_B$$
(3.10)

Odvození r. (3.10) obsahuje implicitní předpoklad rovnoměrného prostorového rozložení bublin kolem tlakového senzoru. To znamená, že při dostatečně dlouhém časovém intervalu budou všechny pozice ve kterých bubliny protínají senzor realizovány se stejnou četností. Numerický faktor v r. (3.10) je důsledkem zjednodušujícího předpokladu (3). Pro odhad přesnosti r. (3.10) je třeba vzít v úvahu fakt, že experimentálně měřené tlakové pole v okolí bubliny není perfektně symetrické.

Vysvětlení lineárního vztahu pro směrodatnou odchylku vypočtenou z celkového tlakového signálu, r. (3.6), představuje obtížnější problém. Komplikace vznikají především při pokusu o exaktní popis příspěvku tlakového signálu způsobeného tvorbou, koalescencí a zánikem bublin. V práci (Q35) byl proto zvolen postup založený na analýze distribuce energie disipované v bublající vrstvě.

Vyjdeme ze vztahu pro celkový příkon energie, E_{tot} , potřebný pro udržení homogenní fluidace^{*}:

$$E_{tot} = \left[(1 - \varepsilon) \rho_s + \varepsilon \rho_f \right] g L A U$$
(3.11)

Z toho je část $E_{fl} = \rho_f g L A U$ spotřebována na transport tekutiny vrstvou o výšce L. Člen $E_{dis} = (1-\varepsilon)(\rho_s - \rho_f)g L A U$ pak reprezentuje část výkonu spotřebovanou na fluidizaci částic. Podle dvoufázové teorie je bublající fluidní vrstva tvořena emulzní fází, která má přibližně konstantní mezerovitost ε_{mf} , a bublinami protékajícími emulzní fází. Pro U> U_{mf} můžeme tedy definovat ΔE_{dis} jako přírůstek příkonu, který se spotřebovává ve formě disipovaného tepla na překonání odporu při vzájemném pohybu částic vrstvy a bublin:

$$\Delta E_{dis}(U_{mf}, U) = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_s - \rho_f)gV_{mf}(U - U_{mf})$$
(3.12)

Rovnici (3.12) můžeme normovat na jednotkový objem emulzní fáze:

$$\Delta e_{dis}(U_{mf}, U) = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_s - \rho_f)g(U - U_{mf})$$
(3.13)

Z porovnání rovnic (3.6) a (3.13) vyplývá možnost vyjádřit směrodatnou odchylku tlakových fluktuací σ_P následujícím výrazem:

^{*} Molerus O.: Principles of Flow in Disperse Systems. Chapman & Hall, London, 1993.

$$\sigma_P \approx \Delta e_{dis}(U_{mf}, U) = (1 - \varepsilon_{mf})(\rho_s - \rho_f)g(U - U_{mf})$$
(3.14)

Vztah (3.14) dává intuitivně přijatelnou interpretaci σ_P jako veličiny proporcionální přírůstku normalizované změny disipované energie (zmařeného výkonu) způsobenému vzrůstem rychlosti fluidizační tekutiny nad práh fluidace. Tento vztah byl rovněž úspěšně verifikován porovnáním s experimentálními daty (Q35⁽¹⁾).

Porovnání vztahů (3.10) a (3.14) zjistíme jejich určitou nekonzistenci. Zatímco rovnice (3.14) dává tlakové fluktuace do vztahu ke spotřebě disipované energie, r. (3.10) je formulována s užitím parametrů emulzní fáze a bublin. Vzhledem k tomu, že je r. (3.14) obecnější, bylo by záhodno formulovat vztah pro nekoherentní část tlakových fluktuací rovněž pomocí energie. Toho lze dosáhnout, uvědomíme-li si, že numerickou konstantu v r. (3.10) nelze brát jako dogma, ale jako výsledek řady zjednodušujících předpokladů. Můžeme potom dosadit za součin gD_B v rovnici výraz z rovnice pro rychlost stoupání izolované bubliny ve fluidním loži na prahu fluidace^{*}:

$$U_{B\infty} = 0.71 \sqrt{g D_B} \tag{3.15}$$

Po triviální úpravě dostaneme následující vztah:

$$\sigma_{P_i} \approx \frac{1}{2} \left(1 - \varepsilon_{mf} \right) \rho_s U_{B\infty}^2$$
(3.16)

Relace (3.16) prostě stanoví, že $\sigma_{P,i}$ je úměrné kinetické energii jednotkového objemu částic vrstvy nacházejících se v úplavu bubliny. Vzhledem k tomu, že ΔE_{dis} je úměrný průměrné kinetické energii částic emulzní fáze, jsou vztahy (3.14) a (3.16) zcela konsistentní.

Modelování pístující fluidní vrstvy - Q4

Režim pístující vrstvy nastává, když se velikost bublin (díky koalescenci) stává srovnatelnou s průměrem reaktoru. Pístování nastává pouze u reaktorů s malým průměrem a/nebo s velkým poměrem výšky ku průměru. Spolehlivé určování prahu pístování je důležité, neboť přestup hmoty a tepla v pístujícím loži se značně liší od poměrů v reaktorech s bublající vrstvou. Je proto třeba značné opatrnosti obzvláště při návrzích zařízení založených na použití teorie podobnosti (zvětšování měřítka).

V práci (Q4⁽¹⁾) je podán model mechanismu pístování založený na aplikaci Druhého Newtonova zákona na proces stlačování zátky tvořené částicemi vrstvy. V modelu jsou uvažovány tři druhy sil: třecí síla vyvozovaná protékajícím plynem na částice zátky, tíha a síla smykového tření mezi pohybujícím se zátkou částic a stěnami reaktoru. Počátek pístování, U_{ms} , je definován jako stav, kdy je ustavena rovnováha mezi třecí silou a silami působícími směrem dolů, tj. tíhou a smykovým třením. V literatuře^{**} byla ukázána rovnost síly smykového tření pro pohybující se zátku pevných částic s tíhou těchto částic. Na základě této rovnosti byla formulována následující rovnice pro výpočet prahu pístování:

^{*} Davidson J. F. and Harrison D.: Fluidized Particle. Cambridge University Press, Cambridge, 1963.

^{**} Ho T. C., N. Yutani, L. T. Fan, W. P. Walawender: The onset of slugging in gas-solid fluidized beds with large particles. Powder Technology **35**, 249 (1986).

$$AH_{ms}\left(-\frac{\Delta P}{L}\right)_{ms} = 2G = 2AL_{mf}\left(-\frac{\Delta P}{L}\right)_{mf}$$
(3.17)

Tlakový spád přes zátku částic byl vyjádřen pomocí Ergunovy rovnice (2.9). Minimální rychlost pístování, U_{ms} , je pak počítána z r. (3.17) pro $\mathcal{E}_{ms} = \mathcal{E}_{mf}$. Vzhledem k tomu, že vypočtené výsledky ukazovaly systematickou odchylku od experimentálních dat byla použita empirická korektura pro hodnotu \mathcal{E}_{ms} . Lze ukázat^{*}, že předpoklad o rovnosti mezerovitosti zátky částic na prahu pístování s mezerovitostí vrstvy na prahu fluidace je špatný vzhledem ke stlačování tvořící se zátky plynovým pístem. Vycházejíce z této myšlenky byl potom v (Q4 Ω) odvozen dynamický model tvorby a rozpadu zátky částic vedoucí k ustavení režimu pístování. Uvažovaný model vychází z představy, že po rozpadu předchozí zátky pevných částic se pohybuje plyn i pevná fáze stejnou rychlostí $U = U_{ms}$. Poté začnou částice pevné fáze zpomalovat a dochází ke tvorbě nové zátky. V okamžiku $t = t_0$ skončí vzestupný pohyb zátky částic díky tíze a síle smykového tření. V tento okamžiku je mezerovitost zátky rovna \mathcal{E}_{mf} a nastává fáze stlačování zátky, jejíž konec je definován nulovou rychlostí pohybu částic zátky:

$$\frac{dx}{dt} = 0 \tag{3.18}$$

V tento okamžik je dosažena rovnováha sil působících na zátku částic, vývoj pístu je dovršen, nastává jeho rozpad a tvorba nového pístu. Současným řešením rovnic (3.17) a (3.18) tedy můžeme vypočíst dvojici (ε_{ms} , U_{ms}). Vypočtené hodnoty U_{ms} byly porovnávány s experimenty a byla nalezena dobrá shoda.

^{*} Punčochář M., Drahoš J., Čermák J.: On the porosity in gas-solid fluidized bed at the onset of slugging. Powder Technol. 51, 183 (1987).

4. Diskuse

Co se týče aplikací fraktální geometrie lze říci, že z experimentů plyne existence třídy porésních materiálů vykazujících v určitém rozpětí měřítek vlastnosti statistické soběpodobnosti. Důsledkem toho je, že charakteristiky jako porosita, difusivita, permeabilita, atd. se mění spolu s měřítkem rozlišení. Invariantem je naopak fraktální dimenze. Důležité je nalézt korektně meze této soběpodobnosti. Průkazné jsou pouze metody přímého měření, odhadnout soběpodobnost však lze i na základě fyzikálních úvah, kdy je zřejmé, že porésní struktura vznikla na základě iteračního procesu. Tyto případy jsou však, žel, velmi řídké. Koncept parciální fraktality, vyložený v druhé kapitole, je jedním z alternativních procesů, vedoucích k iterativnímu vzniku fraktálních struktur. Alternativou je myšlena statistická soběpodobnost, respektive vlastnost multifraktality. Zvažovat je přitom třeba i problematiku prostorového překrývání prefraktálů vznikajících postupnými iteracemi. Čistá matematika* se s tímto problémem při vzniku soběpodobných útvarů vypořádává obecným předpokladem, že se části fraktálu "nepřekrývají příliš". Splnění tohoto předpokladu lze však v realitě kontrolovat s potížemi, a tak přirozeně dojdeme k částečné soběpodobnosti – omezené fraktalitě.

K problému určení funkce tortuosity pro pevné a fluidní lože lze říci, že vyvinutá snaha o aplikaci fraktální geometrie se v tomto případě nesetkala s úspěchem. Pro účely kapilárního modelu se překvapivě dobře osvědčil jednoduchý vztah (2.7).

Idea použití kritéria Q je umožněna výraznou nelinearitou třecí síly v závislosti na mezerovitosti homogenní fluidní vrstvy. Vznik nehomogenity je důsledkem lokální poruchy v systému. Základní myšlenka vychází z prostého faktu, že čím vyšší je hodnota Q, tím nižší porucha mezerovitosti je třeba ke tvorbě bublin a naopak. Důsledkem je snadná tvorba bublin, a tudíž, úměrně tomu, i tendence systému k režimu rovnoměrně bublající vrstvy. Monotónnost funkce $Q(\varepsilon)$ v celém rozsahu její fyzikální použitelnosti, kterou jsme postulovali na základě empirických pozorování, odpovídá klesající tendenci systému k režimu rovnoměrně bublající vrstvy.

Identita křivky spojující minima na $Q - \varepsilon$ grafu, obr. (2.5), pro rovnice Ergunova typu (r. (2.12)) s křivkou $Q - \varepsilon$ pro partikulární model, r. (2.15), dává možnost použít kritérium Q jako nástroje pro analýzu struktury a oblasti platnosti této třídy rovnic pro výpočet tlakové ztráty v sypaných a fluidních vrstvách. Navzdory tomu, že funkce $\varepsilon^{-4.7}$ vyplývající z použitého partikulárního modelu je pouze přibližným vyjádřením obecné funkce mezerovitosti, opatřuje zmíněná identita první semiempirický vztah určující l/s fluidaci jako mezní stav fluidace (nekohezivních) g/s systémů. Tento vztah zároveň poskytuje obecnou, fenomenologickou, metodu určování oblasti použitelnosti rovnic Ergunova typu.

Analýza časových řad stavových veličin je nejobvyklejším a v současné době i nejvhodnějším nástrojem pro studium hydrodynamiky vícefázových systémů. Lineární metody (parametrické i neparametrické) byly použity v celé řadě prací a poskytly vcelku uspokojivý nástroj k analýze dotyčných systémů. Důležité je přitom zdůraznit více méně rutinní charakter aplikace těchto metod – pro délku časových realizací, vzorkovací čas a další vstupní parametry existují teoreticky zdůvodněné algoritmy. Možné chyby jsou většinou důsledkem ignorování odborné literatury, či pochybením v experimentální metodice. Při aplikaci nelineární analýzy je situace značně rozdílná. Statistické vlastnosti odhadů zde značně závisí na použitém algoritmu, délce časové řady, vzorkovací periodě, počtu stupňů

^{*} Falconer K. J.: Fractal Geometry. Mathematical Foundations and Applications. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1990.

volnosti systému, úrovni šumu a dalších faktorech^{*}. Na druhé straně poznání, že vícefázové systémy vykazují nelineární dynamiku vyvolalo odezvu v celé řadě prací snažících se o charakteristiku těchto systémů v rámci teorie chaosu a fraktální geometrie. Teorie chaosu byla u vícefázových systémů s úspěchem použita k objektivnímu rozlišení přechodu mezi hydrodynamickými režimy i k charakterizaci samotných režimů^{**}. S částečným úspěchem se potkaly i snahy o aplikaci chaotické dynamiky, speciálně Kolmogorovovy entropie, na zvětšování měřítka dvoufázového reaktoru⁺. Nicméně, navzdory těmto úspěchům, je třeba si tváří tvář záplavě publikací opírajících se o analýzu chaosu položit otázku, jakou novou informaci přinášejí a tu docházíme k závěru, že tyto práce velice často potvrzují fakta, která mohou být získána mnohem snadněji a spolehlivěji za použití lineární analýzy^{*}.

Modelování bublající fluidní vrstvy tak, jak je podáno v pracích (Q1⁽¹⁾, Q3⁽¹⁾, Q35⁽¹⁾) vychází z analýzy povahy energie disipované ve fluidní vrstvě. Provést analýzu distibuce této energie ve dvoufázovém systému ovšem není snadné⁺⁺ (N1). Obecně vzato je nemožné ztráty třením připsat jednotlivým fázím, a tak se používá integrálních bilancí. V práci (Q35⁽¹⁾) je předpokládána platnost r.(3.12) určující množství energie disipované ve formě tepla za jednotku času působením pohybu bublin ve vrstvě, $\Delta E_{dis}(U_{mf},U)$. Bubliny stoupající emulzní fází odevzdávají svoji potenciální energii formou tření částicím emulzní vrstvy. Tato energie se spotřebovává na překonání odporu proti vzájemnému pohybu mezi částicemi a umožňuje připsat těmto mechanickou energii. V konečném důsledku však končí disipována v teplo vyvinuté ve vrstvě.

Pro výpočet rozdělení energie v bublající vrstvě je klíčová znalost velikosti bublin a rychlosti stoupání jejich shluku. Rovněž ve vztahu (3.16) udávajícím úměru mezi kinetickou energií částic v úplavu bubliny a směrodatnou odchylkou nekoherentní části tlakového signálu by měla být rychlost U_B namísto rychlosti izolované bubliny v neomezeném prostředí dané r. (3.15). Pro výpočet rychlosti stoupání shluku bublin ve fluidní vrstvě se často používá vztahu:

$$U_{B} = U - U_{mf} + U_{B\infty} \tag{4.1}$$

Rovnice (4.1) je však v rozporu s výše podanou interpretací rovnice (3.16), na druhé straně sám tento vztah je postaven na vratkých teoretických i experimentálních základech. Jeho odvození vychází z poměrně sporného předpokladu, že k rychlosti izolované bubliny v neomezeném prostředí, $U_{B\infty}$, je třeba přičíst ještě rychlost částic vrstvy, kterými bublina teče a že tato rychlost je rovna členu $U - U_{mf}$. Přes všechny pochybnosti byla r. (4.1) přes třicet let běžně používána. V současné době jsou však k dispozici nové experimentální výsledky[#], které vyvrací platnost této rovnice a preferují pro výpočet rychlosti stoupání shluku bublin r. (3.15) vynásobenou korekčním faktorem na stěnové efekty, tj. $U_B \approx \sqrt{g D_B}$.

Situace s rovnicí pro výpočet rychlosti stoupání shluku bublin je charakteristická pro celkový stav výzkumu v oblasti dvoufázových systémů. Základní rovnice byly konstituovány

^{*} Drahoš J.: Quo vadis, the analysis of time series in reactor engineering? Trans. IChemE **81**, 411 (2003). ^{**} Van den Bleek C. M., Coppens M-O., Schouten J. C.: Application of chaos analysis to multiphase reactors. Chem. Eng. Sci. 57, 4763 (2002).

Schouten J. C., Vander Stapen M. L. M., Van den Bleek C. M.: Scale-up of chaotic fluidized bed hydrodynamic. Chem. Eng. Sci. 51, 1991 (1996)

Nicklin D. J.: Two-phase bubble flows. Chem. Eng. Sci. 17, 693 (1962).

[#] Müller C. R., J. F. Davidson, J. S. Dennis, P. S. Fennel, L. F. Gladden, A. N. Hayhurst, M. D. Mantle, A. C. Rees, A. J. Sederman: Rise velocities of bubbles and slugs in gas-fluidized beds: Ultra-fast magnetic resonance imaging. Chem. Eng. Sci. 62, 82 (2007).

v uplynulých desetiletích a jejich zevrubnému experimentálnímu ověření stála v cestě nedokonalost měřících metod (speciálně ve třírozměrných zařízeních) a náročnost experimentálních technik. Experimentální vybavení se sice postupně zdokonalovala, avšak nechuť konat experimenty zodpovídající základní teoretické otázky přetrvávala. Badatelské úsilí se spíše soustředilo na rozsáhlé simulační výpočty spojené s použitím CFD modelů. Tyto modely ovšem používají vesměs jako uzávěrové rovnice staré osvědčené korelace typu Richardson-Zaki, Wen a Yu, apod. V současné době se situace začíná obracet a moderní měřící metody umožňují verifikaci mnoha vztahů, jejichž používání dosud spočívalo spíše na inženýrském citu nežli na exaktních důkazech. Lze se nadít, že tento proces vyvolá nový zájem teoretiků o zpracování neřešených fundamentálních problémů teorie dvoufázových systémů.

5. Seznam prací přiložených

- (Q1⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J., Čermák J., Selucký K.: Evaluation of minimum fluidizing velocity in gas fluidized bed from pressure fluctuations. (Eng) Chem. Eng. Commun. 35, 81 (1985).
- (Q3⁽¹⁾) Drahoš J., Punčochář M., Selucký K., Čermák J.: Diagnosis of slugging in fluidized bed. (Eng) Powder Technol. 54, 285 (1988).
- (Q4⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J., Čermák J.: On the mechanism of slugging in gas-solid fluidized beds with large particles. (Eng) Int. J. Eng. Fluid Mech. 1, 245 (1988).
- (Q5⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J., Bradka F., Čermák J.: Characterization of the quality of fluidization in gas-solid fluidized beds. (Eng) Proc. Int. Conf. on Mechanics of Two-phase Flows, Taipei, Taiwan, Pp. 481-485 (1989).
- (Q6⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J., Čermák J.: The limits of applicability of pressure drop correlations. (Eng) Chem. Eng. Sci. 45, 2994 (1990).
- (Q7⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J., Čermák J.: The dependence of fluidization regime upon the bed structure at the onset of fluidization. (Eng) Chem. Eng. Sci. 45, 3, 764-766 (1990).
- (Q9^(Ω)) Drahoš J., Bradka F., Punčochář M.: Fractal behaviour of pressure fluctuations in a bubble column. (Eng) Chem. Eng. Sci. 47, 4069-4075 (1992).
- (Q11)Punčochář M., Drahoš J.: A novel approach in classification of solid particles with respect to the quality of fluidization. (Eng) Chem. Eng. Sci. 47(12), 3137-42 (1992).
- (Q12⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J.: The tortuosity concept in fixed and fluidized bed. (Eng) Chem. Eng. Sci. 48(11), 2173-2175 (1993).
- (Q16^(III)) Drahoš J., Punčochář M., Serio C., Tramutoli V.: Evidence of weak chaos within plug-slug transition in horizontal two-phase flow. (Eng) Europhys. Lett. 30(2), 75-80 (1995).
- (Q17⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J., Slezák J.: Application of partially scaled fractals in the analysis of natural objects. (Eng) Chem. Eng. J. 64(1), 1-5 (1996).
- (Q26⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J.: The Limits of Applicability of Capillary Model for Pressure Drop Correlation. (Eng) Chem. Eng. Sci. 55(18), 3951-3954 (2000).
- (Q33⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J.: Entropy of Fluidized Bed a Measure of Particles Mixing. (Eng) Chem. Eng. Sci. 58(12), 2515-2518 (2003).
- (Q35⁽¹⁾) Punčochář M., Drahoš J.: Origin of Pressure Fluctuations in Fluidized Beds. (Eng) Chem. Eng. Sci. 60(5), 1193-1197 (2005).

Summary

The thesis is composed of two studies, which are interested in the modeling of fluidized bed. The studies are in substance glossed sets of my papers dealing with these problems.

The first study starts with the investigation of time evolution of fractal objects. A mechanism of iterative development is suggested based on partial scaling of the initiatorgenerator fractals. An example is given from the modeling of catalytic gas-solid reactions (Q17 Ω). Further, a new concept was suggested for the tortuosity of beds of particles based on the parallel-capillary model. The resulting relation between the tortuosity and bed voidage is applicable over a wide range of conditions (from fixed to highly expanded bed Q12 Ω).

The most comprehensive part of the first study gives an alternative approach for the evaluation of "fluidization quality" ($Q5\Omega - Q7\Omega$, $Q11\Omega$ and $Q26\Omega$). A new, phenomenological, procedure was developed which makes it possible to determine the limits of applicability of capillary model for pressure drop correlation. A domain was found which seems to be disallowed for any correlation based on capillary model, and in which the use of particulate model is recommendable.

The second study represents a contribution to the analysis of state variables fluctuations in two-phase reactors. Especially, it deals with the analysis of pressure fluctuations which represent the easiest measurable quantity from the practical point of view. The majority of papers are interested in analysis of g/s systems in the regime of bubbling fluidized bed or slugging bed.

An exception was made in the papers ($Q9\square$ and $Q16\square$), which deal with analysis of g/l systems. A fractal approach was adopted in ($Q9\square$) to describe the behavior of the pressure fluctuations in a bubble column. The values of so-called Hurst exponent computed from rescaled range analysis were used to distinguish between the basic hydrodynamic regimes. Intermittent behavior was observed in gas-liquid flows in a horizontal pipe and a weak sign of deterministic chaos was diagnosed within a transition from plug to slug flow. The analysis was performed which exploits the concept of short-term predictability of chaotic motion ($Q16\square$).

The modeling of bubbling fluidized bed is the topic of papers $(Q1\square)$, $(Q33\square)$ and $(Q35\square)$. A new experimental method for the evaluation of minimum fluidizing velocity in gas fluidized beds was proposed $(Q1\square)$, based on the pressure fluctuation measurements. The minimum fluidizing velocity is determined solely from the measurements in the fluidized bed regime, unlike the traditional method, where the experiments in the fixed bed regime are also necessary. The relation for minimum fluidizing velocity was theoretically interpreted on the basis of liquid-like properties of fluidized systems. The concept is further developed in the paper (Q33 \square) where an attempt to define the physical entropy of the dense phase of fluidized bed was made. The following work, (Q35 \square), presents a novel approach in interpreting the standard deviation of pressure fluctuations in a fluidized bed with respect to the spectral analysis. Based on several realistic assumptions for a freely bubbling bed, the physical model was proposed for the standard deviation of incoherent part of pressure fluctuations. Using the concept of energy dissipated in a fluidized bed, the plausible explanation of linear dependence of standard deviation calculated from the total pressure signal on the excess gas velocity was given and verified experimentally.

The last presented papers (Q3 \square and Q4 \square) deal with the phenomenon of slugging in fluidized beds. A new dynamic model describing the mechanism of slugging in gas-solid fluidized bed of large particles was proposed in (Q4 \square) whereas the work (Q3 \square) solves the

problem of objective diagnostics of slugging in fluidized beds. The order of autoregressive (AR) model was used as a descriptor for on line regime diagnosis.

Keywords

Fluidized bed, fractal geometry, pressure fluctuations, pressure drop correlation.