



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

«Παραγωγή και Διαχείριση Ενέργειας»

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

***«ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΞΕΛΙΓΜΕΝΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ
ΟΠΙΣΘΕΛΚΟΥΣΑΣ-EMMS ΓΙΑ ΤΗΝ
ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΡΕΥΣΤΟΠΟΙΗΜΕΝΩΝ
ΚΛΙΝΩΝ ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ
ΔΙΚΤΥΟΥ»***

Του Μεταπτυχιακού Φοιτητή

Χρηστάκη Σάμλη

Επιβλέπων

Σωτήριος Καρέλλας, Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων
Μηχανικών ΕΜΠ

Περιεχόμενα

Σύνοψη.....	3
Περίληψη	4
Abstract.....	6
Summary.....	7
1 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ	11
1.1 Ρευστοποιημένες κλίνες καύσης (FCB)	12
1.2 Δέσμευση CO ₂ με Calcium Looping	13
1.3 Μοντελοποίηση ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας	14
2 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2 ΜΕΓΕΘΗ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΡΕΥΣΤΟΠΟΙΗΣΗ.....	17
2.1 Μέση διάμετρος σωματιδίων	17
2.2 Κλάσμα κενού (voidage).....	17
2.3 Κλάσμα κενού έναρξης ρευστοποίησης.....	18
2.4 Φαινόμενη ταχύτητα.....	18
2.5 Ταχύτητα έναρξης ρευστοποίησης.....	18
2.6 Οριακή ταχύτητα (terminal velocity)	20
2.7 Οπισθέλκουσα δύναμη	21
2.8 Κατηγοριοποίηση σωματιδίων	22
2.9 Πρότυπα ρευστοποίησης.....	24
3 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 ΜΟΝΤΕΛΟ EMMS	27
3.1 Περιγραφή μοντέλου EMMS	27
3.2 Εξισώσεις μοντέλου EMMS.....	29
3.3 Εφαρμογή μοντέλου EMMS με χρήση κώδικα Fortran	33
4 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4 ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ.....	36
4.1 Περιγραφή τεχνητών νευρωνικών δικτύων.....	36
4.1.1 Νευρώνας δικτύου.....	37
4.2 Εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου	40
4.2.1 Εκπαίδευση χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning).....	41
4.2.2 Εκπαίδευση με βαθμολόγηση ή ενίσχυση (graded or reinforcement learning).....	41
4.2.3 Εκπαίδευση με επίβλεψη (supervised learning)	41
4.3 Αλγόριθμοι εκπαίδευσης τεχνητού νευρωνικού δικτύου	42
4.3.1 Μονοδιάστατη βελτιστοποίηση.....	43
4.3.2 Πολύ-επίπεδη βελτιστοποίηση	43
4.3.3 Μέθοδος Gradient descent	44
4.3.4 Η μέθοδος Newton	44

4.3.5	Conjugate gradient	45
4.3.6	Μέθοδος Quasi-Newton	46
4.3.7	Levenberg-Marquardt algorithm	46
4.4	Σύγκριση μεθόδων ως προς την ταχύτητα και την απαιτούμενη μνήμη	47
5	ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΣΥΝΔΥΑΣΜΕΝΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ANN-EMMS	49
5.1	Μεθοδολογία	49
5.2	Επαλήθευση γενικής ιδέας	50
5.2.1	Υπολογισμός οριακής τιμής του κλάσματος κενού, <i>eg, lim</i>	53
5.2.2	Παρεμβολή σημείων και πύκνωση δεδομένων εκπαίδευσης	53
5.2.3	Εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου	56
5.3	Αποτελέσματα εκπαίδευσης	58
5.3.1	Πυκνή φάση Περιοχή 1	58
5.3.2	Πυκνή φάση Περιοχή 2	59
5.3.3	Πυκνή φάση Περιοχή 3	61
5.3.4	Αραιή φάση	62
5.4	Αξιολόγηση δικτύου μέσω CFD	64
6	ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 ΓΕΝΙΚΕΥΣΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ	67
6.1	Δεδομένα εκπαίδευσης.....	67
6.2	Ανάπτυξη μοντέλου προσδιορισμού της οριακής τιμής του κλάσματος κενού	71
6.3	Εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου	73
6.4	Αποτελέσματα εκπαίδευσης	74
6.4.1	Πυκνή φάση Περιοχή 1	74
6.4.2	Πυκνή φάση Περιοχή 2	76
6.4.3	Αραιή φάση	77
6.5	Ανάλυση CFD	81
7	ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	84
	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	86

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ:

**«ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΞΕΛΙΓΜΕΝΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ
ΟΠΙΣΘΕΛΚΟΥΣΑΣ-EMMS ΓΙΑ ΤΗΝ
ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΡΕΥΣΤΟΠΟΙΗΜΕΝΩΝ ΚΛΙΝΩΝ
ΜΕ ΤΗ ΧΡΗΣΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ»**

ΦΟΙΤΗΤΗΣ:

Χρηστάκης Σάμλης

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:

**Σωτήριος Καρέλλας, Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων
Μηχανικών (ΕΜΠ)**

ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΟ ΕΤΟΣ:

2018-19

Σύνοψη

Όσο οι εφαρμογές ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας τείνουν να αυξάνονται, η ανάγκη ανάπτυξης μεθόδων μοντελοποίησης με κώδικες υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD) γίνεται ολοένα και πιο επιτακτική. Οι κλασικές μέθοδοι συχνά οδηγούν σε υπερεκτιμήσεις της οπισθέλκουσας δύναμης που ασκείται στα σωματίδια της κλίνης ενώ αδυνατούν να μοντελοποιήσουν με ακρίβεια την συναλλαγή ενέργειας μεταξύ των φάσεων εντός της κλίνης. Τις αδυναμίες αυτές παρακάμπτει το μοντέλο Energy Minimization Multi-Scale analysis –EMMS. Η προσέγγιση αυτή βασίζεται στην θεώρηση ότι τα στερεά σωματίδια της κλίνης συσσωματώνονται σε ενιαίες δομές σχηματίζοντας συμπλέγματα σωματιδίων (clusters) ως αποτέλεσμα της τάσης τους να ελαχιστοποιήσουν την ανά μονάδα μάζας συναλλαγή ενέργειας με το ρευστό. Το μοντέλο EMMS αποτελείται από ένα σύστημα εξισώσεων το οποίο επιλύεται με επαναληπτικές διαδικασίες ως μη γραμμικό πρόβλημα ελαχιστοποίησης δευτέρου βαθμού. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την επίλυση (συντελεστής ετερογένειας) παρεμβάλλονται με κατάλληλα πολυώνυμα τα οποία στην συνέχεια εισάγονται στον κώδικα CFD. Στην παρούσα εργασία, αντί παρεμβολής των συντελεστών ετερογένειας με πολυώνυμα, αυτοί χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου που προβλέπει για διάφορες περιπτώσεις λειτουργίας τους συντελεστές ετερογένειας. Το νευρωνικό δίκτυο χρησιμοποιήθηκε για την μοντελοποίηση υπάρχουσας πιλοτικής μονάδας ενανθράκωσης ($D=0.59\text{m}$). Τα αποτελέσματα της μοντελοποίησης συγκρίθηκαν τόσο με τα αποτελέσματα της κλασικής μεθόδου Gidasrow, όσο και με τα αποτελέσματα του EMMS με χρήση των παρεμβαλλόμενων πολυωνύμων και με διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις. Η παραπάνω εφαρμογή οδήγησε σε εμφανώς αυξημένη ακρίβεια του μοντέλου σε σύγκριση με το μοντέλο Gidasrow ως προς την πτώση πίεσης εντός της κλίνης και του ρυθμού ανακυκλοφορίας, αλλά και σε ικανοποιητική ταύτιση των αποτελεσμάτων με τα αποτελέσματα της κλασικής εφαρμογής του EMMS. Καταλήγοντας, συμπεραίνεται ότι η χρήση νευρωνικού δικτύου δύναται να εφαρμοστεί θεωρώντας διαφορετικές συνθήκες λειτουργίας σε κάθε όγκο ελέγχου ξεχωριστά ενώ παράλληλα αποφεύγεται η χρονοβόρα διαδικασία επίλυσης των εξισώσεων του EMMS για κάθε περίπτωση λειτουργίας.

Περίληψη

Οι εφαρμογές ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας (CFB) παρουσιάζουν σε παγκόσμιο επίπεδο αυξητική τάση. Τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά των ρευστοποιημένων κλινών καθιστούν την συγκεκριμένη τεχνολογία ελκυστική για αρκετές περιπτώσεις βιομηχανικών εφαρμογών μεταξύ των οποίων και τομείς καίριας σημασίας όπως αυτός της παραγωγής ηλεκτρικής ενέργειας και της δέσμευσης διοξειδίου του άνθρακα. Στον τομέα παραγωγής ηλεκτρικής ενέργειας η εφαρμογή ρευστοποιημένων κλινών καύσης (FBC) παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα σε σύγκριση με ανταγωνιστικές τεχνολογίες τόσο ως προς την αποδοτικότητα της καύσης όσο και ως προς την ευελιξία στην επιλογή καυσίμου, αφού στις μονάδες ρευστοποιημένων κλινών καύσης δύναται να χρησιμοποιηθούν τόσο συμβατικά καύσιμα όσο και πιο δύσχρηστα όπως βιομάζα και απορρίμματα. Στον τομέα της δέσμευσης διοξειδίου του άνθρακα κυριότερη εφαρμογή για την χρησιμοποίηση ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας είναι η τεχνολογία του κύκλου του ασβεστίου ή αλλιώς calcium looping με σημαντικά περιβαλλοντικά αλλά και οικονομικά πλεονεκτήματα. Την τεχνολογία αυτή εφαρμόζει και η πιλοτική μονάδα ρευστοποιημένης κλίνης ενανθράκωσης ($D=0.59$ m) του πανεπιστήμιου TUDA (Technical University of Darmstadt) που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων.

Με την διεύρυνση των εφαρμογών των ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας σε ολοένα και περισσότερους τομείς, νέες προκλήσεις ανακύπτουν σε θέματα όπως η προσομοίωση της λειτουργίας των συστημάτων αυτών με σκοπό τον σχεδιασμό πιο αποδοτικών μονάδων. Παράλληλα λοιπόν με την τεχνική εμπειρία, είναι αναγκαία για την βελτιστοποίηση του σχεδιασμού τέτοιων μονάδων, και η ανάπτυξη και εφαρμογή μοντέλων υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (CFD) ώστε να μελετηθούν οι πολύπλοκοι μηχανισμοί που διέπουν την υδροδυναμική συμπεριφορά της κλίνης. Παρόλα αυτά η εφαρμογή των μοντέλων αυτών παρουσιάζει διάφορες αδυναμίες τόσο ως προς το απαιτούμενο υπολογιστικό κόστος όσο και ως προς την ακρίβεια των αποτελεσμάτων την μοντελοποίησης της συναλλαγής ορμής μεταξύ των φάσεων της κλίνης. Στις συμβατικές μεθόδους μοντελοποίησης, όπως η μέθοδος Gidaspow, οι παραπάνω αδυναμίες είναι συνυφασμένες καθώς για την επίτευξη ικανοποιητικής ακρίβειας του μοντέλου απαιτείται πολύ μεγάλης πυκνότητας πλέγμα το οποίο συνεπάγεται απαγορευτικό υπολογιστικό κόστος για τα σημερινά δεδομένα των υπολογιστών.

Ένας αποτελεσματικός τρόπος ώστε να παρακαμφθεί το πρόβλημα αυτό είναι η βελτίωση της ακρίβειας στον υπολογισμό της συναλλαγής ορμής χωρίς την προσφυγή σε πυκνότερο πλέγμα. Ένα αραιό πλέγμα είναι ανεπαρκές διότι δεν επιτυγχάνει τη μοντελοποίηση δομών μεγέθους μικρότερου από τις διαστάσεις του υπολογιστικού κελιού. Πειραματικές όσο και αναλυτικές έρευνες έχουν δείξει ότι κατά τη λειτουργία μιας ρευστοποιημένης κλίνης, τα σωματίδια αναπτύσσουν την τάση να ενώνονται και να συσσωματώνονται σχηματίζοντας δομές που ονομάζονται συμπλέγματα σωματιδίων (clusters). Οι συμβατικοί τρόποι προσέγγισης της οπισθέλκουσας δύναμης που ασκεί ο αέρας στα σωματίδια υποθέτουν ομοιόμορφες συνθήκες εντός του υπολογιστικού κελιού, συνεπώς αυτοί είναι αδύνατον να «αντιληφθούν» δομές μικρότερες από το μέγεθος του πλέγματος. Για αυτό το λόγο υιοθετείται η πολυδιαστατική ανάλυση της ελαχιστοποίησης ενέργειας (Energy Minimization Multi-Scale analysis - EMMS) με σκοπό το συνδυασμό αυτής με τεχνικές υπολογιστικής ρευστοδυναμικής ώστε να αντιμετωπιστεί αυτή η αδυναμία. Το μοντέλο EMMS ορίζει, για δεδομένη ταχύτητα αέρα (u_g), σωματιδίων (u_s) και περιεκτικότητα σε σωματίδια (ϵ_g) ενός όγκου ελέγχου, ένα μη γραμμικό σύστημα αναλυτικών ή/και εμπειρικών εξισώσεων και περιορισμών. Αυτό το σύστημα εξισώσεων επιλύεται υπό τον περιορισμό της ελαχιστοποίησης μιας συνάρτησης που εκφράζει τη συναλλασσόμενη ενέργεια μεταξύ αέρα και σωματιδίων. Οι περιοχές όπου τα σωματίδια παρουσιάζουν μεγάλη κατ' όγκο περιεκτικότητα σε σωματίδια ορίζονται ως πυκνή φάση (dense phase). Αντίθετα, η περιοχή όπου τα σωματίδια είναι αραιά διατεταγμένα καλείται αραιή φάση (dilute phase). Το μοντέλο EMMS αποτελείται από ένα σύστημα εξισώσεων το οποίο επιλύεται με επαναληπτικές μεθόδους για κάθε συνδυασμό τιμών της ταχύτητας ολίσθησης u_{slip} και του κλάσματος κενού ϵ_g , για κάθε περίπτωση λειτουργίας μιας κλίνης, όπως αυτή ορίζεται από τους συνδυασμούς των τιμών της διαμέτρου των σωματιδίων (d_p), της πυκνότητας των σωματιδίων (ρ_s), της πυκνότητας του αερίου (ρ_g), του ιξώδους του αερίου (μ_g) και της διαμέτρου του αντιδραστήρα (d_h). Τα αποτελέσματα του μοντέλου EMMS συνοψίζονται κυρίως στη μεταβλητή που ορίζεται ως συντελεστής ετερογένειας H_d , ο οποίος ποσοτικοποιεί την ετερογένεια που προκαλείται από την αλληλεπίδραση του αέρα με τα σωματίδια. Κατά τον συμβατικό τρόπο εφαρμογής του μοντέλου EMMS, οι συντελεστές ετερογένειας που προκύπτουν παρεμβάλλονται σε κατάλληλα πολυώνυμα τα οποία στη συνέχεια εισάγονται στον κώδικα CFD ως συναρτήσεις των μεταβλητών u_{slip} και ϵ_g .

Στην παρούσα εργασία, οι συντελεστές ετερογένειας που προέκυψαν από την επίλυση των εξισώσεων του EMMS χρησιμοποιήθηκαν για την ανάπτυξη και την εκπαίδευση τεχνητού νευρωνικού δικτύου με σκοπό την χρήση του για την πρόβλεψη των συντελεστών ετερογένειας διαφόρων συνθηκών λειτουργίας της κλίνης και συνδυασμών της ταχύτητας ολίσθησης και του κλάσματος κενού. Σε πρώτο στάδιο και προκειμένου να επαληθευτεί η εφαρμοζόμενη μεθοδολογία

ανάπτυξης και εισαγωγής του νευρωνικού δικτύου στο μοντέλο CFD, εκπαιδεύτηκε νευρωνικό δίκτυο για μία περίπτωση λειτουργίας κλίνης και ως προς τις δύο βασικές μεταβλητές της ταχύτητας ολίσθησης και του κλάσματος κενού. Οι τιμές των συντελεστών ετερογένειας για ένα σύνολο 31208 όγκων ελέγχου, που το δίκτυο αυτό προέβλεψε αξιολογήθηκαν συγκρινόμενοι με τις αντίστοιχες τιμές που προέκυψαν από την εφαρμογή των παρεμβαλλόμενων πολυωνύμων για την συγκεκριμένη περίπτωση λειτουργίας. Η απόκλιση μεταξύ των δύο ήταν ιδιαίτερα ικανοποιητική με απόλυτη τιμή του μέσου σφάλματος να είναι 1,34 και το μέσο απόλυτο ποσοστιαίο σφάλμα 35,98% γεγονός που οφείλεται κυρίως σε τιμές των συντελεστών ετερογένειας στο εύρος [0,1].

Αφού επαληθεύτηκε η μεθοδολογία εφαρμογής του EMMS με χρήση νευρωνικού δικτύου, στη συνέχεια οι εξισώσεις του μοντέλου EMMS επιλύθηκαν για συνολικά 22 διαφορετικές περιπτώσεις λειτουργίας κλινών ενώ τα δεδομένα που προέκυψαν χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση νέου γενικευμένου νευρωνικού δικτύου το οποίο προβλέπει τους συντελεστές ετερογένειας συναρτήσει και των μεταβλητών λειτουργίας της κλίνης (u_{slip} , ϵ_g , ρ_g , ρ_s , μ_g , d_p , d_h). Κατά την διαδικασία αυτή προέκυψε δε και μία ιδιαίτερα χρήσιμη, για την διαδικασία σχεδιασμού νέων κλινών, χαρτογράφηση της ομογενούς και ετερογενούς περιοχής μίας κλίνης συνάρτηση των αδιάστατων τιμών της ταχύτητας και της διαμέτρου των σωματιδίων. Το γενικευμένο νευρωνικό δίκτυο χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της κλίνης του TUDA με τη συμβατική μέθοδο Euler - Euler, ενώ για την αξιολόγησή του συγκρίθηκαν τα αποτελέσματα πτώσης πίεσης εντός της κλίνης και του ρυθμού ροής μάζας, με τα αντίστοιχα του μοντέλου Gidasrow, του EMMS με χρήση παρεμβαλλόμενων πολυωνύμων και των διαθέσιμων πειραματικών τιμών. Συγκρίνοντας τις τιμές της μεταβολής της πίεσης ως προς την μεταβολή του ύψους της κλίνης για τις δύο μεθόδους εφαρμογής του EMMS η μέση τιμή του σφάλματος προέκυψε να είναι 11,29% ενώ το 75% των τιμών παρουσίασε σφάλμα <15%. Αντίστοιχα κατά την σύγκριση των τιμών του ρυθμού ροής μάζας, οι τιμές που προέκυψαν από το μοντέλο του νευρωνικού δικτύου παρουσίαζαν μέση τιμή 2,21 kg/s με τυπική απόκλιση 0,63 ενώ για τις τιμές που προέκυψαν από το μοντέλο των πολυωνύμων παρεμβολής η μέση τιμή ήταν 2,61 kg/s και η τυπική απόκλιση 0,93.

Καταλήγοντας, κατά την παραπάνω εφαρμογή του μοντέλου EMMS με χρήση νευρωνικού δικτύου αναδείχθηκαν δύο βασικά πλεονεκτήματα σε σύγκριση με την κλασική εφαρμογή του μοντέλου με παρεμβαλλόμενα πολυώνυμα. Με την εφαρμογή του συνδυασμένου με νευρωνικό δίκτυο μοντέλου, αποφεύγεται η διαδικασία υπολογισμού των παρεμβαλλόμενων πολυωνύμων για κάθε περίπτωση λειτουργίας ξεχωριστά. Η διαδικασία αυτή είναι ιδιαίτερα χρονοβόρα ενώ παράλληλα αποτελεί και εμπόδιο στην ευρύτερη εμπορική εκμετάλλευση του μοντέλου EMMS. Το βασικότερο όμως πλεονέκτημα του νέο αυτού μοντέλου είναι η δυνατότητα να λαμβάνει υπόψιν την μεταβλητότητα των συνθηκών λειτουργίας και των χαρακτηριστικών της ροής της κλίνης, για κάθε όγκο ελέγχου ξεχωριστά. Η δυνατότητα αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη σε περιπτώσεις κλινών καύσης και αντιδράσεων όπου ορισμένες μεταβλητές εισόδου του μοντέλου, όπως η διάμετρος των σωματιδίων, η πυκνότητα του αερίου και η πυκνότητα των σωματιδίων, μεταβάλλονται σε ορισμένες περιοχές της κλίνης. Με βάση τα παραπάνω, η περαιτέρω εξέλιξη του μοντέλου αυτού χαρακτηρίζεται ως ιδιαίτερα ελκυστική ενώ παράλληλα συνεισφέρει στην γενικότερη προσπάθεια βελτίωσης των προσομοιώσεων ροών, μία ανάγκη διαρκώς εντεινόμενη στην σημερινή πραγματικότητα.

POST-GRADUATE THESIS: **«DEVELOPMENT OF AN ADVANCED DRAG-EMMS MODEL FOR FLUIDIZED BED SIMULATION USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS»**

STUDENT: **Christos Samlis**

SUPERVISOR: **Sotirios Karellas, Prof, Mechanical Engineering Department, NTUA**

ACADEMIC YEAR: **2018-19**

Abstract

As industrial applications of Circulating Fluidized Beds (CFBs) tend to scale up, the need to develop new CFD models is becoming more and more imperative. Conventional modeling methods usually overestimate the drag force applied on the bed's solid particles and at the same time face many difficulties regarding the proper modeling of the drag exerted on the particles by the fluidizing gas. This difficulty can be handled by the implementation of EMMS theory, based on the hypothesis that, inside a computational cell, particles have the tendency to minimize the energy interchange between solid and gas. This tendency leads to the formation of clusters, solid structures forming by the aggregation and clogging of particles. The EMMS theory is developed as a mathematical second order non-linear minimization problem. The results of this problem (heterogeneity index) for a specific unit, are typically interpolated and implemented in a 3-D CFD code. In this study, instead of interpolating the heterogeneity index, the results of the EMMS model for 22 cases, are used in order to train an artificial neural network (ANN). The ANN-EMMS was successfully trained and integrated in a commercial CFD platform to simulate a pilot CFB carbonator ($D=0.59$ m). The modeling results were compared with the results of the conventional Gidaspow model, the conventional EMMS model and the available experimental measurements. The above implementation increased the models accuracy regarding the pressure drop and the mass flowrate results compares the Gidaspow approach, while they match pretty well with the conventional EMMS approach. Overall, it was concluded that by using the EMMS-ANN different operating conditions can be considered for each control volume and therefore generalize the applicability of this model, while at the same time the computational demanding procedure of re-solving EMMS equations for every unit is avoided.

Summary

The latest years, industrial applications of Circulating Fluidized Beds (CFB) tend to scale up. The special characteristics of fluidized beds have made this technology very attractive for industrial applications of great importance such as power generation and carbon capture. In the power generation sector, fluidized bed combustion implementation yields important benefits regarding the combustion efficiency and the fuel flexibility, since Fluidized Bed Combustors (FBCs) are compatible with conventional fuels and other more cumbersome fuels such as biomass and waste. In the carbon capture sector, CFBs are used in the calcium looping technology with great environmental and financial benefits. This technology is also demonstrated in the pilot unit of 1MWth capacity of TUDA (Technical University of Darmstadt) which operating parameters and other experimental measurements are used in this study in order to evaluate the results.

By extending the CFBs application region in more and more sectors, new challenges arise regarding system modeling and simulation which are essential for designing more efficient unit. Along with experience, reliable CFD models are essential for the optimization of large scale units' design, as they can thoroughly address complicated issues such as the effective mixing in the unit. However, the basic problems in efficient CFD simulation of such large scale installations are computational cost and accurate modeling of the momentum exchange. In fact, these two drawbacks are inter-correlated since the error in calculating the momentum exchange with conventional drag models, such as Gidaspow's equation, is proportional to the equivalent size of the computational cell. The latter size strongly affects computational cost as well. Such computational grids are prohibitive in terms of today's computers capabilities.

An efficient way to confront this difficulty is to increase the accuracy of momentum exchange coefficient calculations under coarse grid conditions. In fact, inaccuracy of coarse grid calculation reflects the impotence of proper modeling of structures with dimensions smaller than the control volume. Experimental work and numerical analysis have shown that, under CFB conditions, particles tend to clog, aggregate and finally form larger structures called clusters. Since conventional drag models assume homogeneous conditions in each computing cell, they are impotent to effectively model structures of such small size (smaller than grid size). Thus, the EMMS (Energy Minimization Multi-Scale analysis) methodology is developed, to be coupled with CFD techniques in order to address this drawback. The model comprises of, a specific set of u_g (gas velocity in a control volume), u_s (particle velocity in a control volume), and ε_g (voidage of a control volume), a non-linear set of semi-empirical, empirical and analytical equations and physical constraints. This set can then be solved through the minimization of an objective function reflecting the energy interchange between gas and solid particles inside a control volume. Regions of the bed in which particles have elevated percentage of volume fraction form the dense phase of the cell. On the other hand, all particles that are rather dispersed and spread evenly and sparsely form the dilute phase. The non linear optimization mathematical problem defining EMMS scheme is solved, for any combination of u_{slip} and ε_g , and for operational conditions of the unit selected for modeling defined by parameter particle diameter (d_p), particle density (ρ_s), gas density (ρ_g), gas viscosity (μ_g) and reactors' diameter (d_h). EMMS results can be summarized in a variable defined as heterogeneity index (H_d) which quantifies heterogeneity caused by the interaction between gas and solid particles. According to the conventional EMMS implementation method, heterogeneity indexes are being interpolated and then implemented in the CFD code as functions of slip velocity and voidage inside the control volume.

In this study, instead of interpolating the heterogeneity index the results of the EMMS model are used to train an artificial neural network (ANN) which predicts the heterogeneity index for any operating parameter and combination of slip velocity and voidage. This generalization allows for a straightforward application of this high-sophistication model, without severe simplifications. This methodology is for the first time proposed and investigated. At first, in order to proof the concepts' idea, a simple ANN was trained for one operating case which predicts the heterogeneity index given the slip velocity and the voidage. The predicted heterogeneity index for a grid with 31208 control volumes were then evaluated against the standard EMMS results for this case. ANN results fitted pretty well the EMMS ones with the average absolute error being 1.34 and the mean absolute percentage error 35.98% which is mainly caused by values of heterogeneity indexes within the range [0,1].

Once the EMMS-ANN methodology was tested, the EMMS scheme was solved for 22 different operating conditions and the results were used in order to train a new more generalized neural network which will predict the heterogeneity index as a function of all the operating conditions of the bed (u_{slip} , ε_g , ρ_g , ρ_s , μ_g , d_p , d_h). During this procedure a very useful, for design optimization, mapping of the homogenous and heterogeneous regions as a function of dimensionless particle diameter and velocity, was developed. The new ANN was then integrated in a CFD model that simulates a TUDA CFB carbonator adopting the well-known Euler-Euler approach, while the pressure drop and the mass flow rate results were evaluated against the Gidaspow, the conventional EMMS results and the available experimental measurements. Comparing the pressure differences throughout the bed height for the conventional EMMS and the EMMS-ANN model,

the mean average percentage error was 11.29% with 75% of the values being in the region of <15% error. In addition, comparing the values of the mass flow rate, the mean value for the EMMS-ANN model was 2.21 kg/s with standard deviation 0.63 while for the conventional EMMS model it was 2.61 kg/s with standard deviation 0.93.

Concluding, through the above implementation of the EMMS-ANN model, two basic advantages, against the conventional EMMS model are evident. By implying the EMMS-ANN model, the procedure of generating and interpolating the heterogeneity index for each operating case, is avoided. This procedure is time consuming, computationally demanding and also an obstacle in the commercialization of the model. However, the most important advantage of the EMMS-ANN model is its ability to keep pace with the beds' operating condition volatility for each control volume respectively. This characteristic is essential in FBCs and reacting flow beds where some model parameters such as the particle diameter, the gas density or particle density may vary in some regions of the bed. Overall, further development of the EMMS-ANN model is an attractive option that will contribute to the general optimization of flow simulations, which are greatly needed nowadays.

“It is not the strongest of the species that survive nor the most intelligent, but the one most responsive to change”

-Charles Darwin

Ευχαριστίες:

Ευχαριστώ θερμά τον Δρ. Αριστείδη Νικολόπουλο για την πολύτιμη βοήθεια και υποστήριξη που μου προσέφερε τόσο σε επαγγελματικό επίπεδο όσο και στο πλαίσιο της εκπόνησης της παρούσας διπλωματικής εργασίας.

1 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Στις 16 Δεκεμβρίου του 1921, στην Γερμανία, Ο χημικός Fritz Winkler εισήγαγε αέρια προϊόντα καύσης στον πυθμένα ενός χωνευτηρίου το οποίο περιείχε σωματίδια οπτάνθρακα (κωκ). Το γεγονός αυτό σηματοδότησε την αρχή ενός ιδιαίτερα σημαντικού κεφαλαίου των νεότερων τεχνολογιών. Ο Winkler παρατήρησε τα σωματίδια να ανυψώνονται υπό την επίδραση της οπισθέλκουσας από τα αέρια δύναμης, ενώ παράλληλα η συνολική μάζα των σωματιδίων έμοιαζε με υγρό σε κατάσταση βρασμού. Το απλό αυτό πείραμα εισήγαγε μία νέα διαδικασία που ονομάζεται ρευστοποίηση [1]. Ως ρευστοποίηση ορίζεται η διαδικασία κατά την οποία ένα στρώμα ακίνητων στερεών σωματιδίων εξαναγκάζεται να συμπεριφερθεί ως ψευδοπλαστικό ρευστό υπό την επενέργεια ενός ανερχόμενου ρεύματος ρευστού (αέρα ή υγρού). Το στρώμα των αιωρούμενων σωματιδίων που προκύπτει καλείται ρευστοποιημένη κλίνη [2]. Ενώ υπάρχουν αναφορές για αρκετούς οι οποίοι παρατήρησαν το φαινόμενο αυτό πριν τον Winkler, παρόλα αυτά τα εύσημα της εφεύρεσης της ρευστοποιημένης κλίνης ανήκουν στον ίδιο ο οποίος όχι μόνο παρατήρησε το φαινόμενο αλλά πήρε επίσης αρκετές μετρήσεις, κατοχύρωσε την πατέντα ευρεσιτεχνίας ενώ παράλληλα κατασκεύασε εμπορικές μονάδες ρευστοποιημένων κλινών μεγάλης κλίμακας (12 m κάθετης τομής) η πρώτη εκ των οποίων τέθηκε σε λειτουργία το 1926. Την δεκαετία του '50 η τεχνολογία της καύσης σε ρευστοποιημένη κλίνη εφαρμόζεται από την BASF σε διαδικασία για την φρύξη μεταλλευμάτων ενώ στα τέλη της ίδιας δεκαετίας η Chemie und Huttentechnik κατασκευάζει τον πρώτο βιομηχανικό καυστήρα ρευστοποιημένης κλίνης 6 MWe για την παραγωγή τσιμέντου μέσω της καύσης στην κλίνη σχιστολιθικού πετρελαίου. Την δεκαετία του '60 ο Douglas Elliott από το Central Generation Board Laboratory του Marchwood/Southampton ξεκινάει την προώθηση της ιδέας της καύσης άνθρακα εντός ρευστοποιημένης κλίνης στο Ηνωμένο Βασίλειο. Η αρχική ιδέα ήταν εφαρμογή της τεχνολογίας για την ανάκτηση θερμικής ενέργειας από τα, υψηλά σε άνθρακα υπολείμματα στάχτης από την καύση ανθρακίτη σε σταθμούς παραγωγής ηλεκτρικής ενέργειας, ενώ αργότερα η ιδέα αυτή επεκτάθηκε στην εφαρμογή της καύσης του άνθρακα σε ρευστοποιημένες κλίνες για την παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας. Ο Elliott παρουσίασε την πρόταση του στην British Coal Utilization Research Association και το National Coal Board του Ηνωμένου Βασιλείου και σε σύντομο χρονικό διάστημα ξεκίνησε ένα νέο πρόγραμμα για την ανάπτυξη της συγκεκριμένης εφαρμογής. Την ίδια περίοδο αναπτύσσεται μία νέα μέθοδος ασβεστοποίησης του αργιλίου, ενώ για πρώτη φορά εγγέεται πετρέλαιο απευθείας σε ρευστοποιημένη κλίνη ανακυκλοφορίας στους 1100°C. Η πρώτη εμπορική μονάδα μεγέθους 500 τόνων την ημέρα αναπτύχθηκε το 1970 [3].

Οι αντιδραστήρες ρευστοποιημένης κλίνης ανακυκλοφορίας εμφανίζονται για πρώτη φορά στην αγορά στις αρχές της δεκαετίας του '70 και χρησιμοποιούνται κυρίως στην ασβεστοποίηση του αργιλίου ενώ στα τέλη της ίδιας δεκαετίας επεκτάθηκαν στον τομέα των καυστήρων με ιδιαίτερα περιβαλλοντικά οφέλη [4].

Τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά των ρευστοποιημένων κλινών καθιστούν την τεχνολογία αυτή ιδιαίτερα ελκυστική για αρκετές περιπτώσεις βιομηχανικών εφαρμογών. Ορισμένες από αυτές είναι:

- Τεχνολογίες κοκκώδων σωματιδίων και κεραμικών υλικών
- Τεχνολογίες δέσμευσης διοξειδίου του άνθρακα

- Τεχνολογίες θερμικής επεξεργασίας απορριμμάτων (πυρόλυση, αεριοποίηση, αποτέφρωση βιομάζας) και ανάκτησης θερμικής ενέργειας
- Καύση (άνθρακα, βιομάζας, αποβλήτων, απαερίων)
- Ασβεστοποίηση
- Καταλυτική πυρόλυση με ρευστοποίηση (μέσο για την διύλιση του πετρελαίου)
- Παραγωγή συνθετικού πετρελαίου κυρίως από γαιάνθρακες (μέθοδος Fisher-Tropsch)

Διάφορες φυσικές διεργασίες όπως θέρμανση, ψύξη, ξήρανση, απορρόφηση πτητικών από σωματίδια και μεταφορά σωματιδίων

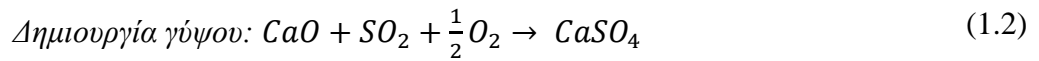
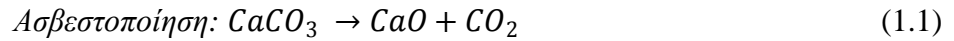
1.1 Ρευστοποιημένες κλίνες καύσης (FCB)

Μία από τις πλέον ενδιαφέρουσες χρήσεις ρευστοποιημένων κλινών, ιδιαίτερα για τον τομέα της ηλεκτροπαραγωγής, είναι η καύση. Η χρήση ρευστοποιημένων κλινών για καύση παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα σε σύγκριση με ανταγωνιστικές τεχνολογίες, με βασικότερα την ευελιξία στην επιλογή καυσίμου (βιομάζα, απορρίμματα κ.α.), την αποδοτικότητα της καύσης αλλά και την επίτευξη αυξημένης μεταφοράς θερμότητας. Τα παραπάνω οφείλονται σε ένα κοινό χαρακτηριστικό των ρευστοποιημένων κλινών το οποίο είναι η έντονη ανάμειξη των σωματιδίων με το ρευστό. Με τον τρόπο αυτό δημιουργούνται οι κατάλληλες συνθήκες για την επίτευξη ομοιόμορφης καύσης αλλά και την αποφυγή ύπαρξης σημείων με πολύ υψηλές θερμοκρασίες [5]. Με τον τρόπο αυτό, ο βαθμός απόδοσης της καύσης αυξάνεται σημαντικά (97,5%~99,5%) για λειτουργία σε φορτίο από 50%~100%, καθιστώντας την τεχνολογία αυτή σημαντικά καλύτερα σε σύγκριση με την καύση σε συμβατικές μονάδες οι οποίες παρουσιάζουν χαμηλότερους βαθμούς απόδοσης ειδικά κατά την λειτουργία τους σε μερικό φορτίο[6].

Ένα πρόσθετο πλεονέκτημα της χρήσης ρευστοποιημένων κλινών για καύση έναντι των συμβατικών μονάδων, είναι η ευελιξία στην χρήση καυσίμου. Στην διαδικασία καύσης εντός ρευστοποιημένης κλίνης δύναται να χρησιμοποιηθούν, πέραν των συμβατικών καυσίμων, πιο δύσχρηστα καύσιμα όπως η βιομάζα ή ακόμη και απορρίμματα, χωρίς να παρουσιάζονται σημαντικές απώλειες ακαύστων. Επιπρόσθετα ως καύσιμα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ο ανθρακίτης, ο λιθάνθρακας, ο λιγνίτης, το κοκ, τα υπολείμματα άνθρακα και ιλύς καθώς και μείγματα όλων των παραπάνω.

Κατά την διαδικασία καύσης εντός μία κλίνης ανακυκλοφορίας, η θερμοκρασία καύσης κυμαίνεται σε ιδιαίτερα χαμηλά επίπεδα, της τάξης των 800 °C - 900 °C, γεγονός που οφείλεται στην δυνατότητα προσθήκης αέρα και ανακυκλοφορίας αυτού εντός της κλίνης. Συγκρινόμενη με τους συμβατικούς καυστήρες κονιοποιημένου καυσίμου, οι οποίοι λειτουργούν σε υψηλότερες θερμοκρασίες (1200°C~1500°C), η καύση εντός ρευστοποιημένης κλίνης είναι φιλικότερη προς το περιβάλλον καθώς χαρακτηρίζεται από χαμηλότερες εκπομπές βλαβερών ενώσεων, όπως οξείδια του αζώτου (NOx), οξείδια του θείου (SOx) και HCl [7]. Η χαμηλή θερμοκρασία λειτουργίας συντελεί στην μείωση αυτή των εκπομπών καθώς δεν ευνοεί τον σχηματισμό θερμικών οξειδίων του αζώτου ενώ παράλληλα παραμένει χαμηλότερη από την θερμοκρασία τήξης της τέφρας αποφεύγοντας με αυτόν τον τρόπο τις συσσωματώσεις και τις επικαθίσεις αυτής στις επιφάνειες συναλλαγής θερμότητας. Επίσης, λόγω της καλής ανάμειξης των στερεών καθίσταται δυνατή η δέσμευση του διοξειδίου του θείου με πρωτογενή μέτρα, όπως η φυσική αποθείωση με βαθμό απόδοσης έως και 97%, και χωρίς την χρήση πρόσθετων διατάξεων. Προκειμένου να επιτευχθεί η φυσική αποθείωση, προστίθεται εντός της κλίνης ασβεστόλιθος (CaCO₃). Εντός της κλίνης τα οξείδια του ασβεστίου

(CaO) αντιδρούν με το SO₂ μετατρέποντάς το σε γύψο σύμφωνα με τις παρακάτω χημικές αντιδράσεις:



Στα πλεονεκτήματα των ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας συγκαταλέγεται η καλή ανάμειξη του καυσίμου, οι υψηλοί συντελεστές μεταφοράς θερμότητας, η υψηλή και ελεγχόμενη παραμονή σωματιδίων εντός της κλίνης καθώς και η δυνατότητα εφαρμογής τους σε διάφορες συμπληρωματικές λειτουργίες[8].

Παρόλα αυτά οι μονάδες ρευστοποιημένης κλίνης παρουσιάζουν ορισμένα μειονεκτήματα. Λόγω των υψηλών ταχυτήτων που αναπτύσσουν τα σωματίδια εντός της κλίνης, παρατηρούνται σε πολλές περιπτώσεις, φθορές τόσο των επιφανειών συναλλαγής όσο και των τοιχωμάτων της κλίνης. Οι φθορές αυτές δε, έχουν ως αποτέλεσμα την μειωμένη αποδοτικότητα της διαδικασίας μετάδοσης θερμότητας.

Επίσης, λόγω της θερμικής αδράνειας αυτών των μονάδων έχουν μειωμένη ικανότητα όσον αφορά την ταχεία αλλαγή φορτίου. Τέλος θα πρέπει να αναφερθεί ότι στις μονάδες αυτές οι εκπομπές υποξειδίου του αζώτου (N₂O) ενδέχεται να είναι αυξημένες, της τάξης των 100~200ppm, σε σύγκριση με αντίστοιχες μονάδες κονιορτοποιημένου καυσίμου.

1.2 Δέσμευση CO₂ με Calcium Looping

Ο κύκλος του ασβεστίου ή αλλιώς calcium looping αποτελεί μια ιδιαίτερα σημαντική εφαρμογή της τεχνολογίας ρευστοποιημένων κλινών. Αποτελεί δε την τεχνολογία που εφαρμόζει η μονάδα που χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία για την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων. Η εφαρμογή της τεχνολογίας του κύκλου ασβεστίου για την δέσμευση διοξειδίου του άνθρακα παρουσιάζει έντονο ενδιαφέρον ενώ σημαντικές έρευνες στον τομέα αυτόν πραγματοποιούνται από το ινστιτούτο IFK (Institut für Feuerungs- und Kraftwerkstechnik) του πανεπιστημίου της Στουτγάρδης [9] [10], από το πολυτεχνείο του Ντάρμστατ στη Γερμανία [11] και άλλους. Οι παραπάνω έρευνες πραγματοποιούνται σε μονάδα αποτελούμενη από δύο συζυγείς κλίνες συνδεδεμένες μεταξύ τους στις οποίες ανακυκλοφορούν στερεά σωματίδια.

Η δέσμευση διοξειδίου του άνθρακα μέσω της τεχνολογίας του κύκλου ασβεστίου βασίζεται στην αντιστρέψιμη χημική αντίδραση του διοξειδίου του άνθρακα με οξείδιο του ασβεστίου (CaO) το οποίο χρησιμοποιείται ως απορροφητής, και περιγράφεται από την παρακάτω αντίδραση.



Στην πρώτη κλίνη της μονάδας πραγματοποιείται η αντίδραση της ενανθράκωσης, η οποία περιγράφεται από την παραπάνω σχέση με φορά από τα δεξιά προς τα αριστερά. Πρόκειται για μία εξώθερμη αντίδραση κατά την οποία το περιεχόμενο στα εισερχόμενα στην κλίνη ενανθράκωσης καυσαέρια διοξείδιο του άνθρακα αντιδρά με το οξείδιο του ασβεστίου σχηματίζοντας το ανθρακικό ασβέστιο (CaCO₃). Το παραγόμενο ανθρακικό ασβέστιο εισέρχεται στην συνέχεια στην δεύτερη κλίνη όπου πραγματοποιείται η αντίδραση της ασβεστοποίησης, η οποία περιγράφεται από την παραπάνω αντίδραση με φορά από τα αριστερά προς τα δεξιά, με την οποία επιτυγχάνεται η

αναγέννηση του απορροφητή. Η αντίδραση αυτή είναι ενδόθερμη ενώ επιτυγχάνεται σε ένα μεγάλο εύρος συνθηκών λειτουργίας της κλίνης. Κατά την αντίδραση της ασβεστοποίησης παράγεται ακόμη το καθαρό ρεύμα διοξειδίου του άνθρακα ενώ το αναγεννημένο οξείδιο του ασβεστίου οδηγείται πίσω στην πρώτη κλίνη για περαιτέρω δέσμευση. Η παραπάνω διαδικασία παρουσιάζει ένα σημαντικό πλεονέκτημα το οποίο είναι η αναγέννηση πρόσθετης ενέργειας από το σύστημα η οποία μπορεί να φτάσει σε ποσοστό έως και το 50% . Ενδεικτικά αναφέρεται ότι με την παραπάνω τεχνολογία το κόστος δέσμευσης CO₂ μπορεί να είναι μικρότερο από 20 ευρώ/τόνο ενώ το κόστος ηλεκτρισμού για την λειτουργία της μονάδας είναι ~40 ευρώ/MWth [12].

Ένα ακόμη πλεονέκτημα της παραπάνω μεθόδου είναι ότι το οξείδιο του ασβεστίου που χρησιμοποιείται ως απορροφητής προέρχεται από τον ασβεστόλιθος ο οποίος είναι ευρέως διαθέσιμος και ιδιαίτερα οικονομικός. Επιπρόσθετα το οξείδιο του ασβεστίου παρουσιάζει ιδιαίτερη ικανότητα δέσμευσης των οξειδίων του θείου σε σχέση με τον καθαρό ασβεστόλιθο και ως εκ τούτου δύναται να χρησιμοποιηθεί σε αντιδραστήρες κλίνης ταχείας ρευστοποίησης.

1.3 Μοντελοποίηση ρευστοποιημένων κλινών ανακυκλοφορίας

Η δημιουργία μοντέλων προσομοίωσης της ροής εντός ρευστοποιημένων κλινών είναι καίριας σημασίας για τον σχεδιασμό αποδοτικότερων μονάδων. Ενώ ένα μεγάλο εύρος εργαλείων και μεθόδων έχουν αναπτυχθεί και επιτύχει στην περίπτωση της μοντελοποίησης μονοφασικών ροών, δεν ισχύει το ίδιο για της περιπτώσεις των πολυφασικών ροών. Ως πολυφασική ροή (multiphase flow) ορίζεται η ταυτόχρονη ροή δύο ή περισσότερων φάσεων εντός ενός αγωγού, στην περίπτωση δε της ρευστοποιημένης κλίνης περιλαμβάνει φάσεις τόσο στην στερεή, όσο και στην αέρια κατάσταση. Η μοντελοποίηση τέτοιας ροής εντός μίας βιομηχανικής μονάδας, όπως είναι π.χ. μία μονάδα CFB αν και πραγματοποιείται σε διάφορα εργαστήρια παγκοσμίως, είναι ακόμα υπό εξέταση για την ακρίβεια ή όχι των αποτελεσμάτων. Αυτό οφείλεται στο ότι, ακόμα δεν υπάρχουν αρκετές μελέτες οι οποίες θα μπορούσαν να βοηθήσουν στην μοντελοποίηση μίας ροής στην οποία η επίδραση της γεωμετρίας (είσοδος, έξοδος, τείχος) να μην υπερνικά την υδροδυναμική του προβλήματος, με ταυτόχρονη επιλογή ικανοποιητικά μεγάλων σωματιδίων και ικανοποιητικά μεγάλου πλέγματος, έτσι ώστε να επιτευχθεί ακριβής προσομοίωση [13]. Σε αυτό έρχεται να συμβάλει και το γεγονός ότι σχεδιασμός της πλειοψηφίας των αντιδραστήρων ρευστοποιημένης κλίνης στηρίζεται κατά βάση σε εμπειρικούς συσχετισμούς ενώ σπάνια λαμβάνονται υπόψη οι κύριοι μηχανισμοί που χαρακτηρίζουν την ροή [14].

Η ροή εντός των αντιδραστήρων ρευστοποιημένης κλίνης χαρακτηρίζεται από έντονη μη γραμμικότητα καθώς και ανομοιογένεια [15]. Στην ανομοιογένεια αυτή συντελεί σε μεγάλο βαθμό ο δυναμικός σχηματισμός διαφόρων δομών σωματιδίων (particle clusters). Τα τελευταία χρόνια έχουν γίνει αρκετές προσπάθειες ως προς την βελτιστοποίηση των μοντέλων προσομοίωσης των ροών αερίου-στερεού. Τα περισσότερα από αυτά τα μοντέλα βασίζονται στην θεώρηση δύο ρευστών κατά την οποία τόσο το αέριο όσο και τα στερεά σωματίδια θεωρούνται συνεχείς φάσεις που αλληλοδιδρατούν σε κάθε όγκο ελέγχου του μοντέλου έτσι ώστε οι εφαρμοζόμενες στην μονοφασική ροή εξισώσεις διατήρησης της μάζας και της ορμής να μπορούν να επεκταθούν και στο υδροδυναμικό μοντέλο της διφασικής ροής αερίου στερεού. Η ανάπτυξη μεθόδων μοντελοποίησης της πολυφασικής ροής μέσω της υπολογιστικής ρευστομηχανικής αποτέλεσε αντικείμενο μελέτης πολλών ερευνητών, μεταξύ των οποίων και οι Yang et al. [15], οι Neri και Gidaspow [16] και οι Jiradilok et al. [17]. Στο επίκεντρο των μελετών αυτών είναι η ακριβής μοντελοποίηση της αλληλεπίδρασης των στερεών

σωματιδίων με το ρευστό. Κατά την ροή των σωματιδίων εντός του ρευστού ασκείται στα σωματίδια οπισθέλκουσα δύναμη ως αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης αυτής. Ο ακριβής υπολογισμός της οπισθέλκουσας αυτής δύναμης αποτελεί έναν από τους σημαντικότερους παράγοντες για την ανάπτυξη νέων βελτιωμένων μοντέλων προσομοίωσης των ροών αυτών. Μερικές από τις μεθόδους υπολογισμού της οπισθέλκουσας δύναμης βασισμένες σε διαφορετικές συνθήκες ροής έχουν αναπτυχθεί από τους Gidaspow [18], Li και Kwauk [19] και Gibilaro et al. [20]. Τα συμβατικά αυτά μοντέλα θεωρούν σε κάθε όγκο ελέγχου ομοιογενείς συνθήκες. Ένα από τα πιο εξελιγμένα μοντέλα υπολογισμού της οπισθέλκουσας δύναμης, το οποίο παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα σε επίπεδο ακριβείας έναντι των συμβατικών μοντέλων είναι το EMMS (Energy Minimization Multi-Scale analysis). Το μοντέλο EMMS έχει αναπτυχθεί και εφαρμοστεί σε μία σειρά εργασιών [21], [22], [23], ενώ ιδιαίτερη έρευνα για την εφαρμογή και υλοποίηση του γίνεται και στο Εργαστήριο Ατμοκινητήρων και Λεβήτων του Ε.Μ.Π. Πρόκειται για μία πολλά υποσχόμενη προσέγγιση για την μοντελοποίηση ροών όπου παρουσιάζονται δομές μεσο-κλίμακας (συμπλέγματα σωματιδίων ή φυσαλίδες) με στόχο τον ακριβή υπολογισμό της οπισθέλκουσας δύναμης. Η βασική θεώρηση της προσέγγισης του EMMS είναι ότι η οπισθέλκουσα δύναμη που αναπτύσσεται σε πραγματικές κλίμακες αερίο-στερεού διαφέρει κατά πολύ από εκείνη που θα αναπτυσσόταν σε ομοιογενείς κλίμακες λόγω της ύπαρξης των δομών μεσο-κλίμακας. Αρχικά το μοντέλο EMMS εφαρμόστηκε για την μοντελοποίηση ροών με ύπαρξη συμπλεγμάτων σωματιδίων (cluster based EMMS) ενώ αργότερα επεκτάθηκε και τροποποιήθηκε προκειμένου να εφαρμοστεί και στις μονάδες που λειτουργούν σε συνθήκες ρευστοποίησης με φυσαλίδες [24] [25].

Σε πραγματικές συνθήκες ρευστοποιημένων κλινών, η στερεά φάση δεν αποτελείται από σωματίδια με κοινά χαρακτηριστικά, ιδιαίτερα όσον αφορά την διάμετρό τους ('poly- dispersed mixtures'). Ενώ κατά την αρχική του εφαρμογή το μοντέλο EMMS χρησιμοποιήθηκε για την μοντελοποίηση 'mono- dispersed mixtures', δηλαδή ροές σωματιδίων ενός τύπου, τα τελευταία χρόνια έχει εφαρμοστεί και σε 'multi-dispersed mixtures', δηλαδή μείγματα στερεάς φάσης αποτελούμενα από πολλούς διαφορετικούς τύπου σωματιδίων. Καθώς η μοντελοποίηση των multi-dispersed mixtures είναι ιδιαίτερα σύνθετη και με υψηλό υπολογιστικό κόστος, τα μείγματα αυτά ανάγονται συνήθως σε δυαδικά μείγματα 'binary mixtures', δηλαδή ροές όπου η στερεά φάση αποτελείται από δύο διαφορετικού τύπου σωματίδια (όπως κόκκοι άνθρακα και τέφρα) θεωρώντας ευρύτερες κατανομές των χαρακτηριστικών κάθε τύπου σωματιδίων [26][27].

Στην εργασία της Ζενέλη Μ. [28], αναπτύχθηκε ένα γενικό εργαλείο υπολογισμού του μοντέλου EMMS το οποίο λαμβάνει υπόψη τις πιο ακραίες περιπτώσεις ροής εντός της κλίνης. Στην παρούσα εργασία, τα αποτελέσματα της εφαρμογής του παραπάνω εργαλείου, χρησιμοποιήθηκαν ώστε να αναπτυχθεί και να εκπαιδευτεί κατάλληλα νευρωνικό δίκτυο το οποίο θα μπορεί, για ένα εύρος γεωμετριών και συνθηκών λειτουργίας της κλίνης, να προβλέψει την τιμή της οπισθέλκουσας δύναμης. Η ανάγκη για την ανάπτυξη ενός τέτοιου μοντέλου είναι διττή. Αρχικά δίνει την δυνατότητα απευθείας εφαρμογής του μοντέλου σε CFD μοντελοποιήσεις για ένα μεγάλο εύρος περιπτώσεων λειτουργίας κλινών αλλά και χαρακτηριστικών τόσο του ρευστού όσο και της στερεάς φάσης. Με την παραπάνω προσέγγιση αποφεύγεται η επίλυση κάθε περίπτωσης λειτουργίας ξεχωριστά, μία διαδικασία που απαιτεί τόσο χρόνο και υπολογιστική ισχύ όσο και εξειδίκευση από τον χρήστη του μοντέλου CFD ως προς την εφαρμογή του μοντέλου EMMS. Το σημαντικότερο όμως κίνητρο για την δημιουργία ενός τέτοιου ευέλικτου μοντέλου, είναι η ικανότητα αυτού να εφαρμόζεται θεωρώντας διαφορετικά χαρακτηριστικά, τόσο του ρευστού όσο και των σωματιδίων της κλίνης. Το παραπάνω χαρακτηριστικό του μοντέλου αποτελεί εξέλιξη στον τρόπο εφαρμογής του μοντέλου

EMMS καθώς δίνει την δυνατότητα θεώρησης πιο ρεαλιστικών συνθηκών που επικρατούν εντός της κλίνης. Σε πολλές περιπτώσεις κλινών, όπως κλίνες που χρησιμοποιούνται για καύση ή χημικές διεργασίες, μία τέτοια εφαρμογή είναι απαραίτητη καθώς τα χαρακτηριστικά των σωματιδίων και του ρευστού (διάμετρος, πυκνότητα) μεταβάλλονται κατά την διάρκεια λειτουργίας της κλίνης. Η δυσκολία στο εγχείρημα αυτό έγκειται στην έντονη μη γραμμικότητα του προβλήματος αλλά και στην δυσκολία παραγωγής ικανοποιητικού μεγέθους δεδομένων τα οποία είναι απαραίτητα για την ανάπτυξη και εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου

2 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΜΕΓΕΘΗ ΚΑΙ ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΡΕΥΣΤΟΠΟΙΗΣΗ

2.1 Μέση διάμετρος σωματιδίων

Σε θεωρητικό επίπεδο όλα τα σωματίδια εντός μίας κλίνης έχουν συγκεκριμένη διάμετρο. Παρόλα αυτά, στην πράξη είναι αδύνατο να μην υπάρχουν αποκλίσεις στις διαμέτρους των σωματιδίων αυτών. Για τον λόγο αυτό είναι απαραίτητη η εισαγωγή ενός στοχαστικού μεγέθους το οποίο θα περιγράφει την αντιπροσωπευτική μέση τιμή της διαμέτρου των σωματιδίων και θα μπορεί να χρησιμοποιηθεί στους υπολογισμούς του μοντέλου. Το μέγεθος της μέσης διαμέτρου των σωματιδίων ορίζεται ως ο λόγος του αθροίσματος των διαμέτρων όλων των σωματιδίων προς τον συνολικό αριθμό σωματιδίων και δίνεται από την παρακάτω σχέση.

$$d_p = \frac{\sum d}{N} = \frac{\sum n_i d_i}{\sum n_i} = \int_0^{\infty} d_p f(d_p) dd_p \quad (2.1)$$

Επίσης, στην περίπτωση που τα σωματίδια έχουν κοκκώδη μορφή, είναι απαραίτητη η εισαγωγή της έννοιας της σφαιρικότητας η οποία ισούται με το πηλίκο της επιφάνειας σφαίρας με ίσο με το σωματίδιο όγκο προς την επιφάνεια του σωματιδίου.

$$\varphi = \frac{A_{σφαίρας}}{A_{σωματιδίου}} \quad (2.2)$$

Για την περίπτωση της τέλει σφαίρας ισχύει $\varphi=1$ ενώ για κάθε άλλη περίπτωση $0<\varphi<1$.

Πυκνότητα σωματιδίων

Για περιπτώσεις μη πορώδων σωματιδίων η πυκνότητα των σωματιδίων δίνεται από το πηλίκο της μάζας του σωματιδίου προς τον όγκο του. Παρόλα αυτά υπάρχουν διάφοροι τρόποι υπολογισμού της πυκνότητας του σωματιδίου ανάλογα με την εκάστοτε περίπτωση [29].

$$\rho_s = \frac{M_p}{V_p} \quad (2.3)$$

Για την περίπτωση πορώδων σωματιδίων η παραπάνω σχέση εφαρμόζεται με αντικατάσταση του όγκου με ισοδύναμο όγκο πορώδους σωματιδίων ο οποίος περικλείει το πορώδες σωματίδιο ώστε το ισοδύναμο σωματίδιο να έχει μη πορώδη επιφάνεια.

2.2 Κλάσμα κενού (voidage)

Το κλάσμα κενού μίας κλίνης ορίζεται ως ο λόγος του όγκου όπου η στερεά φάση απουσιάζει προς των συνολικό όγκο.

$$\varepsilon_g = \frac{V_g}{V} \quad (2.4)$$

Ακόμη σε ορισμένες περιπτώσεις χρησιμοποιείται το κλάσμα ε_s το οποίο ορίζεται ως ο όγκος που καταλαμβάνεται από σωματίδια προς τον συνολικό όγκο. Είναι προφανές ότι πάντα ισχύει

$$\varepsilon_g + \varepsilon_s = 1.$$

Τυπικά σε κλίνες ταχείας ρευστοποίησης το κλάσμα κενού παίρνει την τιμή 0,8 στην πυκνή περιοχή (πυθμένας) και 0,999 στην αραιή περιοχή (πάνω τμήμα της κλίνης)

2.3 Κλάσμα κενού έναρξης ρευστοποίησης

Ως κλάσμα κενού έναρξης ρευστοποίησης ορίζεται το κλάσμα κενού σε συνθήκες ελάχιστης ρευστοποίησης. Το μέγεθος αυτό μπορεί να υπολογισθεί πειραματικά για κάθε περίπτωση σωματιδίων ή μέσω της παρακάτω απλουστευμένης σχέσης συναρτήσει της σφαιρικότητας των σωματιδίων.

Στην παρούσα εργασία το κλάσμα κενού έναρξης ρευστοποίησης λαμβάνεται ίσο με 0,55

2.4 Φαινόμενη ταχύτητα

Σε συνθήκες ρευστοποιημένης κλίνης η ταχύτητα αυτή αποτελεί καθαρά λογιστικό μέγεθος και δεν ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα. Σε πραγματικές συνθήκες, μέρος της διατομής καταλαμβάνεται από σωματίδια, επομένως το ρευστό διέρχεται από μία μικρότερη ελεύθερη διατομή με αποτέλεσμα η πραγματική του ταχύτητα να είναι μεγαλύτερη. Η πραγματική ταχύτητα του ρευστού υπολογίζεται από την σχέση,

$$U = \frac{V}{\varepsilon_g A} \quad (2.5)$$

2.5 Ταχύτητα έναρξης ρευστοποίησης

Ταχύτητα έναρξης ρευστοποίησης ονομάζεται η ελάχιστη φαινόμενη ταχύτητα του αερίου που απαιτείται για να επιτευχθεί αιώρηση των σωματιδίων και να βρεθεί η κλίση σε κατάσταση ελάχιστης ρευστοποίησης. Στην κατάσταση αυτή η πτώση πίεσης κατά μήκος της κλίνης εξισώνεται με το βάρος της κλίνης ανά μονάδα διατομής. Τρόποι υπολογισμού του παραπάνω μεγέθους έχουν προταθεί στις εργασίες [2],[30],[31],[32]. Για την παραπάνω ταχύτητα ορίζεται ο αντίστοιχος αριθμός Reynolds των σωματιδίων:

$$Re_{p,mf} = \frac{d_p u_{mf} \rho_g}{\mu_g} \quad (2.6)$$

Και ο αριθμός του Αρχιμήδη :

$$Ar = \frac{d_p^3 g \rho_g (\rho_s - \rho_g)}{\mu_g^2} \quad (2.7)$$

Για σφαιρικούς αμμόδεις κόκκους με $\varepsilon_{mf} < 0,48$ και συντελεστή σφαιρικότητας $\varphi > 0,9$ ισχύει :

$$Re_{p,mf} = \frac{Ar}{1400 + 5\sqrt{Ar}}, \quad \text{για } Ar \geq 1480 \quad (2.8)$$

$$Re_{p,mf} = \frac{Ar}{1400}, \quad \text{για } Ar < 1480 \quad (2.9)$$

Ενώ για $\varepsilon_{mf} < 0,55$ και συντελεστή σφαιρικότητας $0,8 < \varphi < 0,9$

$$Re_{p,mf} = \frac{Ar}{1170 + \sqrt{Ar}} \quad (2.10)$$

Και για μη σφαιρικούς κόκκους με $\varphi < 0,8$

$$Re_{p,mf} = \frac{Ar}{790 + 7\sqrt{Ar}} \quad (2.11)$$

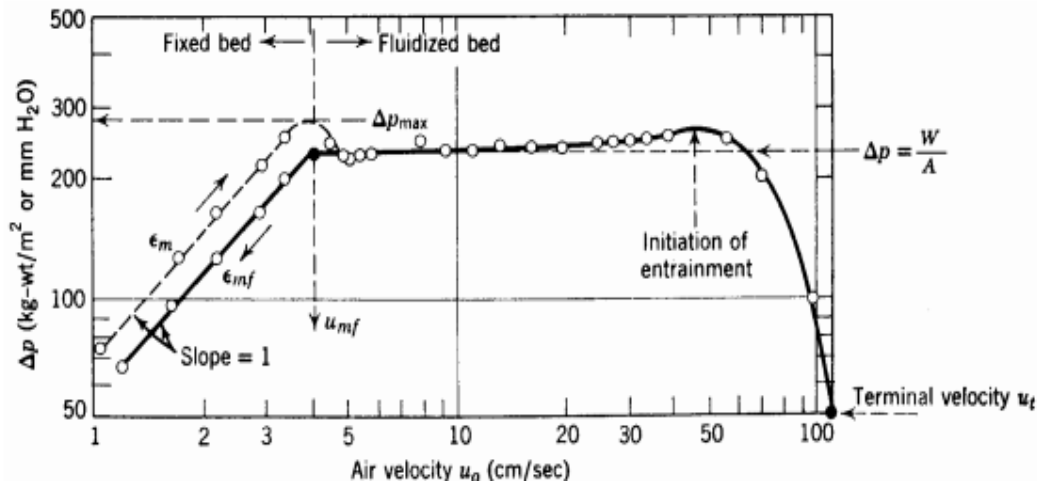
Ο αριθμός Reynolds για την κατάσταση ελάχιστης ρευστοποίησης, μπορεί ακόμη να υπολογιστεί και από την εμπειρική σχέση των Wen και Yu, [31], όπου :

$$Re_{p,mf} = [C_1^2 + C_2 Ar]^{\frac{1}{2}} - C_1 \quad (2.12)$$

Για μη σφαιρικά σωματίδια: $C_1 = 28,7$ και $C_2 = 0,0494$

Ενώ για λεία σφαιρικά σωματίδια $C_1 = 33,7$ και $C_2 = 0,0408$

Στην εργασία των Kunii και Levenspiel [2],[33], η ταχύτητα ελάχιστης ρευστοποίησης προσεγγίστηκε πειραματικά μέσω της συσχέτισης της πτώσης πίεσης κατά μήκος μη ρευστοποιημένης κλίνης με την πτώση πίεσης σε ρευστοποιημένη κλίνη υπό σταθερές συνθήκες. Στο παρακάτω διάγραμμα φαίνεται ότι η πτώση πίεσης είναι ανάλογη της ταχύτητας του αερίου u_0 έως ότου ξεκινήσει η ρευστοποίηση όπου η πτώση πίεσης σταθεροποιείται. Η ταχύτητα όπου η σταθεροποίηση της πτώσης πίεσης προκύπτει είναι και η ταχύτητα ελάχιστης ρευστοποίησης.



Εικόνα 2.1: Διάγραμμα πτώσης πίεσης συναρτήσει της φαινόμενης ταχύτητας [2]

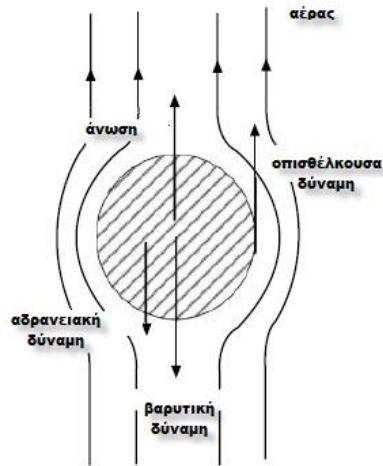
2.6 Οριακή ταχύτητα (terminal velocity)

Η τελική ταχύτητα του σωματιδίου είναι ένα από τα βασικότερα χαρακτηριστικά ενός μείγματος αερίου-σωματιδίων με ιδιαίτερη έμφαση να δίνεται σε αυτό το μέγεθος κατά την διάρκεια του σχεδιασμού μίας κλίνης. Ορίζεται ως η ταχύτητα που έχει το σωματίδιο όταν η συνισταμένη των δυνάμεων που ασκούνται σε αυτό, κατά την καθοδική πορεία, ισούται με το μηδέν. Πιο γενικά θα μπορούσαμε να πούμε ότι είναι η ταχύτητα του σωματιδίου όταν αυτό εκτελεί ελεύθερη πτώση σε ένα μη κινούμενο μέσο. Εφόσον οι δυνάμεις που ασκούνται σε κάθε σωματίδιο είναι το βάρος του και η ανωστική και η οπισθέλκουσα δύναμη που προκαλούνται από το ανερχόμενο ρεύμα αέρα, είναι προφανές ότι στο σημείο που η ταχύτητα του σωματιδίου ξεπερνάει την οριακή ταχύτητα, η οπισθέλκουσα και ανωστική δύναμη υπερνικά την βαρυτική δύναμη και το σωματίδιο παρασύρεται εκτός κλίνης με αποτέλεσμα να απαιτείται σύστημα ανακυκλοφορίας προκειμένου τα εξερχόμενα σωματίδια να επιστρέψουν στον αντιδραστήρα. Αντιθέτως για ταχύτητες μεταξύ u_{mf} και u_t τα σωματίδια παραμένουν εντός της κλίνης. Ουσιαστικά η τερματική ταχύτητα αποτελεί ένα άνω όριο για την ταχύτητα ολίσθησης u_{slip} (σχετική ταχύτητα αερίου-σωματιδίου) του σωματιδίου. Για τον υπολογισμό της τερματικής ταχύτητας χρησιμοποιούνται οι παρακάτω σχέσεις της αδιάστατης διαμέτρου των σωματιδίων και της αδιάστατης τελικής ταχύτητας αυτών [2].

$$u_t^* = \left[\frac{18}{(d_p^*)^2} + \frac{2.335 - 1.744 \varphi}{(d_p^*)^5} \right]^{-1} \quad \text{για } 0,5 < \varphi < 1 \quad (2.13)$$

$$d_p^* = d_p \left[\frac{\rho_g (\rho_s - \rho_g) g}{\mu^2} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (2.14)$$

$$u_t = u_t^* \left[\frac{\mu (\rho_s - \rho_g) g}{\rho_g^2} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (2.15)$$



Εικόνα 2.2: Ασκούμενες δυνάμεις στο σωματίδιο [34]

Στην περίπτωση όπου τα σωματίδια είναι πλήρως σφαιρικά τότε η τελική ταχύτητα υπολογίζεται σύμφωνα με τις παρακάτω σχέσεις :

Για αριθμό Reynolds ίσο με:

$$Re = \frac{\varepsilon_g \rho_g d_p |u_g - u_s|}{\mu_g} \quad (2.16)$$

η τελική ταχύτητα είναι

$$u_t = \frac{(\rho_s - \rho_g) g d_p^2}{18 \mu_g} \quad \text{για } Re < 1 \quad (2.17)$$

$$u_t = \left[\frac{4(\rho_s - \rho_g) g d_p}{3 \rho_g C_d} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{για } 1 < Re < 500 \quad (2.18)$$

$$u_t = \left[\frac{3(\rho_s - \rho_g) g d_p}{\rho_g} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \text{για } 500 < Re < 2 * 10^5 \quad (2.19)$$

2.7 Οπισθέλκουσα δύναμη

Με τον όρο οπισθέλκουσα δύναμη (drag force) ορίζεται η δύναμη η οποία ασκείται σε ένα σώμα όταν αυτό βρεθεί στο πεδίο ροής ενός ρευστού. Στην γενική της μορφή, η οπισθέλκουσα δύναμη εκφράζεται ανά μονάδα όγκου μίγματος ως:

$$f_D = \beta(u_g - u_s) = \beta \cdot u_{slip}, \quad \sigma \varepsilon \frac{N}{m^3} \quad (2.20)$$

Ο προσδιορισμός του συντελεστή εναλλαγής ορμής έχει μελετηθεί σε αρκετές εργασίες μεταξύ των οποίων και αυτές των Wen και Yu [35], των Syamlal και Brien [36], του Arastoorpour [37] και του Gidaspow [18].

Σύμφωνα με του Wen και Yu [35] η οπισθέλκουσα δύναμη καταλήγει να υπολογίζεται από την εξής σχέση:

$$F_{Wen,Yu} = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g \varepsilon_g \varepsilon_s \cdot |u_g - u_s| \cdot (u_g - u_s)}{d_p} \varepsilon_g^{-2.65} \quad (2.21)$$

Ενώ ο συντελεστής οπισθέλκουσας C_D , από την ίδια μελέτη προσδιορίζεται από την σχέση

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) \quad (2.22)$$

Ο Gidaspow [18] χρησιμοποίησε την παραπάνω σχέση για την αραιή ροή και την σχέση του Ergun [38], για την πυκνή. Έτσι κατέληξε στις σχέσεις :

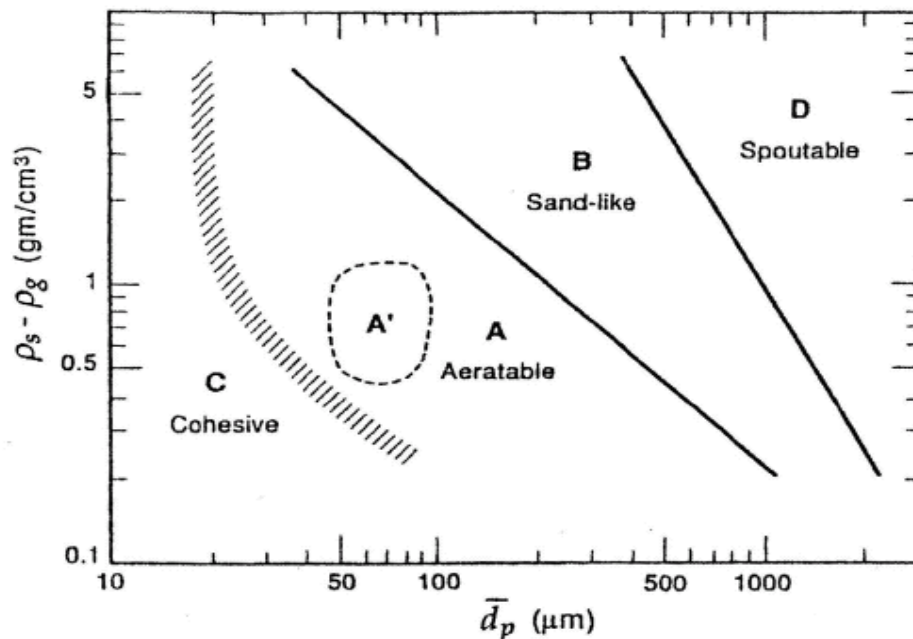
$$F_D = \frac{3}{4} C_D \frac{\rho_g \varepsilon_g \varepsilon_s \cdot |u_g - u_s| \cdot (u_g - u_s)}{d_p} \varepsilon_g^{-2.65} \quad \text{για } \varepsilon_g > 0,8 \quad (2.23)$$

Και

$$F_D = 150 \frac{\varepsilon_s^2 \mu_g (u_g - u_s)}{\varepsilon_g d_p^2} + 1.75 \frac{\rho_g \varepsilon_s \cdot |u_g - u_s| \cdot (u_g - u_s)}{d_p} \quad \text{για } \varepsilon_g < 0.8 \quad (2.24)$$

2.8 Κατηγοριοποίηση σωματιδίων

Τα σωματίδια που χρησιμοποιούνται στις ρευστοποιημένες κλίνες κατανέμονται σε τέσσερις κατηγορίες, όπως αυτές επιγράφηκαν στην μελέτη του Geldart D το 1973 [39],[2]. Για την κατηγοριοποίηση των σωματιδίων χρησιμοποιούνται δύο βασικά κριτήρια, η μέση διάμετρος των σωματιδίων ($\overline{d_p}$) και η διαφορά πυκνότητας των στερεών σωματιδίων με το ρευστό ($\rho_s - \rho_g$).



Εικόνα 2.3: Κατηγοριοποίηση σωματιδίων κατά Geldart [2]

Ομάδα C: Αποτελείται από λεπτόκοκκα και συνεκτικά σωματίδια με πολύ μικρή διάμετρο (τυπικά από 20 έως 30 μm) των οποίων η ρευστοποίηση είναι ιδιαίτερα δύσκολη κυρίως λόγω του γεγονότος ότι οι δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ των σωματιδίων υπερिशύουν των δυνάμεων που προκύπτουν από την αλληλεπίδραση των σωματιδίων με το ρευστό. Τα σωματίδια αυτά τείνουν να σχηματίζουν ανομοιογενείς δομές ιδιαίτερα σε κλίνες μικρής διαμέτρου. Στις περισσότερες περιπτώσεις τα κατά την ρευστοποίηση τους είτε σχηματίζονται οδεύσεις αερίου από την βάση της κλίνης έως και την επιφάνεια ή τα σωματίδια ανέρχονται σαν έμβολο προς τα επάνω. Για την κανονική ρευστοποίηση τους χρησιμοποιούνται συχνά μηχανισμοί ανάδευσης αυτών. Τυπικά υλικά που ανήκουν στην κατηγορία C είναι το ταλκ και το αλεύρι.

Ομάδα A: Στην ομάδα A ανήκουν σωματίδια με μικρή διάμετρο (20 έως 100 μm) και πυκνότητα τυπικά μικρότερη από 1,4 g/cm^3 . Τα σωματίδια της ομάδας A ρευστοποιούνται σχετικά εύκολα με ομαλή ρευστοποίηση για μικρές ταχύτητες ρευστού (χωρίς φυσαλίδες), ενώ για υψηλότερες ταχύτητες τείνουν να σχηματίζουν φυσαλίδες οι οποίες ανέρχονται εντός της κλίνης με ταχύτητα μεγαλύτερη από αυτή του ρευστού. Σωματίδια της παραπάνω κατηγορίας χρησιμοποιούνται συχνά σε καταλυτικές διατάξεις FCC.

Ομάδα B: Τα σωματίδια της ομάδας B, της οποίας αντιπροσωπευτικό παράδειγμα είναι οι κόκκοι άμμου, έχουν μέση διάμετρο από 40 έως 500 μm ενώ η πυκνότητά του κυμαίνεται από 1,4 έως 4 g/cm^3 . Η ρευστοποίηση τους είναι αρκετά εύκολη ενώ συνοδεύεται με την ταυτόχρονη σχεδόν δημιουργία φυσαλίδων το μέγεθος των οποίων αυξάνεται γραμμικά με την ποσότητα $U - u_{mf}$.

Ομάδα D: Η ομάδα D αποτελείται από μεγαλύτερης διαμέτρου και πυκνότητας σωματίδια όπως οι κόκκοι καφέ, ο αεριοποιημένος άνθρακας, τα μιτζέλια κτλ. Η ρευστοποίηση των σωματιδίων αυτών δεν είναι εύκολη και συνήθως πραγματοποιείται σε ρηχές κλίνες. Τα σωματίδια της κατηγορίας

Δ βοηθούν στο σχηματισμό φυσαλίδων οι οποίες διαλύονται εντός της κλίνης ενώ αν η κατανομή του αερίου δεν είναι ομοιόμορφη, το αέριο διαπερνά την κλίνη σε οδεύσεις.

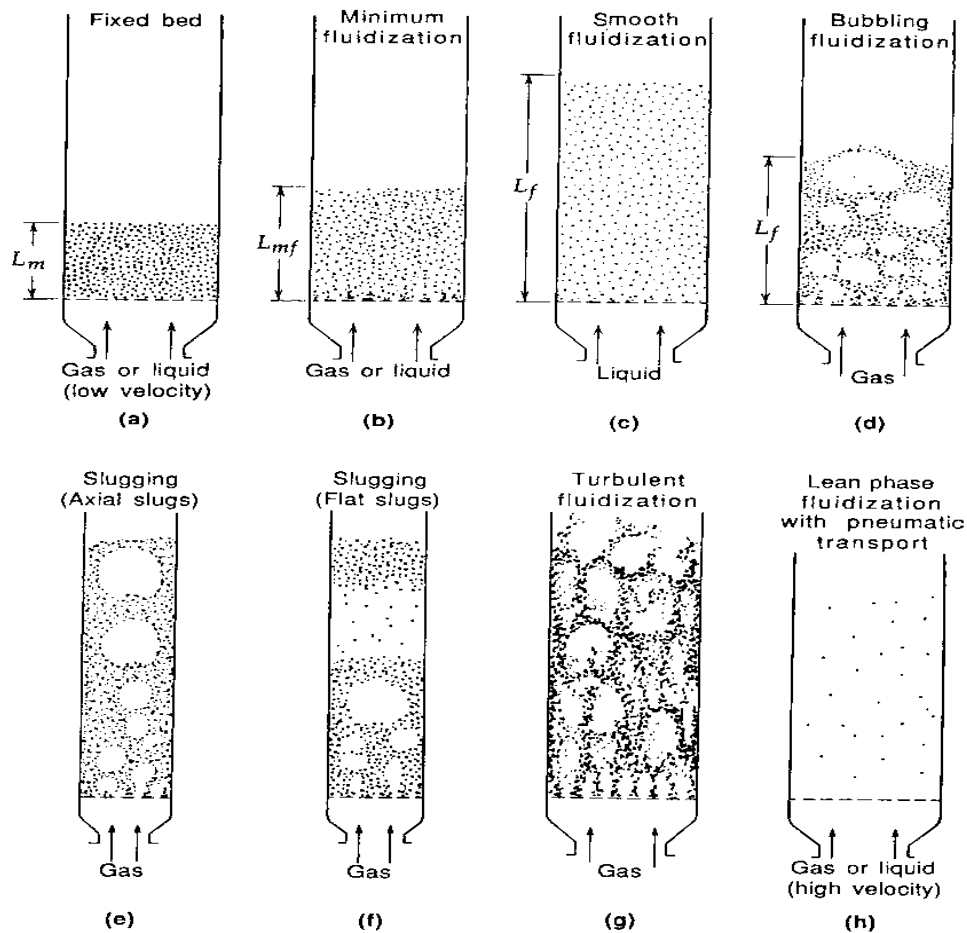
2.9 Πρότυπα ρευστοποίησης

Η διαδικασία της ρευστοποίησης παρουσιάζει ορισμένα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά τα οποία εξαρτώνται από τις παραμέτρους λειτουργίας της κλίνης. Οι κύριες παράμετροι που καθορίζουν το πρότυπο ρευστοποίησης της εκάστοτε κλίνης είναι η φαινόμενη ταχύτητα του ρευστού καθώς και το ποσοστό όγκου αυτού που εισέρχεται στην κλίνη.

Όταν το ρευστό ανέρχεται διαμέσου μίας κλίνης με λεπτά σωματίδια με χαμηλό ρυθμό ροής τότε αυτό απλά διηθείται στα κενά που υπάρχουν ανάμεσα στα σωματίδια. Σε αυτή την περίπτωση η κλίνη χαρακτηρίζεται ως **μόνιμη κλίνη (fixed bed)**. Η αύξηση του ρυθμού ροής του ρευστού αναγκάζει τα σωματίδια να απομακρυνθούν μεταξύ τους ενώ παράλληλα παρατηρείται και κίνηση αυτών στις περιοχές περιορισμού τους. Στην συγκεκριμένη κατάσταση η κλίνη χαρακτηρίζεται ως **διογκωμένη κλίνη (expanded bed)** [2].

Αυξάνοντας περισσότερο την ταχύτητα ροής του ρευστού παρατηρείται μία τιμή αυτής για την οποία τα σωματίδια αιωρούνται υπό την επίδραση του ανερχόμενου ρευστού. Στο σημείο αυτό οι δυνάμεις τριβής που ασκεί το ρευστό στα σωματίδια ισορροπούν με το βάρος των σωματιδίων ενώ η κάθετη συνιστώσα της θλιπτικής φόρτισης μεταξύ των παρακείμενων σωματιδίων εξαλείφεται και η πτώση πίεσης στα διάφορα τμήματα της κλίνης τείνει να ισούται με το βάρος του ρευστού και των σωματιδίων του τμήματος αυτού. Στην κατάσταση αυτή η κλίνη θεωρείται ρευστοποιημένη στο **ελάχιστο επίπεδο ρευστοποίησης (minimum fluidization)** [2].

Σε συστήματα υγρού-στερεού, η αύξηση της ταχύτητας ροής του ρευστού πάνω από το επίπεδο ελάχιστης ρευστοποίησης έχει ως αποτέλεσμα την **ομαλή ρευστοποίηση (smooth fluidization)** δηλαδή την σταδιακή και ομαλή διόγκωση της κλίνης. Οι ακαθόριστες αστάθειες της ροής αποσβένονται ενώ, υπό κανονικές συνθήκες, δεν παρατηρείται ανομοιογένεια ή μεγάλης κλίμακας κενά ανάμεσα στα σωματίδια. Η κλίνη σε αυτή την κατάσταση ονομάζεται ομοιογενής. Σε συστήματα αερίου-στερεού η κατάσταση αυτή μπορεί να προκύψει μόνο υπό ειδικές συνθήκες με λεπτά και ελαφριά σωματίδια και υψηλή πυκνότητα αερίου σε υψηλή πίεση [2].



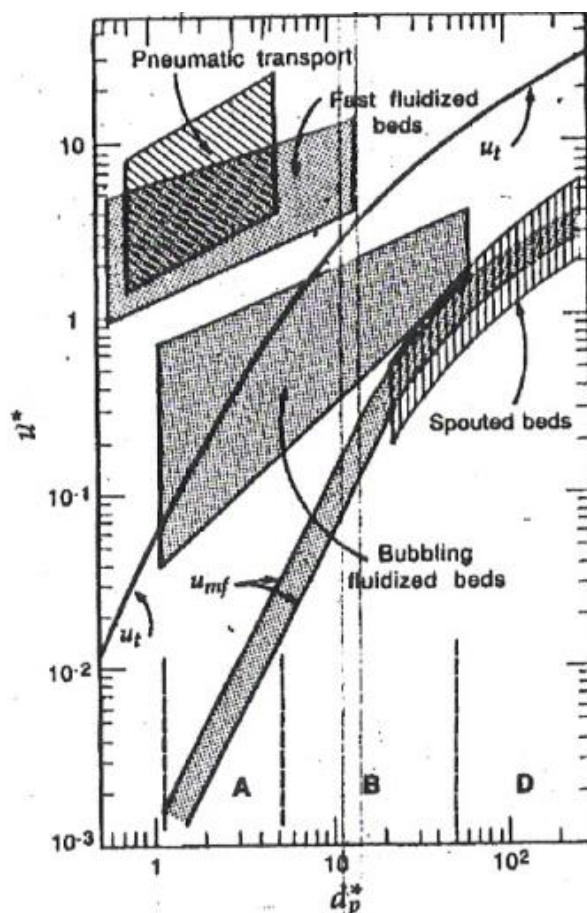
Εικόνα 2.4: Πρότυπα Ρευστοποίησης [2]

Η συμπεριφορά των συστημάτων αερίου-στερεού είναι εν γένη πολύ διαφορετική από αυτή των συστημάτων υγρού στερεού. Με την αύξηση της ταχύτητας του ρευστού πάνω από το όριο της ελάχιστης ρευστοποίησης παρατηρείται η δημιουργία φυσαλίδων και διαδρομές όδευσης του αερίου. Με περαιτέρω αύξηση της ταχύτητας του ρευστού η ανάμειξη στην κλίνη ενισχύεται και η κίνηση των σωματιδίων γίνεται εντονότερη. Η κατάσταση αυτή της κλίνης ονομάζεται **ρευστοποιημένη με φυσαλίδες** (bubbling fluidized bed) και μπορεί να παρατηρηθεί ακόμη και σε συστήματα υγρού-στερεού όταν υψηλής πυκνότητας σωματίδια ρευστοποιούνται από υγρά χαμηλής πυκνότητας.

Αυξάνοντας ακόμη περισσότερο την ταχύτητα του ρευστού, παράλληλα αυξάνεται και η συχνότητα δημιουργίας φυσαλίδων ή οποίες αρχίζουν να ενώνονται μεταξύ τους. Στο στάδιο όπου το μέγεθος των φυσαλίδων γίνεται συγκρίσιμο με την διάμετρο της κλίνης τότε το ύψος της κλίνης παύει να είναι πλέον διακριτό ενώ έντονα ρευστοδυναμικά φαινόμενα αρχίζουν να εκτυλίσσονται. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται **slugging** (flat slug για χονδρόκοκκα σωματίδια και axial slug για λεπτόκοκκα) και μπορεί να αποφευχθεί διατηρώντας ρηχή την κλίνη. Τυπικά εάν ο λόγος του ύψους της κλίνης προς την διάμετρο είναι < 3 το φαινόμενο αυτό δεν παρατηρείται.

Σε κλίνες με ιδιαίτερα λεπτά σωματίδια, για υψηλό ρυθμό παροχής του αερίου, όταν υπάρχει υπέρβαση της τελικής ταχύτητας του σωματιδίου με αποτέλεσμα να μην υπάρχει διακριτή

διαχωριστική επιφάνεια της κλίνης. Σε αυτή την περίπτωση παρατηρείται τυρβώδης κίνηση δομών σωματιδίων και ως εκ τούτου η κλίνη ονομάζεται **τυρβώδης κλίνη**. Υπάρχει πολύ μικρή ροή σωματιδίων που φεύγουν από την κλίνη (entrainment). Με ακόμη μεγαλύτερη αύξηση της ταχύτητας του αερίου, τα σωματίδια παρασύρονται με μεγαλύτερες τιμές ($10 - 1000 \text{ kg/m}^2/\text{s}$) εκτός κλίνης [40]. Η διαδικασία αυτή παρατηρείται από **ταχέως ρευστοποιημένες κλίνες** έως και κλίνες **πνευματικής μεταφοράς των σωματιδίων**. Σε κάθε περίπτωση η ομαλή και σταθερή ανακυκλοφορία των σωματιδίων μέσω κάποιας διάταξης παγίδευσης είναι υψηλής σημασίας για την καλή λειτουργία της κλίνης. Κλίνες με τέτοιου είδους διατάξεις ονομάζονται **ρευστοποιημένες κλίνες ανακυκλοφορίας**.



Εικόνα 2.5: Περιοχές ρευστοποίησης [2]

Η επιλογή του κατάλληλου προτύπου ρευστοποίησης εξαρτάται από την εκάστοτε εφαρμογή της κλίνης. Στην ηλεκτροπαραγωγή ως επί το πλείστον, εφαρμόζονται ταχέως ρευστοποιημένες κλίνες. Αντίθετα σε περιπτώσεις καταλυτικών αντιδράσεων, χρησιμοποιείται το πρότυπο της διογκωμένης κλίνης ή της ομαλά ρευστοποιημένης κλίνης. Ακόμη ένα κριτήριο διάκρισης των κλινών που εφαρμόζονται για καύση, είναι η πίεση λειτουργίας τους σύμφωνα με το οποίο αυτές διακρίνονται σε ατμοσφαιρικές (FBC) και σε υπό πίεση κλίνες (PFBC). Κύριο πλεονέκτημα των υπό πίεση κλινών είναι η παραγωγή υψηλής ενθαλπίας καυσαερίων τα οποία δίνουν την δυνατότητα περαιτέρω εκμετάλλευσής σε διατάξεις συνδυασμένου κύκλου. Στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρούνται οι περιοχές ρευστοποίησης των κλινών συναρτήσει της αδιαστατής ταχύτητας u^* και της αδιαστατής διαμέτρου των σωματιδίων d_p^* .

3 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΜΟΝΤΕΛΟ EMMS

3.1 Περιγραφή μοντέλου EMMS

Το μοντέλο Energy Minimization Multi-Scale analysis (EMMS) αναπτύχθηκε προκειμένου να συμβάλει στη βελτιστοποίηση της περιγραφής και ανάλυσης των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών των πολυφασικών ροών. Ένα μεγάλο μέρος της πολυπλοκότητας της μοντελοποίησης ροών αερίου-στερεού εντός μίας ρευστοποιημένης κλίνης, οφείλεται στην τάση των σωματιδίων της κλίνης να σχηματίζουν “συμπλέγματα σωματιδίων” ή, όπως αναφέρονται στη διεθνή βιβλιογραφία, clusters. Τα συμπλέγματα αυτά σχηματίζονται με κύριο σκοπό την ελαχιστοποίηση της συνολικής ενέργειας που συναλλάσσεται (ανά μονάδα μάζας σωματιδίων) με το περιρρέον ρευστό. Τέτοιου είδους συμπλέγματα σχηματίζονται σε διάφορα μεγέθη και αλληλοεπιδρούν με το εξωτερικό ρεύμα κυρίως ως μεμονωμένες μονάδες. Το γεγονός ότι οι δομές αυτές συμπλεγμάτων μπορούν να έχουν μέγεθος μικρότερο του όγκου ελέγχου ενός μοντέλου προσομοίωσης προσθέτουν στον όγκο αυτό το χαρακτηριστικό της ετερογένειας. Οι χρονικά και χωρικά μη μόνιμες δομές αυτές επηρεάζουν αρκετές παραμέτρους της ροής, σημαντικότερη εκ των οποίων είναι η οπισθέλκουσα δύναμη. Η οπισθέλκουσα δύναμη έχει την μεγαλύτερη επιρροή στο τελικό αποτέλεσμα της διαδικασίας προσομοίωσης. Για τον λόγο αυτό, είναι ιδιαίτερα σημαντική η ακριβέστερη διατύπωσή της. Η προσέγγιση του μοντέλου EMMS βασίζεται σε τρεις κυρίαρχους μηχανισμούς από τους οποίους εξαρτάται η ανάλυση των πολυφασικών ροών στερεού αερίου όπως αυτοί εισήχθησαν από τον Li [14].

Στον πρώτο μηχανισμό παρατηρείται κυριαρχία της ροής σωματιδίων έναντι της ροής ρευστού (Particle Dominated-PD). Στον μηχανισμό αυτό η ανοδική πορεία του ρευστού δεν επηρεάζεται. Οι σταθερές κλίνες αποτελούν ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα του μηχανισμού αυτού. Στον δεύτερο μηχανισμό η ροή του ρευστού υπερισχύει (Fluid-Dominated-FD) με αποτέλεσμα να ασκεί δύναμη στα σωματίδια τέτοια ώστε αυτά να αναγκάζονται να ακολουθήσουν την ανοδική του πορεία. Ο μηχανισμός αυτός συναντάται σε περιπτώσεις πνευματικής μεταφοράς σωματιδίων. Ο τρίτος μηχανισμός αποτελεί μια δυναμική “ισορροπία” των δύο προηγούμενων μηχανισμών. Στην περίπτωση αυτή, κάτω από κατάλληλες συνθήκες όπως αυτές που επικρατούν κατά την ρευστοποίηση της κλίνης, δεν παρατηρείται κυριαρχία των σωματιδίων ή του ρευστού παρά ένας συγκερασμός των δύο παραπάνω.

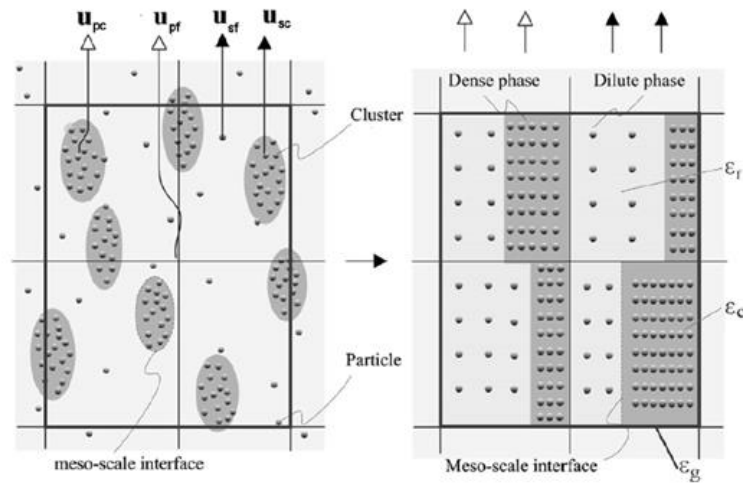
Με βάση τα παραπάνω, ακόμη και στην κλίμακα ενός μεμονωμένου όγκου ελέγχου, δύναται να συνυπάρξουν τρεις διαφορετικές φάσεις:

- Η αραιή φάση (dilute phase), όπου παρατηρείται κυριαρχία της ροής ρευστού (FD)
- Η πυκνή φάση (dense phase), στην οποία κυριαρχεί η ροή σωματιδίων (PD)
- Η φάση αλληλεπίδρασης (inter-phase), που ορίζεται από τη διεπιφάνεια των άλλων δύο

Με αυτό τον τρόπο η συνολική δύναμη της πολυφασικής ροής προκύπτει από τις τρεις επιμέρους συνιστώσες, μία για κάθε μία από τις παραπάνω φάσεις [41].

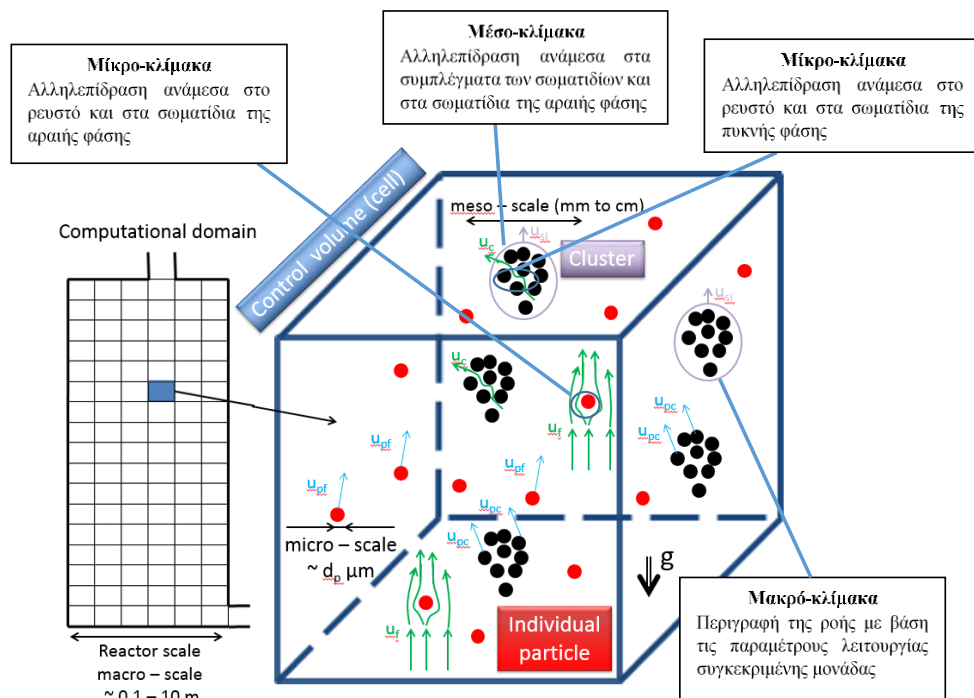
Επομένως, το μοντέλο EMMS καλείται να περιγράψει με όσο το δυνατό μεγαλύτερη ακρίβεια το σχηματισμό και την αλληλεπίδραση των παραπάνω φάσεων. Για το σκοπό αυτό, εισάγει τρεις

διαφορετικές κλίμακες ανάλυσης κάθε όγκου ελέγχου [14]. Οι κλίμακες αυτές είναι η μικρο-κλίμακα (micro-scale), η μεσαία κλίμακα (meso-scale) και η μακρο-κλίμακα (macro-scale).



Εικόνα 3.1: Απεικόνιση φάσεων εντός των όγκων ελέγχου

Στην πρώτη κλίμακα εξετάζονται και επιλύονται οι εξισώσεις της αραιής και της πυκνής φάσης. Στην δεύτερη κλίμακα εξετάζεται και επιλύονται οι εξισώσεις της φάσεις αλληλεπίδρασης, όπου οι δομές συμπλεγμάτων θεωρούνται ενιαίες με δυνατότητα αλληλεπίδρασης με την αραιή φάση. Τέλος στην Τρίτη κλίμακα εξετάζεται και επιλύονται οι εξισώσεις της συνολικής ροής στέρεου-αερίου εντός της εκάστοτε θεωρούμενης γεωμετρίας και παραμέτρων λειτουργίας της κλίνης.



Εικόνα 3.2: Όγκος ελέγχου

Η εφαρμογή του μοντέλου EMMS πραγματοποιείται μέσω της κατάστρωσης και επίλυσης ενός συστήματος αναλυτικών, εμπειρικών και ημι-εμπειρικών εξισώσεων με στόχο την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης συναλλασσόμενης, μεταξύ σωματιδίων και ρευστού, ενέργειας N_{st} κατά την αλληλεπίδραση τους στις τρεις φάσεις (αραιή, πυκνή και αλληλεπίδρασης). Πρόκειται επι της ουσίας για ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με συνάρτηση ελαχιστοποίησης την συναλλασσόμενη ενέργεια μεταξύ ρευστού και σωματιδίων. Το αποτέλεσμα της παραπάνω βελτιστοποίησης είναι η εύρεση του συντελεστή ετερογένειας H_d του όγκου ελέγχου ο οποίος ενσωματώνεται στη σχέση των Wen και Yu και εκφράζει την ανομοιογένεια στην διάταξη της στερεάς φάσης σε κάθε όγκο ελέγχου.

$$H_d = \frac{F_{Wen\&Yu}}{F_{EMMS}} \quad (3.1)$$

Η εισαγωγή του συντελεστή ανομοιογένειας, ο οποίος αμελείται από τα κλασσικά μοντέλα υπολογισμού της οπισθέλκουσας δύναμης, με σημαντικότερο από αυτά το μοντέλο του Gidaspow [18], αποτελεί σημαντική βελτίωση ως προς την ακρίβεια των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης της ροής.

3.2 Εξισώσεις μοντέλου EMMS

Οι εξισώσεις του συστήματος [42], περιγράφουν την ισορροπία δυνάμεων του όγκου ελέγχου σε πυκνή και αραιή φάση, την πτώση πίεσης ανάμεσα σε αραιή φάση και της δομές συμπλεγμάτων, τους ισολογισμούς μάζας του αερίου και των σωματιδίων καθώς και πρόσθετες εξισώσεις προσδιορισμού ορισμένων βασικών παραμέτρων [43].

Ισορροπία δυνάμεων στην πυκνή περιοχή:

$$\frac{3}{4} C_{dc} \frac{f(1 - \varepsilon_c)}{d_p} \rho_g U_{sc}^2 + \frac{3}{4} C_{di} \frac{f}{d_{cl}} \rho_g U_{si}^2 = f(1 - \varepsilon_c)(\rho_s - \rho_g)(g + a_c) \quad (3.2)$$

Ισορροπία δυνάμεων στην αραιή περιοχή:

$$\frac{3}{4} C_{df} \frac{(1 - f)(1 - \varepsilon_f)}{d_p} \rho_g U_{sf}^2 = (1 - f)(1 - \varepsilon_f)(\rho_s - \rho_g)(g + a_f) \quad (3.3)$$

Πτώση πίεσης μεταξύ συμπλεγμάτων και αραιής φάσης

$$C_{df} \frac{(1 - \varepsilon_f)}{d_p} \rho_g U_{sf}^2 + \frac{f}{1 - f} C_{di} \frac{\rho_g U_{si}^2}{d_{cl}} = C_{dc} \frac{(1 - \varepsilon_c)}{d_p} \rho_g U_{sc}^2 \quad (3.4)$$

Διατήρηση μάζας αερίου:

$$U_g = U_f(1 - f) + U_c f \quad (3.5)$$

Διατήρηση μάζας σωματιδίων:

$$U_s = U_{pf}(1 - f) + U_{pc}f \quad (3.6)$$

Κλάσμα κενού:

$$\varepsilon_g = f\varepsilon_c + (1 - f)\varepsilon_f \quad (3.7)$$

$$\varepsilon_g + \varepsilon_s = 1 \quad (3.8)$$

Στις παραπάνω εξισώσεις, για κάθε όγκο ελέγχου, ως f ορίζεται ο λόγος του όγκου της πυκνής φάσης προς τον όγκο ελέγχου, ως ε_c το κλάσμα κενού στην πυκνή φάση και ως ε_f το κλάσμα κενού στην αραιή φάση.

Για τον υπολογισμό του συντελεστή οπισθέλκουσας σε κάθε φάση εφαρμόζονται οι παρακάτω σχέσεις.

	Πυκνή Φάση	Αραιή Φάση	Φάση Αλληλεπίδρασης
Συντελεστής οπισθέλκουσας	$C_{dc} = C_{doc}\varepsilon_c^{-4.8}$	$C_{df} = C_{dof}\varepsilon_f^{-4.8}$	$C_{di} = C_{oi}(1-f)^{-4.8}$
Στατικός συντελεστής οπισθέλκουσας ¹	$C_{doc} = \frac{24}{Re_c} + \frac{3.6}{Re_c^{0.313}}$	$C_{dof} = \frac{24}{Re_f} + \frac{3.6}{Re_f^{0.313}}$	(3.9)
Χαρακτηριστικός αριθμός Reynolds	$Re_c = \frac{\rho_g d_p U_{sc}}{\mu_g}$	$Re_f = \frac{\rho_g d_p U_{sf}}{\mu_g}$	-
Φαινόμενη ταχύτητα ολίσθησης	$U_{sc} = U_c - \frac{\varepsilon_c U_{pc}}{1 - \varepsilon_c}$	$U_{sf} = U_f - \frac{\varepsilon_f U_{pf}}{1 - \varepsilon_f}$	$U_{si} = (U_f - \frac{\varepsilon_f U_{pc}}{1 - \varepsilon_c})(1 - f)$
Οπισθέλκουσα δύναμη	$F_c = C_{dc} \frac{\pi d_p^2 \rho_g}{4} \frac{U_{sc}^2}{2}$	$F_f = C_{df} \frac{\pi d_p^2 \rho_g}{4} \frac{U_{sf}^2}{2}$	$F_i = C_{di} \frac{\pi d_{cl}^2 \rho_g^*}{4} \frac{U_{si}^2}{2}$
Αριθμός σωματιδίων ή clusters σε έναν όγκο ελέγχου	$m_c = \frac{f(1 - \varepsilon_c)}{\pi d_p^3 / 6}$	$m_f = \frac{(1 - f)(1 - \varepsilon_f)}{\pi d_p^3 / 6}$	$m_f = \frac{f}{\pi d_{cl}^3 / 6}$

Πίνακας 3.1: Συμπληρωματικές εξισώσεις μοντέλου EMMS

Ο στατικός συντελεστής οπισθέλκουσας για την φάση αλληλεπίδρασης ορίζεται ως εξής [44]:

$$Cd_{oi} = \begin{cases} f_i \frac{432}{Ar_{cl}} & \text{για } 0 < Ar_{cl} < 36 \\ f_i \frac{56,9}{Ar_{cl}^{0,4242}} & \text{για } 36 < Ar_{cl} < 83750 \\ 0,44f_i & \text{για } 83750 < Ar_{cl} \end{cases} \quad (3.9)$$

Ο αριθμός του Αρχιμήδη για τις δομές συμπλεγμάτων δίνεται από την σχέση:

$$Ar_{cl} = \frac{d_{cl}^3 g \rho_g^* (\rho_s^* - \rho_g^*)}{\mu_g^{*2}} \quad (3.10)$$

Όπου [45]:

$$\rho_g^* = \varepsilon_f \rho_g + (1 - \varepsilon_f) \rho_s \quad (3.11)$$

$$\rho_s^* = \varepsilon_c \rho_g + (1 - \varepsilon_c) \rho_s \quad (3.12)$$

$$\mu_g^* = \mu_g (1 + 2.5(1 - \varepsilon_f)) \quad (3.13)$$

Μια ιδιαίτερα σημαντική παράμετρος της εφαρμογής του EMMS είναι ο υπολογισμός της διαμέτρου των συμπλεγμάτων. Η διάμετρος των συμπλεγμάτων επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό την τελική τιμή του δείκτη ετερογένειας H_d . Παρόλα αυτά ο ακριβής προσδιορισμός της διαμέτρου των συμπλεγμάτων δεν είναι εύκολος καθώς οι δομές αυτές τείνουν να μεταβάλλονται κάθε χρονικής στιγμή ενώ παράλληλα η συμπεριφορά τους αλλάζει ανάλογα ακόμη και με τον αν βρίσκονται κοντά στα τοιχώματα της κλίνης ή στον πύρινα της. Για τον υπολογισμό της χρησιμοποιείται η μεθοδολογία που εφαρμόστηκε στην εργασία της Zeneli M. [42] στην οποία χρησιμοποιήθηκαν δύο διαφορετικές εξισώσεις. Η πρώτη, η οποία προτάθηκε από τους Li και Kwauk στο [22], είναι η εξής:

$$D_{cl} = \frac{d_p \left[\frac{U_s}{(1 - \varepsilon_{max})} - \left(U_{mf} + \frac{\varepsilon_{mf} U_s}{(1 - \varepsilon_{mf})} \right) \right] g}{\frac{N_{st} \rho_s}{(\rho_s - \rho_g)} - \left(U_{mf} + \frac{\varepsilon_{mf} U_s}{(1 - \varepsilon_{mf})} \right) g} \quad (3.14)$$

Η παραπάνω σχέση εμπεριέχει σημαντικές παραμέτρους της ροής. Παρόλα αυτά δεν λαμβάνει υπόψιν τον γεωμετρικό περιορισμό που προκύπτει λόγω της διαμέτρου της κλίνης. Ο περιορισμός αυτός λαμβάνεται υπόψιν στην δεύτερη σχέση, η οποία προτάθηκε από τον Subbarao στο [44] και είναι η εξής:

$$D_{cl} = D_V \left(\frac{f}{1 - f} \right)^{\frac{1}{2}} + d_p \quad (3.15)$$

Όπου D_V το μέγεθος του κενού (αραιής φάσης) της κλίνης το οποίο υπολογίζεται από την σχέση:

$$D_V = \frac{2u_t^2}{g} \left(1 + \frac{u_t^2}{u_{sr}^2} \right)^{-1} \quad (3.16)$$

Συνδυάζοντας τις δύο παραπάνω σχέσεις, για τον υπολογισμό της διαμέτρου των συσσωματωμάτων επιλέγεται η σχέση που δίνει την μικρότερη τιμή.

$$D_{cl} = \text{Min}(D_{cl,Subbarao}, D_{cl,Li\&Kwauk}) \quad (3.17)$$

Μία ακόμη ημι-εμπειρική σχέση χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του κλάσματος κενού της πυκνής φάσης ε_c [43], σύμφωνα με την οποία:

$$\varepsilon_c = \varepsilon_g - n\sigma_\varepsilon \quad (3.18)$$

Στην οποία ο αριθμός n επιλέγεται να είναι ίσος με 3.

Η σχέση αυτή προκύπτει από τη θεώρησή ότι το σύμπλεγμα των σωματιδίων αρχίζει να γίνεται διακριτό, όταν η τοπική συγκέντρωση των σωματιδίων σε αυτό γίνει n φορές μεγαλύτερη κατά την τυπική απόκλιση σ_E από την ολική συγκέντρωση των σωματιδίων εντός του όγκου ελέγχου [28]. Η τυπική απόκλιση του κλάσματος κενού της πυκνής φάσης σ_ε υπολογίζεται με χρήση της κατανομής Poisson ως εξής:

$$\sigma_\varepsilon = \varepsilon_s \sqrt{\frac{(1 - \varepsilon_s)^4}{1 + 4\varepsilon_s + 4\varepsilon_s^2 - 4\varepsilon_s^3 + \varepsilon_s^4}} \quad (3.19)$$

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η απαιτούμενη συνθήκη του προβλήματος βελτιστοποίησης του μοντέλου EMMS είναι η ελαχιστοποίηση της συνολικά εναλλασσόμενης ενέργειας μεταξύ σωματιδίων και αερίου. Η ενέργεια αυτή αποτελείται από το άθροισμα τριών επιμέρους συνιστωσών, μία για κάθε φάση (αραιή, πυκνή και αλληλεπίδρασης) και ορίζεται ως:

$$N_{st} = \frac{1}{(1 - \varepsilon_g)\rho_s} [m_f F_f U_f + m_c F_c U_c + m_i F_i U_f (1 - f)] \rightarrow \min \quad (3.20)$$

Το παραπάνω πρόβλημα συμπληρώνεται από μία σειρά περιορισμών οι οποίοι εξασφαλίζουν ότι οι τιμές των παραμέτρων του προβλήματος παραμένουν ρεαλιστικές και εντός του πεδίου ορισμού τους. Αυτοί είναι [42]:

Για την επιτάχυνση και το κλάσμα κενού στην πυκνή και αραιή περιοχή:

$$\alpha_f > 0$$

$$\alpha_c > 0$$

$$\varepsilon_g < \varepsilon_f \leq \varepsilon_{max}$$

$$\varepsilon_{mf} \leq \varepsilon_c < \varepsilon_g$$

Ακόμη εφαρμόζεται ο περιορισμός της θετικής ταχύτητας ολίσθησης σε κάθε φάση προκειμένου να εξασφαλιστεί ότι η ταχύτητα του αερίου είναι μεγαλύτερη από την ταχύτητα των σωματιδίων προκειμένου να αποφευχθεί η καθοδική πορεία των σωματιδίων.

$$U_{sf} > 0$$

$$U_{sc} > 0$$

$$U_{si} > 0$$

Τέλος, εφαρμόζεται ο παρακάτω περιορισμός όπου θέτει ένα όριο στην ταχύτητα ολίσθησης της αραιής φάσης η οποία δεν μπορεί να ξεπεράσει την τιμή της οριακής ταχύτητας.

$$\frac{U_{sf}}{\varepsilon_f} < U_t$$

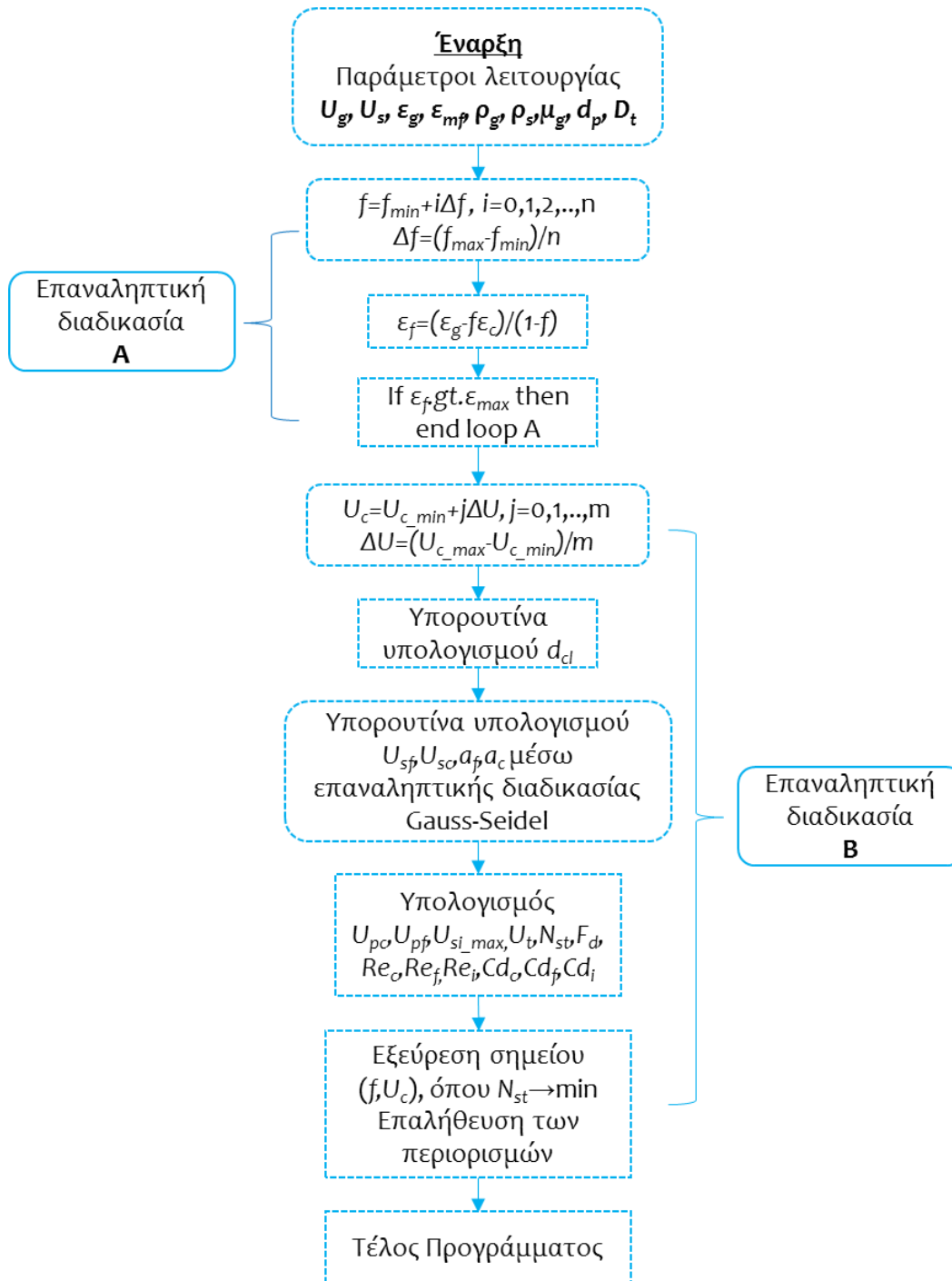
3.3 Εφαρμογή μοντέλου EMMS με χρήση κώδικα Fortran

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας Fortran ο οποίος αναπτύχθηκε στην εργασία της Zeneli M [42], προκειμένου να υπολογισθούν οι συντελεστές ετερογένειας συναρτήσει της ταχύτητας ολίσθησης (u_{slip}) και του κλάσματος κενού (ε_g). Ο κώδικας εφαρμόζεται για κάθε περίπτωση κλίνης ξεχωριστά όπου οι παράμετροι λειτουργίας ρ_g (πυκνότητα αερίου), ρ_s (πυκνότητα σωματιδίου), μ_g (ιξώδες αερίου), d_p (διάμετρος σωματιδίων) και D_t (διάμετρος κλίνης) θεωρούνται σταθερές σε όλο το μήκος της κλίνης. Ο συγκεκριμένος κώδικας εκτελεί δύο εξωτερικές επαναλήψεις στις οποίες σαρώνονται οι τιμές των παραμέτρων του u_{slip} και ε_g για συγκεκριμένα όρια. Για κάθε σετ τιμών επιλύεται το σύστημα μη γραμμικών εξισώσεων που αναφέρθηκε παραπάνω. Το σύστημα έχει βαθμό αοριστίας 2 ενώ για την επίλυση του χρησιμοποιείται η επαναληπτική μέθοδος Gauss-Seidel. Στην συνέχεια τα αποτελέσματα της επίλυσης του προβλήματος βελτιστοποίησης, δηλαδή οι υπολογισμένοι συντελεστές ανομοιογένειας, παρεμβάλλονται πολυωνμικά και τα πολυώνυμα που προκύπτουν εισάγονται στο Fluent μέσω User Defined Function (UDF) προκειμένου να προσδιοριστούν οι αντίστοιχοι συντελεστές σε κάθε όγκο ελέγχου της κλίνης ξεχωριστά και να συνεχιστεί η ανάλυση CFD της κλίνης. Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται η διαδικασία με την οποία εφαρμόζεται ο παραπάνω κώδικας.



Εικόνα 3.3: Σχηματικής περιγραφή εφαρμογής EMMS

Παρακάτω ακολουθεί το διάγραμμα ροής του κώδικα.



Εικόνα 3.4: Διάγραμμα ροής κώδικα Fortran

4 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

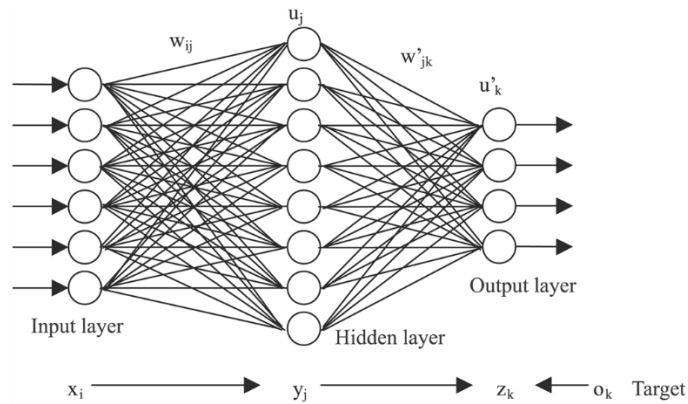
4.1 Περιγραφή τεχνητών νευρωνικών δικτύων

Η ανάπτυξη των νευρωνικών δικτύων προέκυψε τα τελευταία χρόνια από την προσπάθεια αποκωδικοποίησης του τρόπου λειτουργίας του ανθρώπινου εγκεφάλου και πιο συγκεκριμένα την ικανότητα του να "εκπαιδεύεται" στην επίλυση προβλημάτων. Υπάρχουν κάποιες κατηγορίες προβλημάτων, όπως για παράδειγμα η αναγνώριση αντικειμένων ή καταστάσεων και ο συσχετισμός αυτών, όπου η επίλυσή τους με χρήση συμβατικών αλγορίθμων είναι είτε αδύνατη είτε απαιτεί ιδιαίτερη υψηλή υπολογιστική και αποθηκευτική ισχύ. Παρόλα αυτά ο ανθρώπινος εγκέφαλος, έχει την δυνατότητα να προσεγγίζει και να εκτίμα την απάντηση τέτοιου είδους προβλημάτων σε πολύ σύντομο χρονικό διάστημα συνεκτιμώντας όλες εκείνες τις παραμέτρους που μπορεί να την επηρεάζουν. Για τον σκοπό αυτό επιστρατεύει την εμπειρία και την γνώση που έχει αποκτήσει από την ενασχόληση με παρόμοια προβλήματα στο παρελθόν. Το κίνητρο για την μελέτη των τεχνητών νευρωνικών δικτύων είναι η ομοιότητα της δομής τους με αυτήν των επιτυχημένων βιολογικών συστημάτων όπως ο ανθρώπινος εγκέφαλος τα οποία αποτελούνται από απλούς μεν αλλά πολλαπλούς νευρώνες που δύναται να εργάζονται μαζικά και παράλληλα (αυτή είναι ίσως και η πιο σημαντική ικανότητά τους) και έχουν την ικανότητα να "εκπαιδεύονται" και να "μαθαίνουν". Η μελέτη και η ανάπτυξη των τεχνητών νευρωνικών δικτύων ξεκίνησε στις αρχές της δεκαετίας του 1940 και είναι σχεδόν ταυτόχρονη με πορεία των ηλεκτρονικών υπολογιστών. Μερικοί εκ των σπουδαιότερων ερευνητών που συνέβαλαν στην εξέλιξη του συγκεκριμένου πεδίου είναι οι John von. Neumann, Donald O. Hebb, Marvin Minsky, Bernard Widrow, Seymour Papert, Teuvo Kohonen και John Hopfield και πολλοί άλλοι ακόμη ακαδημαϊκοί και μη [46].

Όπως προαναφέρθηκε η δομή ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου αντιγράφει, κατά τον βέλτιστο δυνατό τρόπο εκείνη ενός βιολογικού νευρωνικού δικτύου έτσι ώστε να προσομοιάζει τις ιδιότητές του [47]. Στα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα όπως το νευρικό σύστημα του ανθρώπινου σώματος, οι νευρώνες είναι το βασικό δομικό στοιχείο. Οι νευρώνες λαμβάνουν ως είσοδο ηλεκτρικά σήματα από διάφορους αισθητήρες του σώματος (που προκύπτουν από ερεθίσματα όπως η όραση, η ακοή, η όσφρηση, η αφή και η γεύση) τα συνδυάζουν με κατάλληλο τρόπο και εφαρμόζουν σε αυτά μια γενικά μη γραμμική διαδικασία προκειμένου να παράγουν το τελικό αποτέλεσμα [48]. Το αποτέλεσμα έχει και αυτό την μορφή ηλεκτρικού σήματος το οποίο, μέσω του νευρικού συστήματος κατευθύνεται στα κατάλληλα σημεία του σώματος προκειμένου να αντιδράσουν στο ερέθισμα το οποίο δέχθηκε το σώμα. Ο τρόπος με τον οποίο οι νευρώνες θα διαχειριστούν το σήμα εισόδου εξαρτάται από την δομή τους αλλά και από την συχνότητα με την οποία καλούνται να εκτελέσουν την συγκεκριμένη διαδικασία. Με αυτό τον τρόπο το σύστημα αποκτά την ικανότητα της μάθησης έτσι ώστε δίδοντάς του συγκεκριμένες εισόδους να προσαρμόζει την δομή του κατάλληλα ώστε να παράγει το επιθυμητό αποτέλεσμα. Μία ιδιαίτερα σημαντική παράμετρος του συγκεκριμένου συστήματος μάθησης είναι η ικανότητά του να γενικεύει του κανόνες που δημιουργεί για την επεξεργασία συγκεκριμένων εισόδων και να τους εφαρμόζει για να λύσει παρόμοια προβλήματα τα οποία δεν έχει κληθεί ποτέ να αντιμετωπίσει στο παρελθόν.

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα αποτελούνται από πολλαπλούς νευρώνες. Κάθε νευρώνας αποτελείται από τρία βασικά στοιχεία τα οποία αλληλοεπιδρούν μεταξύ τους σχηματίζοντας το

βασικό δομικό στοιχείο ενός νευρωνικού δικτύου. Τα στοιχεία αυτά είναι ο κόμβος άθροισης, η συνάρτηση ενεργοποίησης και η τιμή κατωφλίου. Τα στοιχεία αυτά επικοινωνούν μεταξύ τους με διάφορους διαύλους από τους οποίους εισέρχονται τα σήματα εισόδου, πολλαπλασιάζονται από τα αντίστοιχα συναπτικά βάρη (w_{ij}) και εξέρχονται τα αποτελέσματα της επεξεργασίας [49]. Όπως έχει επικρατήσει μετά από αρκετές μελέτες, οι νευρώνες που απαρτίζουν το νευρωνικό δίκτυο μπορούν να ταξινομηθούν χρησιμοποιώντας ένα σύστημα επιπέδων το οποίο στην απλούστερη μορφή του αποτελείται από τρία επίπεδα, ένα επίπεδο εισόδου, ένα (ή περισσότερα ανάλογα με το πρόβλημα) κρυφό επίπεδο και ένα επίπεδο εξόδου όπως φαίνεται στο Εικόνα 4.1 [50]. Σε ένα τέτοιο δίκτυο η ροή της πληροφορίας γίνεται πάντα από τα αριστερά προς τα δεξιά και δεν υπάρχει κάποιος βρόγχος ανάδρασης. Θεωρούμε επίσης ότι οι νευρώνες σε κάθε επίπεδο αλληλοεπιδρούν μόνο με εκείνους τους νευρώνες που ανήκουν στα άμεσα γειτονικά τους επίπεδα. Επομένως η πληροφορία του επιπέδου εισόδου (input layer) κατευθύνεται προς το πρώτο κρυφό επίπεδο. Αφού περάσει από αυτό κατευθύνεται προς τα επόμενα κρυφά επίπεδα αν υπάρχουν ή προς το επίπεδο εξόδου. Τα δίκτυα αυτής της μορφής ονομάζονται δίκτυα πολυεπίπεδου αισθητήρα ή MLP.



Εικόνα 4.1: Διάγραμμα δομής νευρωνικού δικτύου [51]

4.1.1 Νευρώνας δικτύου

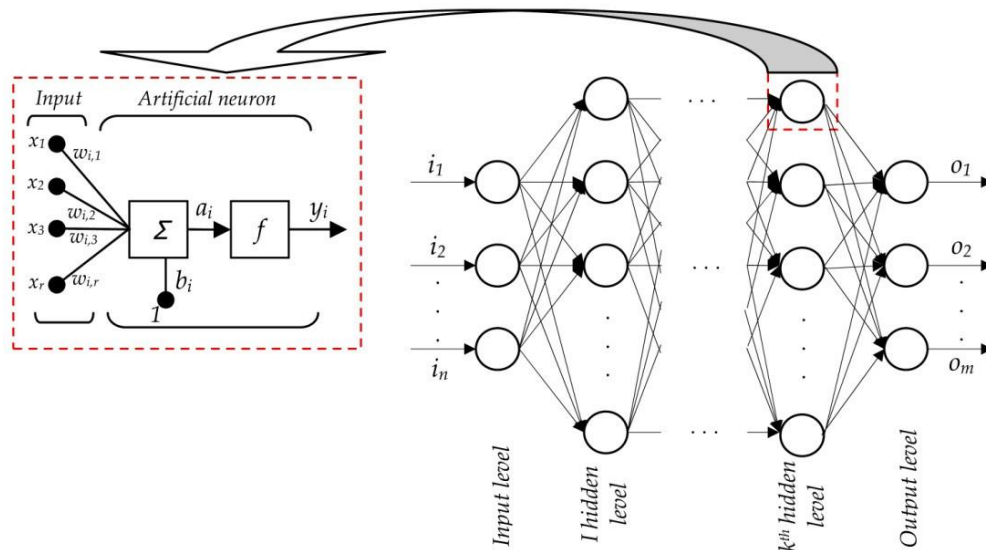
Στην Εικόνα 4.2 φαίνεται η δομή ενός τυπικού νευρώνα που χρησιμοποιείται κατά κόρον σε τεχνητά νευρωνικά δίκτυα και είναι το βασικό στοιχείο ενός νευρωνικού δικτύου το οποίο επεξεργάζεται την πληροφορία που δέχεται. Ο νευρώνας δέχεται ένα ή περισσότερα σήματα εισόδου, τα οποία πολλαπλασιάζονται σε πρώτη φάση με τα αντίστοιχα συναπτικά βάρη (w_{ij}) και προστίθεται η σταθερή τιμή (για κάθε νευρώνα) κατωφλίου (bias). Τα παραπάνω αθροίζονται στον αθροιστή του νευρώνα και το αποτέλεσμα αποτελεί το ονομαζόμενο τοπικό πεδίο. Τα συναπτικά βάρη αντιπροσωπεύουν την επιρροή της κάθε μεταβλητής εισόδου στο τελικό αποτέλεσμα και η τιμή τους, όπως και η τιμή κατωφλίου, για κάθε νευρώνα αποτελεί απόρροια της διαδικασίας εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου. Για λόγους απλούστευσης θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε ότι η τιμή κατωφλίου είναι το συναπτικό βάρος μίας νέας εισόδου με σταθερή τιμή 1. Το παραπάνω αποτέλεσμα του αθροίσματος οδηγείται στη συνέχεια στην συνάρτηση ενεργοποίησης όπου φιλτράρεται και προκύπτει η έξοδος ή οι εξοδοί του νευρώνα. Η έξοδος ενός νευρώνα i περιγράφεται μαθηματικά ως εξής. Θεωρώντας r σήματα εισόδου x_j και w_{ij} και b_i τα αντίστοιχα συναπτικά τους βάρη και την τιμή κατωφλίου προσδιορίζουμε την είσοδο της συνάρτησης ενεργοποίησης. Αυτή είναι

$$a_i = \sum_{j=1}^r x_j w_{ij} + b_i \quad (4.1)$$

Η συνάρτηση ενεργοποίησης f μπορεί να είναι, ανάλογα με την εφαρμογή είτε γραμμική είτε μη γραμμική. Έτσι προκύπτει η τελική έξοδος του νευρώνα η οποία είναι

$$y_i = f(a_i) \quad (4.2)$$

Η έξοδος αυτή μπορεί είτε να αποτελεί είσοδο σε επόμενο νευρώνα είτε να είναι η τελική έξοδος του νευρωνικού δικτύου [52]. Η συνάρτηση ενεργοποίησης μετασχηματίζει τις τιμές εισόδου του νευρώνα σε έξοδο με προκαθορισμένο εύρος τιμών ικανό να αντιπροσωπεύσει την επίδραση ενός συνδυασμού σημάτων εισόδου στην έξοδο του νευρώνα. Στην απλούστερη μορφή της μπορεί να είναι μία βηματική συνάρτηση η οποία παίρνει την τιμή 0 για τιμές εισόδου κάτω από ένα συγκεκριμένο όριο και την τιμή 1 για εισόδους πάνω από το όριο αυτό. Με αυτόν τον τρόπο ο νευρώνας παραμένει ανενεργός για σήματα εισόδου με τιμή κάτω από το προαναφερθέν όριο και πλήρως ενεργός για τιμές σημάτων εισόδου μεγαλύτερες του ορίου αυτού. Παρόλα αυτά η λογική της συγκεκριμένης συνάρτησης ενεργοποίησης έχει το μειονέκτημα της απότομης αλλαγής της κατάστασης του νευρώνα γύρω από το όριο της τιμής του σήματος εισόδου, επιτρέποντας μόνο δύο πιθανές καταστάσεις (ενεργός-ανενεργός) και καμία ενδιάμεση.

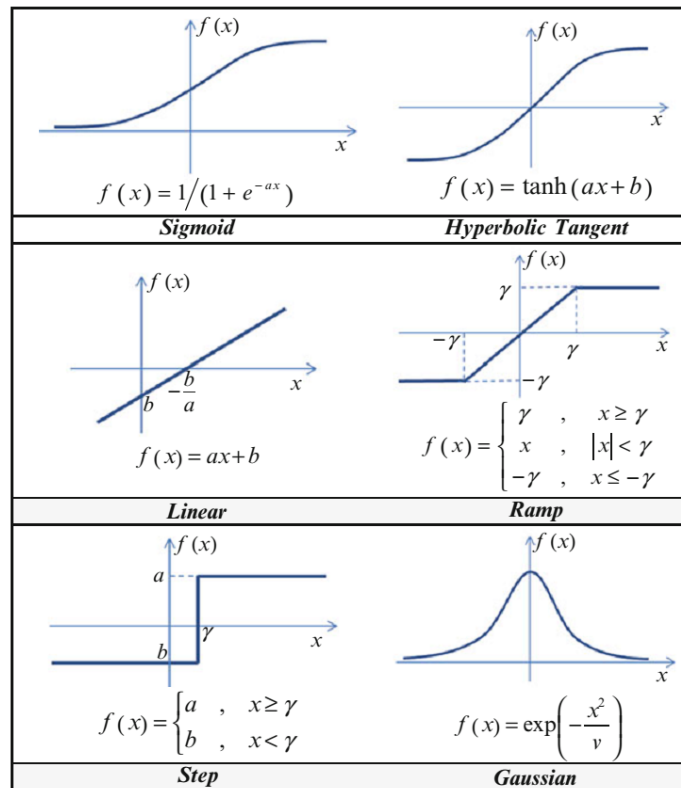


Εικόνα 4.2: Δομή στοιχειώδους νευρώνα δικτύου [53]

Το παραπάνω μειονέκτημα μπορεί να αντιμετωπιστεί με την χρήση μίας γραμμικής συνάρτησης ενεργοποίησης η οποία μπορεί να αντιστοιχίσει το σήμα εισόδου με την έξοδο διατηρώντας μία συγκεκριμένη αναλογία και επιτρέποντας στο σήμα εξόδου να παίρνει τιμές από ένας συνεχές εύρος τιμών. Παρόλου που η γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης λύνει το πρόβλημα της ασυνέχειας, δεν ενδείκνυται για τον προσδιορισμός μη γραμμικών καμπυλών, όπως για παράδειγμα οι ημιτονοειδής καμπύλες, αφού δεν μπορούν να προσδιορίσουν με ικανοποιητική λεπτομέρεια την καμπυλότητά τους. Το συγκεκριμένο πρόβλημα αντιμετωπίστηκε με την εφαρμογή μη γραμμικών, συνεχών και διαφορίσιμων συναρτήσεων, όπως είναι οι σιγμοειδής συναρτήσεις, με εύρος τιμών $[-1,1]$. Οι πλέον χρησιμοποιούμενες σιγμοειδής συναρτήσεις ενεργοποίησης είναι η λογαριθμική και η υπερβολική

εφαπτομενική συνάρτηση με εύρος $[0,1]$ και $[-1,1]$ αντίστοιχα. Άλλες συναρτήσεις που χρησιμοποιούνται λιγότερο συχνά είναι η συνάρτηση ράμπας, η Γκαουσιανή και η συνάρτηση τόξου εφαπτομένης [49].

Αν και στις εφαρμογές τεχνητών νευρωνικών δικτύων για την πρόβλεψη έντονα μη γραμμικών φαινομένων έχει επικρατήσει η χρήση των σιγμοειδών συναρτήσεων ενεργοποίησης [54], όπως της λογαριθμικής και της υπερβολικής εφαπτομενικής, δεν υπάρχει σαφής προσδιορισμός για το ποια από τις δύο είναι καταλληλότερη για κάθε περίπτωση. Παρόλα αυτά, ως ιδανικότερη συνάρτηση ενεργοποίησης θα μπορούσε να θεωρηθεί η υπερβολική εφαπτομενική συνάρτηση [55]. Σύμφωνα με την μελέτη [56], όσο πιο σύνθετο και μη γραμμικό είναι το πρόβλημα στο οποίο το νευρωνικό δίκτυο καλείται να εκπαιδευτεί, τόσο πιο εμφανή είναι τα πλεονεκτήματα της υπερβολικής εφαπτομενικής συνάρτησης. Τα πλεονεκτήματα αυτά οφείλονται σε δύο βασικές διαφορές της λογαριθμικής σιγμοειδούς με την υπερβολική εφαπτομενική συνάρτηση. Αυτές είναι η μεγαλύτερη κλίση της υπερβολικής εφαπτομενικής συνάρτησης η οποία προσδίδει την ικανότητα στην συνάρτηση να αποκρίνεται πολύ καλύτερα σε μικρές διαφοροποιήσεις της μεταβλητής εισόδου, κάτι που θεωρείται αρκετά σημαντικό για τον προσδιορισμό μη γραμμικών σχέσεων, και το μεγαλύτερο εύρος τιμών εξόδου που περιλαμβάνουν και αρνητικές τιμές. Τα παραπάνω χαρακτηριστικά καθιστούν τις σιγμοειδείς συναρτήσεις ιδανικές για προβλήματα προσδιορισμού συνάρτησης με την υπερβολική εφαπτομένη να πλεονεκτεί σε περιπτώσεις έντονων μη γραμμικών φαινομένων. Στην Εικόνα 4.3 που ακολουθεί φαίνονται οι συναρτήσεις ενεργοποίησης που αναφέρθηκαν παραπάνω όπως αυτές παρουσιάζονται στο [57].



Εικόνα 4.3: Συνήθεις συναρτήσεις ενεργοποίησης [57]

4.2 Εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου

Όπως έχει είδη αναφερθεί, το πιο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό των νευρωνικών δικτύων είναι η ικανότητά τους να οικειοποιούνται με διάφορα προβλήματα μέσω της εκπαίδευσής τους και στη συνέχεια να έχουν την δυνατότητα να επιλύουν, άγνωστα μέχρι στιγμής, παρόμοια προβλήματα. Η προσέγγιση αυτή αναφέρεται ως γενίκευση. Στη συνέχεια θα αναφερθούν ορισμένες βασικές αρχές των διαδικασιών εκπαίδευσης. Ο όρος της εκπαίδευσης είναι ιδιαίτερα σύνθετος. Περιγράφει την διαδικασία κατά την οποία ένα σύστημα αλλάζει τον εαυτό του με σκοπό να προσαρμοστεί σε ορισμένες συνθήκες. Ένα νευρωνικό σύστημα θα μπορούσε να εκπαιδευτεί με διάφορους τρόπους, παρόλα αυτά για ορισμένους από αυτούς τίθεται θέμα πρακτικής εφαρμογής. Ένα νευρωνικό δίκτυο αλλάζει όταν αλλάζουν τα στοιχεία που το αποτελούν. Θεωρητικά ένα νευρωνικό δίκτυο θα μπορούσε να εκπαιδευτεί με τους παρακάτω τρόπους:

1. Αναπτύσσοντας νέους συνδέσμους
2. Διαγράφοντας υφιστάμενους συνδέσμους
3. Αλλάζοντας τα συναπτικά του βάρη
4. Αλλάζοντας τις τιμές κατωφλίου των νευρώνων
5. Μεταβάλλοντας τις συναρτήσεις των νευρώνων
6. Αναπτύσσοντας νέους νευρώνες
7. Διαγράφοντας υφιστάμενους νευρώνες

Η συνηθέστερη διαδικασία που ακολουθείται κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης είναι η μεταβολή των συναπτικών βαρών. Οι αρχικές τιμές αυτών, πριν την διαδικασία της εκπαίδευσης, είναι τυχαίες και δεν εμπεριέχουν καμία ουσιαστική πληροφορία. Μέσω της μεταβολής αυτής μπορούν ουσιαστικά να εφαρμοστούν και οι τέσσερις πρώτοι τρόποι εκπαίδευσης που αναφέρθηκαν παραπάνω. Η διαγραφή συνδέσμων μπορεί να υλοποιηθεί θέτοντας την τιμή 0 στα αντίστοιχα συναπτικά τους βάρη και αντίστοιχα νέοι σύνδεσμοι μπορούν να δημιουργηθούν αλλάζοντας την τιμές του πίνακα συνδέσμων με τιμές διάφορες του μηδενός. Ακόμη, με τον ίδιο τρόπο μπορεί να υλοποιηθεί και η μεταβολή των τιμών κατωφλίου αφού, όπως αναφέρθηκε προηγούμενος αυτές μπορούν να θεωρηθούν ως συναπτικά βάρη σε μία νέα είσοδο με τιμή 1. Η μεταβολή των συναρτήσεων των νευρώνων είναι ιδιαίτερα δύσκολη στην εφαρμογή και απομακρύνεται από την λογική της μίμησης των βιολογικών νευρωνικών δικτύων. Ως εκ τούτου δεν αποτελεί ιδιαίτερα δημοφιλή τρόπο εκπαίδευσης. Η πιθανότητα ανάπτυξης νέων νευρώνων, όχι μόνο παρέχει την δυνατότητα αρτιότερης ρύθμισης των συναπτικών βαρών κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης, αλλά επιπρόσθετα βελτιστοποιεί και την τοπολογία του νευρωνικού δικτύου. Η μέθοδος αυτή παρουσιάζει ιδιαίτερο ερευνητικό ενδιαφέρον και εφαρμόζεται σε πιο καινοτόμες διαδικασίες. Παρόλα αυτά, εφόσον με την μεταβολή των συναπτικών βαρών, μπορούμε να καλύψουμε ένα μεγάλο μέρος των μεθόδων εκπαίδευσης, ο συγκεκριμένος τρόπος δεν θα αναπτυχθεί περαιτέρω στην παρούσα μελέτη[46].

Τα νευρωνικά δίκτυα εκπαιδεύονται μέσω κατάλληλων αλγορίθμων οι οποίοι τροποποιούν το δίκτυο μεταβάλλοντας τα συναπτικά του βάρη και κατά συνέπεια το εκπαιδεύουν κατάλληλα ώστε το δίκτυο να αντιστοιχίζει ικανοποιητικά τις επιθυμητές εξόδους με τις δοθείσες εισόδους [58]. Με την χρήση αλγορίθμων η εφαρμογή των διαδικασιών εκπαίδευσης γίνεται ευκολά με χρήση οποιασδήποτε γλώσσας προγραμματισμού. Για την υλοποίηση των διαδικασιών απαραίτητο είναι ένα

σύνολο από δεδομένα εκπαίδευσης. Το σύνολο αυτό αποτελείται από μοτίβα-παραδείγματα πάνω στα οποία καλούμε το νευρωνικό δίκτυο να εκπαιδευτεί. Με βάση το είδος του προβλήματος και του συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης διακρίνουμε τις εξής μεθόδους εκπαίδευσης.

4.2.1 Εκπαίδευση χωρίς επίβλεψη (unsupervised learning)

Η εκπαίδευση χωρίς επίβλεψη είναι μία από τις κυρίαρχες μεθόδους εκπαίδευσης στα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα. Στην διαδικασία αυτή το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης αποτελείται μόνο από μεταβλητές εισόδου, χωρίς κάποια αντιστοίχιση με επιθυμητές εξόδους. Έτσι στηριζόμενοι στην ικανότητα του δικτύου να αυτό-διοργανώνεται, το καλούμε να αναγνωρίσει διάφορα παρόμοια μοτίβα που μπορεί να υπάρχουν στα δεδομένα εισόδου και να κατηγοριοποιήσει, με βάση τα μοτίβα αυτά, τα δεδομένα σε διάφορες τάξεις [59]. Κάθε φορά που δίνεται στο νευρωνικό δίκτυο ένα σετ μεταβλητών εισόδου, αυτό προσπαθεί να το εντάξει σε μία από τις υπάρχουσες τάξεις. Στην περίπτωση που δεν μπορεί να ενταχθεί το δείγμα σε μία από τις υπάρχουσες τάξεις τότε το δίκτυο δημιουργεί μία νέα. Με το τρόπο αυτό το ίδιο το δίκτυο αποφασίζει για τα χαρακτηριστικά με βάση τα οποία θα κατατάσσει τα δεδομένα ανά τάξη. Με βάση τα παραπάνω είναι προφανές ότι η μέθοδος αυτή εφαρμόζεται κυρίως σε προβλήματα κατηγοριοποίησης δεδομένων.

4.2.2 Εκπαίδευση με βαθμολόγηση ή ενίσχυση (graded or reinforcement learning)

Ομοίως με την προηγούμενη μέθοδο, έτσι και εδώ, στο δίκτυο δίδονται μόνο τα δεδομένα εισόδου. Αντίθετα όμως με την εκπαίδευση χωρίς επίβλεψη, σε αυτή την περίπτωση δίδεται στο δίκτυο και ένα μέτρο αξιολόγησης της αποτελεσματικότητάς του το οποίο δείχνει κατά πόσο η έξοδος που έδωσε είναι σωστή η εσφαλμένη. Με αυτό το τρόπο το νευρωνικό δίκτυο εξαναγκάζεται να εντοπίσει τα χαρακτηριστικά εκείνα των δεδομένων εισόδου στα οποία θα στηριχθεί για να εξάγει το επιθυμητό αποτέλεσμα. Η εκπαίδευση με ενίσχυση βασίζεται στον νόμο Thorndike, ο οποίος ερμηνεύεται ως εξής: «Εάν μια εκροή ενός συστήματος εκπαίδευσης οδηγεί σε μια ικανοποιητική κατάσταση ή συμπεριφορά, τότε η τάση του συστήματος αυτού να παράγει τη συγκεκριμένη ενέργεια ενδυναμώνεται. Διαφορετικά, η διάθεση του συστήματος να παράγει την ενέργεια αυτή εξασθενεί». Η διαδικασία της ενισχυτικής μάθησης λειτουργεί ως εξής: Το νευρωνικό δίκτυο υπολογίζει τις εξόδους με βάση την τρέχουσα είσοδο με τις τρέχων τιμές των βαρών. Στη συνέχεια το σύστημα αξιολογεί την έξοδο και το ενισχυτικό σήμα τροφοδοτείται στο δίκτυο με σκοπό την ενημέρωση των βαρών με βάση το ενισχυτικό σήμα, αυξάνοντας τις τιμές των βαρών που είχαν καλή απόδοση ή μειώνοντας τις τιμές αυτών που είχαν κακή απόδοση [59].

4.2.3 Εκπαίδευση με επίβλεψη (supervised learning)

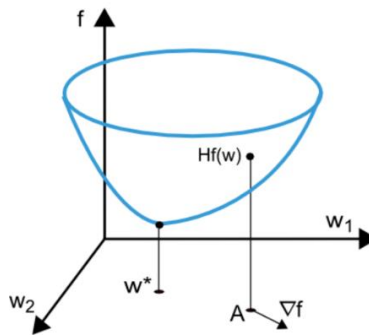
Σε αυτή την μέθοδο το σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης αποτελείται από δεδομένα εισόδου καθώς και από τα αντίστοιχα επιθυμητά δεδομένα εξόδου για κάθε σετ. Το δίκτυο, με βάση τα δεδομένα εισόδου και την κατάσταση της δομής του, υπολογίζει μία έξοδο η οποία όμως μπορεί να διαφέρει από την δοθείσα επιθυμητή. Λαμβάνοντας υπόψιν την απόκλιση αυτή από την επιθυμητή έξοδο το δίκτυο αναπροσαρμόζει τα συναπτικά του βάρη. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται ‘‘εποχή’’, εφαρμόζεται σε όλο το σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης και επαναλαμβάνεται έως ότου το σφάλμα μειωθεί σε κάποιο επιθυμητό επίπεδο. Ως μέτρο απόδοσης για το σύστημα συνήθως χρησιμοποιείται το μέσο τετραγωνικό σφάλμα ή το άθροισμα των τετραγώνων των σφαλμάτων ορισμένο ως συνάρτηση (συνάρτηση κόστους) των συναπτικών βαρών του δικτύου. Μερικές φορές η διαδικασία αυτή απαιτεί πολλές επαναλήψεις για την διόρθωση των βαρών του δικτύου και άρα μεγάλους υπολογιστικούς χρόνους [60]. Με τον τρόπο αυτό το σφάλμα αναπαράγεται

οπισθοδρομικά, δηλαδή από το επίπεδο εξόδου προς το επίπεδο εισόδου, μία διαδικασία που ονομάζεται και οπισθοδιάδοση (back propagation) [61]

4.3 Αλγόριθμοι εκπαίδευσης τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η εφαρμογή των διαφόρων μεθόδων εκπαίδευσης ενός δικτύου υλοποιείται με αλγόριθμους οι οποίοι επεξεργάζονται το σύνολο δεδομένων και τροποποιούν κατάλληλα τα χαρακτηριστικά του δικτύου [46]. Το πρόβλημα της εκπαίδευσης του δικτύου συνοψίζεται στο πρόβλημα ελαχιστοποίησης της συνάρτησης απώλειας f , (loss function). Η συνάρτηση αυτή αποτελείται εν γέννη από όρους σφάλματος και σταθερές κανονικοποίησης. Οι όροι σφάλματος αξιολογούν το κατά πόσο το δίκτυο περιγράφει καλά το σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης. Από την άλλη πλευρά, οι σταθερές κανονικοποίησης προστίθενται στην συνάρτηση απώλειας ώστε να αποτρέψουν την υπερ-εξάρτηση του δικτύου (overfitting) από τα δεδομένα εκπαίδευσης, ή αλλιώς να προσδώσουν στο δίκτυο το χαρακτηριστικό της γενίκευσης, ελέγχοντας την ουσιαστικά την αποτελεσματική περιπλοκότητα του δικτύου[62]. Με την προσθήκη των σταθερών κανονικοποίησης στο σφάλμα, τα συναπτικά βάρη και οι σταθερές κατωφλίου του συστήματος παίρνουν μικρότερες τιμές επιτρέποντας έτσι πιο ομαλές αποκρίσεις του δικτύου σε περιπτώσεις έντονης μη γραμμικότητας.

Η συνάρτηση απώλειας εξαρτάται άμεσα από τις προσαρμοζόμενες παραμέτρους του νευρωνικού δικτύου, δηλαδή τα συναπτικά βάρη και τις τιμές κατωφλίου. Υπενθυμίζουμε ότι οι τιμές κατωφλίου μπορούν να θεωρηθούν ως μία ακόμη τιμή των συνοπτικών βαρών, επομένως μπορούμε εύκολα να αναπαραστήσουμε τις προσαρμοζόμενες αυτές παραμέτρους με ένα n -διάστατο διάνυσμα βαρών w .



Εικόνα 4.4: Αναπαράσταση συνάρτησης απώλειας [62]

Στην Εικόνα 4.4 φαίνεται η γραφική αναπαράσταση μίας συνάρτησης απώλειας $f(w)$. Όπως φαίνεται από την γραφική παράσταση, στο σημείο w^* παρατηρείται η ελάχιστη τιμή της συνάρτησης απώλειας. Σε ένα οποιοδήποτε σημείο A , μπορούμε να υπολογίσουμε τις πρώτης και δευτέρας τάξης παραγώγους της συνάρτησης απώλειας. Οι πρώτης τάξεως παράγωγοι ομαδοποιούνται σε ένα διάνυσμα κλίσεως (gradient vector) του οποίου τα στοιχεία μπορούν να γραφτούν ως εξής,

$$\nabla_i f(w) = \frac{df}{dw_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4.3)$$

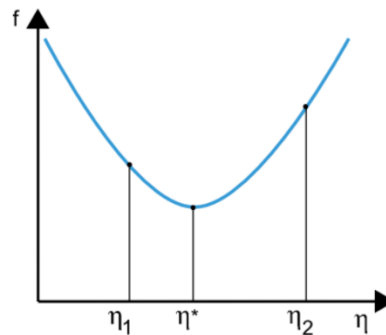
Ομοίως μπορούν να ομαδοποιηθούν οι δευτέρας τάξεως παράγωγοι της συνάρτησης απώλειας σχηματίζοντας τον (Hessian matrix),

$$H_{i,j}f(w) = \frac{d^2 f}{dw_i \cdot dw_j}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (4.4)$$

Το πρόβλημα της ελαχιστοποίησης συνεχών και παραγωγίσιμων συναρτήσεων πολλών μεταβλητών έχει μελετηθεί εκτενώς και πολλές από τις συνήθεις μεθόδους προσέγγισης του προβλήματος είναι απευθείας εφαρμόσιμες στο πρόβλημα της εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου.

4.3.1 Μονοδιάστατη βελτιστοποίηση

Παρόλο που η συνάρτηση απωλειών εξαρτάται εν γένη από πολλές παραμέτρους, οι μέθοδοι μονοδιάστατης βελτιστοποίησης έχουν ιδιαίτερη σημασία και χρησιμοποιούνται αρκετά συχνά στις διαδικασίες εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων. Πιο συγκεκριμένα, πολλοί αλγόριθμοι εκπαίδευσης πρώτα υπολογίζουν μία διεύθυνση εκπαίδευσης (training direction) d και στην συνέχεια ένα ρυθμό εκπαίδευσης (training rate) η , ο οποίος ελαχιστοποιεί την απώλεια στην διεύθυνση αυτή. Στην Εικόνα 4.5 παρουσιάζεται γραφικά η μονοδιάστατη συνάρτηση απώλειας.



Εικόνα 4.5: Μονοδιάστατη συνάρτηση απώλειας [62]

Τα σημεία η_1 και η_2 καθορίζουν το διάστημα τιμών το οποίο εμπεριέχει την τιμή η^* που ελαχιστοποιεί την συνάρτηση f .

Σύμφωνα με τα παραπάνω, οι μέθοδοι μονοδιάστατης βελτιστοποίησης επικεντρώνονται στον εντοπισμό της ελάχιστης τιμής μίας συνάρτησης μίας μεταβλητής. Ορισμένοι από τους πιο συχνά χρησιμοποιούμενους αλγόριθμους είναι της "χρυσής τομής" και η μέθοδος Brent. Και οι δύο μέθοδοι μειώνουν σταδιακά το διάστημα μέσα στο οποίο εντοπίζεται η τιμή που ελαχιστοποιεί την συνάρτηση απώλειας έως ότου το διάστημα αυτό γίνει μικρότερο από μία προκαθορισμένη τιμή ανοχής[62].

4.3.2 Πολύ-επίπεδη βελτιστοποίηση

Το πρόβλημα της εκπαίδευσης των νευρωνικών δικτύων μπορεί να προσεγγισθεί ως η αναζήτηση του του κατάλληλου διανύσματος βαρών w^* για το οποίο η συνάρτηση απώλειας παίρνει την μικρότερη τιμή της. Απαραίτητη συνθήκη η οποία υποδηλώνει ότι η συνάρτηση απώλειας του νευρωνικού δικτύου παίρνει την ελάχιστη τιμή της, είναι το γεγονός ότι το διάνυσμα διεύθυνσης, για το συγκεκριμένο διάνυσμα w^* , είναι μηδενικό.

Η συνάρτηση απώλειας είναι, εν γένη, μία μη γραμμική συνάρτηση. Συνεπώς ένας κλειστός αλγόριθμος για την εύρεση της ελάχιστης τιμής της δεν μπορεί να εφαρμοστεί. Μπορούμε όμως να

προσδιορίσουμε μία τιμή βημάτων κατά τα οποία πραγματοποιείται μία αναζήτηση στο διάστημα ορισμού των παραμέτρων. Σε κάθε βήμα η τιμή της συνάρτησης απώλειας θα μειώνεται προσαρμόζοντας κάθε φορά τις παραμέτρους του νευρωνικού δικτύου. Για τον λόγο αυτό, είναι απαραίτητο να θεωρηθεί ένα αρχικό διάνυσμα των παραμέτρων αυτών, το οποίο μάλιστα ως επί το πλείστον αποτελείται από τυχαίους αριθμούς. Το διάνυσμα αυτό μεταβάλλεται σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου έως ότου επέλθει μία προκαθορισμένη κατάσταση ή ικανοποιηθεί κάποιο κριτήριο τερματισμού της διαδικασίας εκπαίδευσης. Στις επόμενες παραγράφους περιγράφονται ορισμένοι από τους πιο σημαντικούς αλγόριθμους εκπαίδευσης νευρωνικών δικτύων.

4.3.3 Μέθοδος Gradient descent

Η μέθοδος Gradient descent (μείωση κλίσης), είναι ο απλούστερος αλγόριθμος εκπαίδευσης. Η εφαρμογή της απαιτεί πληροφορίες για το διάνυσμα διεύθυνσης και συνεπώς είναι μία μέθοδος πρώτης τάξης.

Έστω λοιπόν $f(w_i) = f_i$ και $\nabla f(w_i) = g_i$. Η εφαρμογή της μεθόδου ξεκινάει στο σημείο w_0 και προχωράει από το w_i στο w_{i+1} κατά την κατεύθυνση $d_i = -g_i$ έως ότου ένα κριτήριο τερματισμού ικανοποιηθεί. Έτσι έχουμε διαδοχικά,

$$w_{i+1} = w_i - g_i \eta_i, \quad i = 0.1 \dots \quad (4.5)$$

Όπου η παράμετρος η υποδηλώνει το ρυθμό εκπαίδευσης. Η τιμή της μπορεί είτε να προκαθοριστεί είτε να υπολογίζεται μέσω μονοδιάστατης βελτιστοποίησης κατά την κατεύθυνση εκπαίδευσης σε κάθε βήμα, το οποίο είναι και προτιμότερο. Παρόλα αυτά υπάρχουν αρκετά λογισμικά τα οποία χρησιμοποιούν προκαθορισμένες τιμές του ρυθμού εκπαίδευσης. Στη συγκεκριμένη μέθοδο το διάνυσμα παραμέτρων του δικτύου βελτιώνεται σε δύο βήματα. Στο πρώτο βήμα υπολογίζεται η κατεύθυνση εκπαίδευσης και στην συνέχεια ο κατάλληλος ρυθμός εκπαίδευσης. Η μέθοδος αυτή παρουσιάζει το μειονέκτημα της απαίτησης αρκετών επαναλήψεων για συναρτήσεις με εκτενείς και ρηχές κοιλότητες και της αργής σύγκλισης για αυτές της περιπτώσεις. Παρόλα αυτά συνιστάται σε περιπτώσεις μεγάλων νευρωνικών δικτύων με αρκετές χιλιάδες παραμέτρους αφού η μέθοδος αποθηκεύει μόνο το διάνυσμα διεύθυνσης (μεγέθους n) και όχι τον Εσσιανό πίνακα (μεγέθους n^2)[62] [63].

4.3.4 Η μέθοδος Newton

Η μέθοδος Newton είναι αλγόριθμος δευτέρας τάξης καθώς χρησιμοποιεί τον Εσσιανό πίνακα. Σκοπός της μεθόδου είναι η εύρεση βέλτιστων κατευθύνσεων εκπαίδευσης χρησιμοποιώντας δευτέρας τάξεως παραγώγους της συνάρτησης απώλειας.

Έστω $f(w_i) = f_i$, $\nabla f(w_i) = g_i$ και $Hf(w_i) = H_i$. Θεωρούμε την τετραγωνικού προσέγγιση της f στο w_0 χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor

$$f = f_0 + g_0(w - w_0) + 0.5(w - w_0)^2 H_0 \quad (4.6)$$

Όπου H_0 ο Εσσιανός πίνακας της f υπολογισμένος στο σημείο w_0 . Θέτοντας την $g = 0$ για το ελάχιστο της $f(w)$ καταλήγουμε στην επόμενη εξίσωση.

$$g = g_0 + H_0(w - w_0) = 0 \quad (4.7)$$

Έτσι ξεκινώντας από το αρχικό διάνυσμα w_0 , σύμφωνα με την μέθοδο σε κάθε επανάληψη έχουμε,

$$w_{i+1} = w_i - H_i^{-1}g_i, \quad i = 0,1, \dots \quad (4.8)$$

Το διάνυσμα $H_i^{-1}g_i$ ονομάζεται αλλιώς και βήμα Newton. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι αυτή η μεταβολή των παραμέτρων του δικτύου θα μπορούσε να οδηγήσει σε μεγιστοποίηση της f αντί για ελαχιστοποίηση εάν ο Εσσιανός πίνακας δεν είναι θετικά ορισμένος. Για την αποφυγή τέτοιου είδους προβλημάτων η εξίσωση της μεθόδου Newton τροποποιείται ως εξής,

$$w_{i+1} = w_i - (H_i^{-1}g_i)\eta_i, \quad i = 0,1, \dots \quad (4.9)$$

Ο ρυθμός εκπαίδευσης 'η' μπορεί να έχει μία προκαθορισμένη τιμή ή να υπολογίζεται, όπως και προηγούμενος, μέσω της μονοδιάστατης βελτιστοποίησης. Το διάνυσμα $d = H_i^{-1}g_i$ ονομάζεται κατεύθυνση εκπαίδευσης κατά Newton. Σε αυτή την περίπτωση η βελτίωση των παραμέτρων του δικτύου πραγματοποιείται με τον υπολογισμό της κατεύθυνσης εκπαίδευσης κατά Newton και στη συνέχεια του ρυθμού εκπαίδευσης. Η μέθοδος Newton απαιτεί λιγότερα βήματα για τον υπολογισμό της ελάχιστης τιμής της συνάρτησης απώλειας. Παρόλα αυτά η δυσκολία της μεθόδου έγκειται στον υπολογισμό του Εσσιανού πίνακα και του αντιστρόφου του, διαδικασία αρκετά δαπανηρή όσον αφορά τους υπολογιστικούς πόρους[64].

4.3.5 Conjugate gradient

Η μέθοδος αυτή θα μπορούσε να θεωρηθεί ως ένας συνδυασμός μεταξύ των μεθόδων Gradient descent και Newton. Στην συγκεκριμένη μέθοδο επιταχύνεται η τυπικά αργή σύγκλιση της μεθόδου gradient descent ενώ παράλληλα αποφεύγονται οι απαιτούμενες πληροφορίες που σχετίζονται με τον υπολογισμό, την αποθήκευση και την αντιστροφή του Εσσιανού πίνακα της μεθόδου Newton. Ο αλγόριθμος της μεθόδου εκτελεί αναζήτηση κατά συζυγής κατεύθυνσης οι οποίες τείνουν να συγκλίνουν ταχύτερα σε σύγκριση με τις κατευθύνσεις της gradient descent. Η σύζευξη των κατευθύνσεων αυτών προκύπτει με βάση τον Εσσιανό πίνακα.

Έστω d το διάνυσμα κατεύθυνσης της εκπαίδευσης. Ξεκινώντας με το αρχικό διάνυσμα παραμέτρων w_0 και ένα αρχικό διάνυσμα κατευθύνσεων εκπαίδευσης $d_0 = -g_0$ η μέθοδος συνθέτει μία αλληλουχία κατευθύνσεων εκπαίδευσης όπως περιγράφεται παρακάτω.

$$d_{i+1} = g_{i+1} + d_i\gamma_i, \quad i = 0,1, \dots \quad (4.10)$$

Όπου γ είναι η παράμετρος σύζευξης η οποία υπολογίζεται με διάφορες μεθόδους. Δύο από τις πιο συνηθισμένες είναι η μέθοδος Fletcher και Reeves και η μέθοδος Ribiere. Στη συνέχεια οι παράμετροι του δικτύου βελτιώνονται σύμφωνα με την παρακάτω σχέση στην οποία ο ρυθμός εκπαίδευσης υπολογίζεται μέσω μονοδιάστατης ελαχιστοποίησης.

$$w_{i+1} = w_i - d_i\eta_i, \quad i = 0.1 \dots \quad (4.11)$$

Η μέθοδος αυτή είναι αποτελεσματικότερη της gradient descent και εφόσον δεν απαιτεί τον υπολογισμό Εσσιανού πίνακα δύναται να εφαρμοστεί σε ιδιαίτερα μεγάλα δίκτυα[62].

4.3.6 Μέθοδος Quasi-Newton

Η εφαρμογή της μεθόδου Newton, όπως είδαμε, είναι ιδιαίτερα δαπανηρή υπολογιστικά αφού απαιτεί αρκετές διαδικασίες για τον υπολογισμό του Εσσιανού πίνακα και του αντιστρόφου του. Μία εναλλακτική προσέγγιση αυτής είναι η μέθοδος quasi-Newton, η οποία αναπτύχθηκε με σκοπό να βελτιώσει την μέθοδο ως προς αυτό το μειονέκτημα. Η μέθοδος αυτή αντί να υπολογίσει απευθείας τον Εσσιανό πίνακα και τον αντίστροφό του, χτίζει σταδιακά μια προσέγγιση του αντιστρόφου Εσσιανού πίνακα σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου. Για την προσέγγιση αυτή χρησιμοποιούνται μόνο πληροφορίες η οποίες ανακτώνται από την πρώτη παράγωγο της συνάρτησης απώλειας. Ο Εσσιανός πίνακας αποτελείται από δευτέρας τάξης μερικές παραγώγους της συνάρτησης απώλειας. Η κεντρική ιδέα της μεθόδου είναι η προσέγγιση του αντιστρόφου του χρησιμοποιώντας έναν δεύτερο πίνακα G ο οποίος αποτελείται από πρώτης τάξεως μερικές παραγώγους της συνάρτησης απώλειας. Η αλλαγή των παραμέτρων σε κάθε βήμα περιγράφεται από την παρακάτω σχέση.

$$w_{i+1} = w_i - (G_i \ g_i)\eta_i, \quad i = 0,1, \dots \quad (4.12)$$

Και σε αυτήν την περίπτωση ο ρυθμός εκπαίδευσης 'η' μπορεί είτε να λάβει μία προκαθορισμένη τιμή ή να υπολογιστεί μέσω της μονοδιάστατης ελαχιστοποίησης. Οι πλέον χρησιμοποιούμενες εκφράσεις της προσέγγισης του αντιστρόφου Εσσιανού πίνακα G είναι εκείνες των Davidon-Fletcher-Powell και Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno. Ο αλγόριθμος βελτιστοποιεί τις παραμέτρους του δικτύου υπολογίζοντας αρχικά την διεύθυνση εκπαίδευσης κατά την μέθοδο και στη συνέχεια έναν ικανοποιητικό ρυθμό εκπαίδευσης.

Η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μία πληθώρα περιπτώσεων δικτύων, είναι σημαντικά ταχύτερη από τις μεθόδους gradient descent και conjugate gradient ενώ απαιτεί τον υπολογισμό και την αντιστροφή του Εσσιανού πίνακα[64].

4.3.7 Levenberg-Marquardt algorithm

Η μέθοδος Levenberg-Marquardt έχει σχεδιαστεί για να εφαρμόζεται ειδικά σε συναρτήσεις απώλειας οι οποίες έχουν την μορφή αθροίσματος τετραγώνων σφάλματος. Κατά την εφαρμογή της δεν υπολογίζεται απευθείας ο Εσσιανός πίνακας αλλά το διάλυσμα διεύθυνσης και ο Ιακωβιανός πίνακας.

Έστω λοιπόν η συνάρτηση απώλειας,

$$f = \sum e_i^2, \quad i = 0,1, \dots, m \quad (4.13)$$

Όπου m ο αριθμός των περιπτώσεων στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης.

Μπορούμε να ορίσουμε τον Ιακωβιανό πίνακα της συνάρτησης απώλειας, ο οποίος αποτελείται από τις παραγώγους του σφάλματος ως προς τις παραμέτρους του δικτύου, ως εξής

$$J_{i,j}f(w) = \frac{de_i}{dw_j}, \quad i = 1, \dots, m \ \& \ j = 1, \dots, n \quad (4.14)$$

Όπου n ο αριθμός των παραμέτρων του δικτύου. Από την παραπάνω σχέση συνεπάγεται πως ο Ιακωβιανός πίνακας είναι μεγέθους $m \cdot n$.

Το διάνυσμα διεύθυνσης της συνάρτησης απώλειας μπορεί να υπολογισθεί από την παρακάτω σχέση

$$\nabla f = 2J^T e \quad (4.15)$$

Όπου e το διάνυσμα που εμπεριέχει όλους του όρους σφάλματος. Στη συνέχεια ο Εσσιανός πίνακας μπορεί να εκτιμηθεί από την παρακάτω σχέση.

$$Hf \approx 2J^T J + \lambda I \quad (4.16)$$

Όπου λ ο συντελεστής απόσβεσης που διασφαλίζει ότι ο Εσσιανός πίνακας είναι θετικά ορισμένος και I ο μοναδιαίος πίνακας. Η βελτιστοποίηση σε κάθε βήμα των παραμέτρων του δικτύου γίνεται με την παρακάτω σχέση[65].

$$w_{i+1} = w_i - (J_i^T \cdot J_i + \lambda_i I)^{-1} \cdot (2J_i^T e_i), \quad i = 0, 1, \dots \quad (4.17)$$

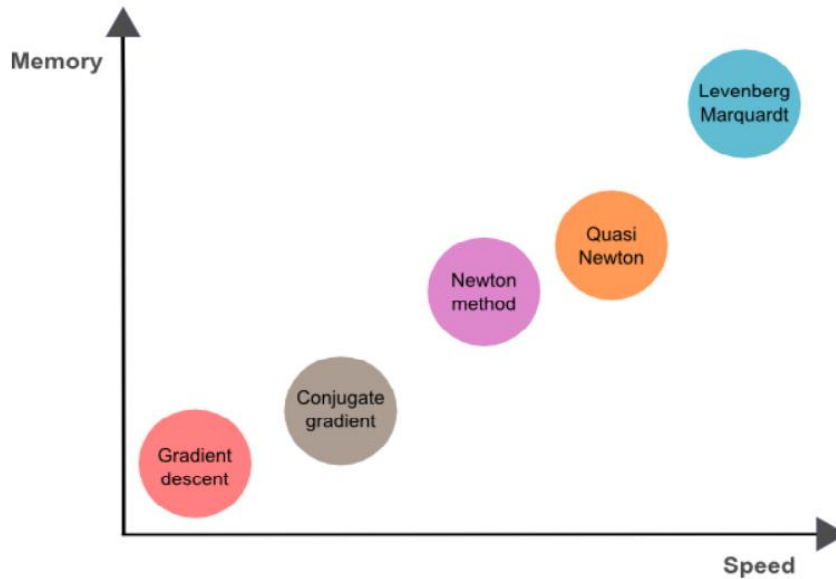
Στην περίπτωση που ο συντελεστής απόσβεσης λ είναι μηδέν τότε εμπίπτουμε στην απλή μέθοδο Newton χρησιμοποιώντας την εκτίμηση του Εσσιανού πίνακα, ενώ όταν ο συντελεστής απόσβεσης λ πάρει μεγάλες τιμές τότε εμπίπτουμε στην μέθοδο gradient descent με μικρό ρυθμό εκπαίδευσης. Η αρχικοποίηση της παραμέτρου λ είναι ένας μεγάλος αριθμός έτσι ώστε τα πρώτα βήματα να είναι μικρά κατά την κατεύθυνση μείωσης της κλίσης. Εάν το αποτέλεσμα κάποιας επανάληψης κριθεί ανεπιτυχές τότε το λ αυξάνεται πολλαπλασιάζοντας το με κατάλληλο συντελεστή, ενώ όσο η ελάχιστη τιμή της απώλειας μειώνεται το λ μειώνεται και αυτό οδηγώντας την μέθοδο στο να προσεγγίσει την μέθοδο Newton. Η διαδικασία αυτή επιταχύνει τη σύγκλιση στην ζητούμενη ελαχιστοποίηση της απώλειας. Κατά την εφαρμογή της πρώτα υπολογίζεται η απώλεια, η κλίση και εκτιμάται ο Εσσιανός πίνακας. Στη συνέχεια ο συντελεστής απόσβεσης προσαρμόζεται με τέτοιο τρόπο ώστε η απώλεια να μειώνεται σε κάθε επανάληψη.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί ο αλγόριθμος Levenberg-Marquardt έχει σχεδιαστεί για συναρτήσεις με τη μορφή αθροίσματος τετραγώνων του σφάλματος. Το γεγονός αυτό κάνει τον αλγόριθμο ιδιαίτερα γρήγορο όταν εφαρμόζεται σε δίκτυα με τέτοιου είδους σφάλματα. Παρόλα αυτά παρουσιάζει ορισμένα μειονεκτήματα, όπως η μη εφαρμογή του σε συναρτήσεις τετραγωνικής ρίζας του μέσου τετραγωνικού σφάλματος ή συναρτήσεις σφάλματος εντροπίας. Επίσης ο αλγόριθμος δεν είναι εφαρμόσιμος σε περιπτώσεις κανονικοποίησης. Τέλος για πολύ μεγάλα σύνολα δεδομένων εκπαίδευσης και μεγάλα δίκτυα, ο Ιακωβιανός πίνακας μεγαλώνει αρκετά και απαιτείται αρκετή μνήμη.

4.4 Σύγκριση μεθόδων ως προς την ταχύτητα και την απαιτούμενη μνήμη

Στο γράφημα της Εικόνα 4.6 απεικονίζονται ποιοτικά η υπολογιστική ταχύτητα και οι απαιτήσεις σε μνήμη των αλγορίθμων που αναφέρθηκαν παραπάνω. Όπως διαπιστώνεται, ο πιο αργός αλγόριθμος εκπαίδευσης αλλά και εκείνος με τις μικρότερες απαιτήσεις σε μνήμη, είναι συνήθως ο gradient descent. Από την άλλη πλευρά ο αλγόριθμος Levenberg-Marquardt είναι μεν ο ταχύτερος αλλά και εκείνος με τις μεγαλύτερες απαιτήσεις σε μνήμη. Έτσι σε δίκτυα με πολλές χιλιάδες

παραμέτρους μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος gradient descent ώστε να μην δεσμεύσουμε μεγάλο μέρος της μνήμης μας ενώ εάν θα πρέπει να εκπαιδεύσουμε πολλά δίκτυα με μερικές χιλιάδες παραμέτρους το κάθε ένα τότε η καλύτερη επιλογή είναι ο αλγόριθμος Levenberg-Marquardt. Στις ενδιάμεσες περιπτώσεις η μέθοδος quasi-Newton μπορεί να δώσει αρκετά ικανοποιητικά αποτελέσματα. Η επιλογή επομένως του κατάλληλου αλγορίθμου εκπαίδευσης είναι το αποτέλεσμα της σωστής αξιολόγησης του κάθε δικτύου καθώς και των διαθέσιμων υπολογιστικών πόρων[62].



Εικόνα 4.6: Σύγκριση μεθόδων εκπαίδευσης [62]

5 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΣΥΝΔΥΑΣΜΕΝΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ANN-EMMS

5.1 Μεθοδολογία

Στην παρούσα εργασία έγινε μία προσπάθεια συνδυασμού του μοντέλου EMMS με την τεχνολογία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων προκειμένου να αναπτυχθεί ένα καινοτόμο εργαλείο απευθείας υπολογισμού του συντελεστή ετερογένειας για κάθε περίπτωση κλίνης που λειτουργεί στο πεδίο λειτουργίας των ταχέως ρευστοποιημένων κλινών. Το εργαλείο αυτό δύναται να προβλέψει την τιμή του συντελεστή ετερογένειας έχοντας ως εισόδους τις παραμέτρους λειτουργίας της κλίνης ή αλλιώς της συνθήκες κάθε όγκου ελέγχου.

Η μεθοδολογία που εφαρμόστηκε περιλαμβάνει την δημιουργία δεδομένων για 22 περιπτώσεις λειτουργίας κλινών. Ορισμένες εξ αυτών αφορούν περιπτώσεις υφιστάμενων κλινών στις οποίες το μοντέλο του EMMS έχει ήδη εφαρμοστεί και επαληθευτεί με πειραματικά δεδομένα ενώ άλλες περιπτώσεις αφορούν θεωρητικά σημεία λειτουργίας στο πεδίο των ταχέως ρευστοποιημένων κλινών. Σε κάθε μία από τις παραπάνω περιπτώσεις εφαρμόστηκε ο κώδικας κώδικας Fortran των Zeneli M. et al. [42] και εξήχθησαν τιμές των συντελεστών ετερογένειας για ένα πλήθος τιμών των παραμέτρων της ταχύτητας ολίσθησης u_{slip} και του κλάσματος κενού ε_g .

Ο κώδικας εφαρμόστηκε για τιμές της ταχύτητας ολίσθησης $u_{slip}=(0.5, 1, 2, 3, 4, 5)$. Για κάθε μία από αυτές τις τιμές της ταχύτητας ολίσθησης υπολογίστηκαν οι συντελεστές ετερογένειας για τιμές του κλάσματος κενού από 0,64 έως 0,95 (πυκνή περιοχή) με βήμα 0,01 και από 0,95 έως 0,99 (αραιή περιοχή) με βήμα 0,001. Η αραιή περιοχή καταλαμβάνει το μεγαλύτερο όγκο μιας κλίνης. Για τον λόγο αυτό απαιτείται μεγαλύτερη ακρίβεια στα δεδομένα της περιοχής αυτής εξου και το μικρότερο βήμα που επιλέγεται για την παραγωγή δεδομένων στην συγκεκριμένη περιοχή. Τα παραπάνω δεδομένα κάθε μίας περίπτωσης λειτουργίας, όπως αναλύεται στα επόμενα κεφάλαια, προετοιμάστηκαν κατάλληλα ώστε να δημιουργηθεί η βάση δεδομένων εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου. Κατά την διαδικασία αυτή πραγματοποιήθηκε πύκνωση των δεδομένων, μέσω γραμμικής παρεμβολής ως προς τις τιμές των ταχυτήτων ολίσθησης u_{slip} και μέσω πολυωνυμικής παρεμβολής για την τιμές του κλάσματος κενού ε_g , ενώ παράλληλα για τον προσδιορισμό των πολυωνύμων αυτών εφαρμόστηκε και ένας κώδικας αποκλεισμού τιμών με μεγάλη απόκλιση από γειτονικά τους σημεία.

Μετά την προετοιμασία των δεδομένων εκπαίδευσης, αυτά χωρίστηκαν σε ορισμένα υποσύνολα για το κάθε ένα από τα οποία προσδιορίστηκε η καταλληλότερη μεθοδολογία εκπαίδευσης με σκοπό την ελαχιστοποίηση του σφάλματος. Το νευρωνικό δίκτυο εκπαιδευτικό με τον βέλτιστο δυνατό τρόπο και στην συνέχεια ενσωματώθηκε σε συνάρτηση γραμμένη σε κώδικα C με σκοπό την ενσωμάτωση της συνάρτησης αυτής μέσω udf στο μοντέλο CFD του Fluent. Η τελική αυτή συνάρτηση πρόβλεψης του συντελεστή ετερογένειας έχει ως είσοδο επτά συνολικά μεταβλητές μεταξύ των οποίων και οι παράμετροι λειτουργίας της κλίνης

$$Hd (U_{slip}, \varepsilon_g, \rho_g, \rho_s, \mu_g, d_p, D_t)$$

Η αντικατάσταση του κώδικα Fortran με την συνάρτηση ANN για την εφαρμογή του EMMS παρουσιάζει ορισμένα σημαντικά πλεονεκτήματα τόσο σε πρακτικό όσο και σε επιστημονικό

επίπεδο. Με τον τρόπο αυτό αποφεύγεται η διαδικασία υπολογισμού των πολυωνύμων του συντελεστή ετερογένειας H_d για κάθε περίπτωση λειτουργίας. Η διαδικασία αυτή είναι ιδιαίτερα χρονοβόρα καθώς απαιτούνται πέντε έως έξι μέρες για την εφαρμογή της για κάθε περίπτωση. Το πιο σημαντικό πλεονέκτημα παρόλα αυτά είναι η δυνατότητα εφαρμογής του μοντέλου EMMS λαμβανομένης υπόψη της μεταβλητότητας των συνθηκών λειτουργίας καθώς και των χαρακτηριστικών της ροής σε κάθε όγκο ελέγχου ξεχωριστά. Η μεταβλητότητα αυτή είναι ιδιαίτερα έντονη σε περιπτώσεις κλινών όπου λαμβάνουν χώρα διεργασίες καύσης και άλλων αντιδράσεων. Κατά τις διαδικασίες αυτές χαρακτηριστικά της στερεάς φάσης όπως η διάμετρος των σωματιδίων και η πυκνότητά τους μεταβάλλονται κατά την λειτουργία της κλίνης. Η κλασσική εφαρμογή του μοντέλου EMMS θεωρεί σταθερές συνθήκες και χαρακτηριστικά λειτουργίας της κλίνης με αποτέλεσμα να μην συνυπολογίζει τις μεταβολές αυτές. Επιπρόσθετα η ικανότητα αυτή του νευρωνικού δικτύου επιτρέπει την χρησιμοποίησή του για περιπτώσεις κλινών όπου η στερεά φάση αποτελείται από δύο ή περισσότερους τύπους σωματιδίων με διαφορετικά χαρακτηριστικά.

5.2 Επαλήθευση γενικής ιδέας

Για την επαλήθευση τόσο της ιδέας όσο και της μεθοδολογίας υλοποίησης της αναπτύχθηκε σε πρώτη φάση ένα απλουστευμένο νευρωνικό δίκτυο για την πρόβλεψη του συντελεστή ετερογένειας ενός συγκεκριμένου σημείου λειτουργίας υπάρχουσας πιλοτικής μονάδας κλίνης 1MWth, του οργανισμού TUDA (Technical University of Darmstadt). Η πιλοτική μονάδα είναι συζυγών κλινών και χρησιμοποιείται για δέσμευση διοξειδίου του άνθρακα εφαρμόζοντας την τεχνολογία του κύκλου του ασβεστίου. Αποτελείται από δύο κλίνες-αντιδραστήρες στις οποίες λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις ασβεστοποίησης και ενανθράκωσης αντίστοιχα. Σε αυτή την μελέτη η μοντελοποίηση αφορά την κλίνη ενανθράκωσης η οποία έχει διάμετρο 0,59 μέτρα και ύψος 8.61 μέτρα.

Το συγκεκριμένο νευρωνικό δίκτυο έχει ως παραμέτρους εισόδου μόνο δύο εκ των επτά προαναφερθέντων μεταβλητών, την ταχύτητα ολίσθησης και το κλάσμα κενού. Πρακτικά αντικαθιστά μόνο το κομμάτι του προσδιορισμού των πολυωνύμων του συντελεστή ετερογένειας $H_d(u_{slip}, \epsilon_g)$ του προηγούμενου τρόπου εφαρμογής του μοντέλου EMMS μέσω του κώδικά της Fortran. Παρόλα αυτά, η ανάπτυξη του απλουστευμένου αυτού δικτύου αποτελεί μία προσπάθεια επαλήθευσης της μεθοδολογίας με την οποία θα αναπτυχθεί το γενικευμένο νευρωνικό δίκτυο. Στη διαδικασία αυτή καθορίστηκε ο τρόπος πύκνωσης των δεδομένων καθώς και η διαδικασία ενσωμάτωσης του νευρωνικού δικτύου στο Fluent. Η διαδικασία αυτή περιλαμβάνει την μετατροπή του αρχικού κώδικα Matlab σε κώδικά C και η επιλογή των κατάλληλων libraries προκειμένου να δημιουργηθούν οι απαραίτητες καθορισμένες από τον χρήστη συναρτήσεις (udfs) και τα header files που θα ενσωματωθούν στο Fluent. Η ανάπτυξή του αποτέλεσε ιδιαίτερο σημείο αναφοράς για την μετέπειτα ανάπτυξη του γενικευμένου μοντέλου.

Τα χαρακτηριστικά των σωματιδίων και του αερίου για το σημείο λειτουργίας που εξετάστηκε φαίνονται στον παρακάτω πίνακα.

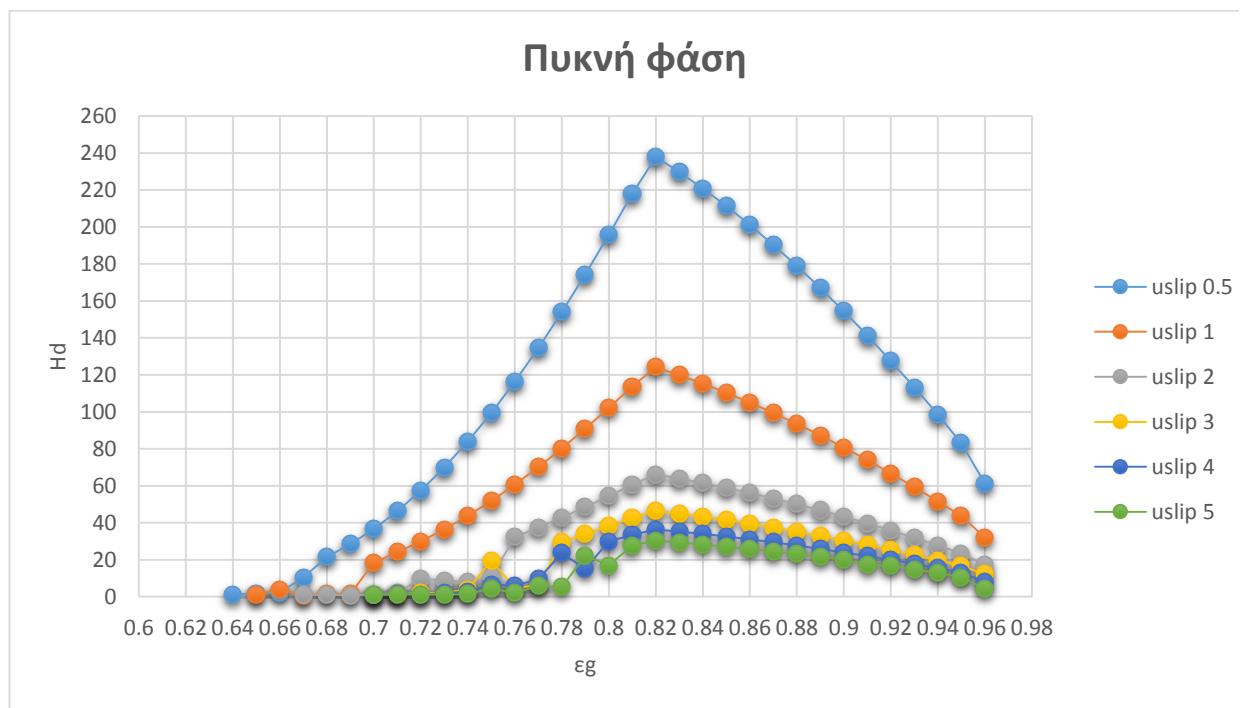
Ιδιότητες Σωματιδίων-Αερίου	
Διάμετρος Σωματιδίων d_p	91,397 μm
Πυκνότητα σωματιδίων ρ_s	1650 kg/m^3
Πυκνότητα αερίου ρ_g	0,389 kg/m^3
Ιξώδες αερίου μ_g	$3.91 \cdot 10^{-5}$ $\text{kg}/(\text{ms})$
Διάμετρος αντιδραστήρα d_h	0.59 m

Πίνακας 5.1: Χαρακτηριστικά TUDA Carbonator P1

Με βάση τα παραπάνω χαρακτηριστικά χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας της Fortran για τον υπολογισμό των συντελεστών ετερογένειας για έξι τιμές της ταχύτητας ολίσθησης τόσο στην πυκνή φάση (ε_g : [0.64~0.96]), όσο και στην αραιή (ε_g : [0.96~0.99]). Οι τιμές της ταχύτητας ολίσθησης επιλέχθηκαν με γνώμονα την αντιπροσωπευτικότητα των πραγματικών συνθηκών που εμφανίζονται για σωματίδια αυτής της τάξης μεγέθους και είναι οι παρακάτω:

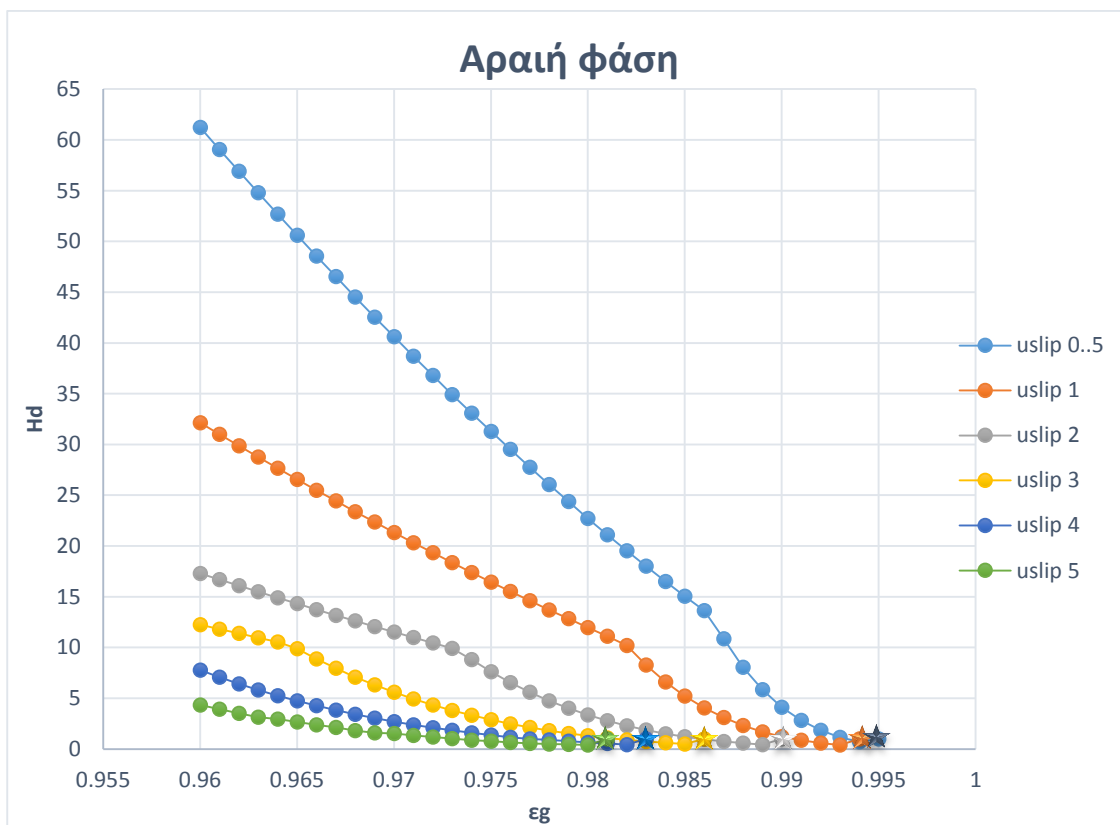
$$u_{slip}: 0.5, 1, 2, 3, 4, 5$$

Η κάλυψη του εύρους τιμών του κλάσματος κενού έγινε με βήμα 0,01 στην πυκνή φάση και με βήμα 0,001 στην αραιή. Τα αποτελέσματα που εξήχθησαν από την εφαρμογή του κώδικα παρατίθενται στα παρακάτω διαγράμματα.



Εικόνα 5.1: Διαγράμματα συντελεστών ετερογένειας πυκνής φάσης

Στο διάγραμμα της παραπάνω εικόνας παρατηρούμε την μεταβολή του συντελεστή ετερογένειας συναρτήσει της ταχύτητας ολίσθησης και του κλάσματος κενού για την πυκνότερη περιοχή ($\varepsilon_g < 0,96$). Είναι εμφανές ότι για μεγαλύτερες τιμές της ταχύτητας ολίσθησης ο συντελεστής ετερογένειας μειώνεται προσεγγίζοντας την μονάδα. Το φαινόμενο αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι οι μεγάλες τιμές της ολίσθησης μεταξύ σωματιδίων και αερίου ουσιαστικά εμποδίζουν τον σχηματισμό συμπλεγμάτων και επομένως οδηγούν σε μεγαλύτερη ομοιογένεια [66]. Αυτό γίνεται γιατί η μεγάλη ταχύτητα του αερίου την ουσία βοηθά την αέρια φάση να κυριαρχήσει πλήρως και κάνει τις δομές μεσο-κλίμακας πολύ ασταθείς. Ακόμη παρατηρείται ότι για κάθε τιμή της ταχύτητας ολίσθησης, ο συντελεστής ετερογένειας μεγιστοποιείται όταν το κλάσμα κενού πάρει την τιμή 0,82. Για τιμές του ε_g μεταξύ της μέγιστης τιμής του και του 0,82, όσο το ε_g μειώνεται τόσο η διάμετρος και πυκνότητα των δομών συμπλεγμάτων αυξάνεται με αποτέλεσμα την αύξηση της μάζας που καταλαμβάνουν οι δομές αυτές και επακολούθως και του συντελεστή ανομοιογένειας. Όταν η τιμή του ε_g γίνεται ίση με 0,82 τότε εντός των συμπλεγμάτων το ε_c γίνεται ίσο με το κλάσμα κενού ελάχιστης ρευστοποίησης ε_{mf} . Λόγω του γεγονότος ότι για τιμές του ε_g μικρότερες του 0,82 το ε_c γίνεται μικρότερο το ε_{mf} , ο κώδικας θέτει ως όριο για το ε_c την τιμή του ε_{mf} [42]. Έτσι για $\varepsilon_g < 0,82$ η μάζα των συμπλεγμάτων αυξάνεται μόνο λόγω της αύξησης της διαμέτρου αυτών, ενώ για ποιο αραιές ροές τα συμπλέγματα μπορούν να αυξάνουν και λόγω της αύξησης του όγκου τους αλλά και λόγω της αύξησης της σωματιδιακής τους φόρτισης. Τα παραπάνω οδηγούν στην μεγιστοποίηση του συντελεστή ετερογένειας για την τιμή 0,82 του ε_g .



Εικόνα 5.2: Διαγράμματα συντελεστών ετερογένειας αραιής φάσης

Η αραιή περιοχή υπολογίζεται ξεχωριστά χάριν μεγαλύτερης ακρίβειας στην περιοχή αυτή του ε_g .

5.2.1 Υπολογισμός οριακής τιμής του κλάσματος κενού, $\varepsilon_{g,lim}$

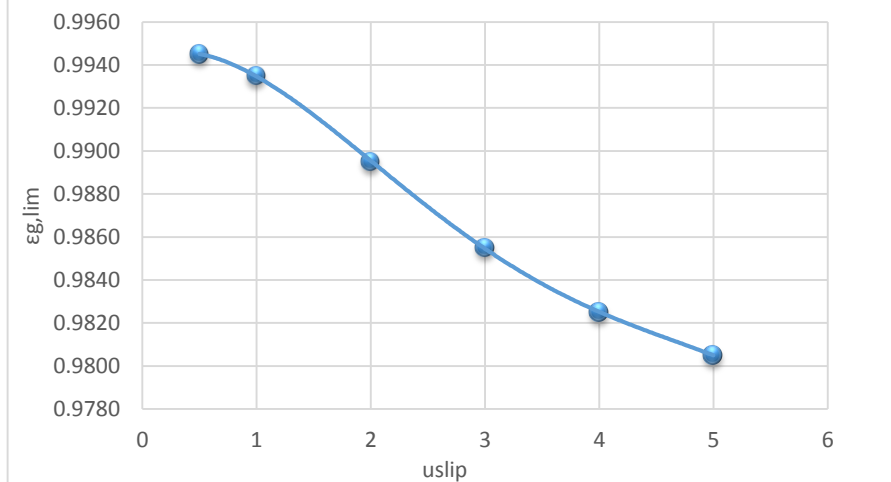
Για κάθε ταχύτητα ολίσθησης παρατηρείται μία τιμή του $\varepsilon_{g,lim}$ από την οποία και μετά επικρατεί ομοιογένεια, δηλαδή $H_d = 1$. Στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρείται ότι η οριακή αυτή τιμή $\varepsilon_{g,lim}$ για μεγαλύτερες τιμές της ταχύτητας ολίσθησης γίνεται μικρότερη. Στη συγκεκριμένη εφαρμογή οι τιμές του $\varepsilon_{g,lim}$ φαίνονται στον παρακάτω πίνακα, ενώ η συνάρτηση που περιγράφει τα σημεία υπολογίστηκε μέσω πολυωνυμικής παρεμβολής και είναι πολυώνυμο τετάρτου βαθμού συναρτήσεως της ταχύτητας ολίσθησης.

Η συνάρτηση αυτή είναι της μορφής:

$$\varepsilon_{g,lim}(u_{slip}) = -a_1 u_{slip}^4 + a_2 u_{slip}^3 - a_3 u_{slip}^2 + a_4 u_{slip} + a_5 \quad (5.1)$$

Όπου, $a_1 = 0,000065318728$, $a_2 = 0,000874322509$, $a_3 = 0,00369967536$, $a_4 = 0,002041694592$ και $a_5 = 0,999964082689$

u_{slip}	$\varepsilon_{g,lim}$
0.5	0.9945
1	0.9935
2	0.9895
3	0.9855
4	0.9825
5	0.9805



Εικόνα 5.3: Μεταβολή κρίσιμης τιμής κλάσματος κενού

5.2.2 Παρεμβολή σημείων και πύκνωση δεδομένων εκπαίδευσης

Με σκοπό την αποτελεσματικότερη εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου, καθορίστηκε μια διαδικασία πύκνωσης των παραπάνω δεδομένων. Η διαδικασία αυτή έχει διττό χαρακτήρα καθώς κατά την εφαρμογή της, εκτός της παρεμβολής νέων σημείων μεταξύ των ήδη υπολογισθέντων, γίνεται ακόμη και αποκλεισμός των σημείων για τα οποία ο κώδικας της Fortran δεν συνέκλινε. Τα

αποκλεισμένα αυτά σημεία πιθανότητα αποτελούν εσφαλμένες τιμές σύγκλισης της επίλυσης του συστήματος του EMMS και γι' αυτό δεν λαμβάνονται υπόψη.

Η πύκνωση και ο καθαρισμός των δεδομένων εκπαίδευσης πραγματοποιήθηκε μέσω συναρτήσεων που αναπτύχθηκαν στην MATLAB για τον σκοπό αυτό, τόσο για τα δεδομένα της πυκνής περιοχής όσο και της αραιής. Η συνάρτηση καθαρισμού των δεδομένων εφαρμόζεται αποκλειστικά στην περιοχή με $\varepsilon_g < 0,82$ καθώς όλες οι τιμές που παρουσιάζουν απόκλιση σε σχέση με τις γειτονικές τους εμφανίζονται σε αυτή την περιοχή και συνήθως στις μικρότερες τιμές του ε_g .

Κατά την διαδικασία του αποκλεισμού, για κάθε τιμή της ταχύτητας ολίσθησης U_{slip} , παρεμβάλλεται πολυώνυμο τρίτου βαθμού μεταξύ των τιμών του συντελεστή ετερογένειας H_d συναρτήσει του κλάσματος κενού ε_g για τιμές του ε_g από 0,64 έως 0,82. Στη συνέχεια οι διαθέσιμες τιμές του συντελεστή ετερογένειας H_d για κάθε ε_g , συγκρίνονται με τις αντίστοιχες τιμές που προκύπτουν από το παρεμβαλλόμενο πολυώνυμο. Όταν μία τιμή του συντελεστή ετερογένειας παρουσιάζει απόκλιση $>15\%$ από την προκύπτουσα από το πολυώνυμο τιμή, τότε η τιμή αυτή αντικαθίσταται από την τιμή του πολυωνύμου. Αφού ολοκληρωθεί ο έλεγχος όλων των σημείων με $\varepsilon_g < 0,82$, παρεμβάλλεται νέο πολυώνυμο τρίτου βαθμού μεταξύ των παραμενόντων σημείων και των σημείων που αντικαταστάθηκαν και διαδικασία ελέγχου επαναλαμβάνεται με το όριο αποκλεισμού αυτή την φορά να τίθεται στο 10% αντί του 15% που ήταν στον πρώτο έλεγχο. Με τον τρόπο αυτό εξασφαλίζεται ότι κατά την πύκνωση των δεδομένων, οι εσφαλμένες αρχικές τιμές του συντελεστή ετερογένειας δεν θα επηρεάσουν σε μεγάλο βαθμό την παρεμβολή των νέων σημείων και ότι τα νέα δεδομένα εκπαίδευσης δεν θα παρουσιάζουν σημαντικές αποκλίσεις σε σχέση με το εάν είχαν προκύψει κανονικά από την επίλυση των εξισώσεων του EMMS.

Μετά την εκτέλεση της συνάρτησης αποκλεισμού δεδομένων ακολουθεί η διαδικασία πύκνωσης αυτών. Η διαδικασία που αναπτύχθηκε πυκνώνει το σύνολο των δεδομένων εκπαίδευσης τόσο ως προς τις τιμές του U_{slip} όσο και ως προς τις τιμές του ε_g . Λόγο της διαφορετικής συμπεριφοράς του συντελεστή ετερογένειας ως προς την μεταβολή του U_{slip} και του ε_g , ακολουθείται διαφορετική μέθοδος παρεμβολής νέων σημείων ως προς την κάθε μεταβλητή.

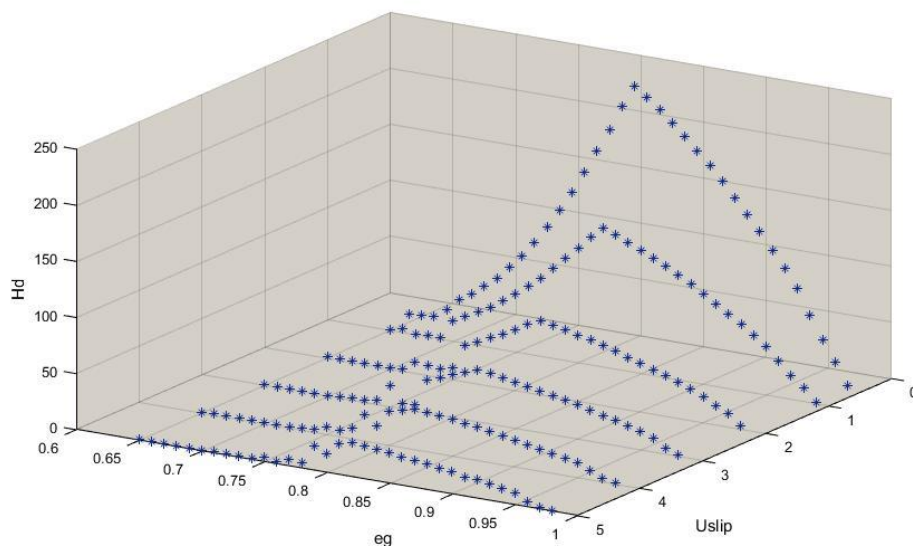
Για την παρεμβολή νέων σημείων ως προς την ταχύτητα ολίσθησης U_{slip} στην συγκεκριμένη εργασία υιοθετήθηκε η τακτική που εφαρμόζεται και στην εργασία των Zeneli M. et al [42], η οποία είναι η μέθοδος της γραμμικής παρεμβολής μεταξύ των υπάρχοντων σημείων. Για τις τιμές αυτές η μέθοδος της γραμμικής παρεμβολής δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα. Κατά την εφαρμογή της συνάρτησης καθορίζεται το πλήθος k των παρεμβαλλόμενων σημείων μεταξύ δύο τιμών της ταχύτητας ολίσθησης και υπολογίζονται οι τιμές U_{slip} και H_d των νέων σημείων.

Στην συνέχεια ακολούθησε η παρεμβολή νέων σημείων ως προς την μεταβλητή του ε_g . Το πλήθος των παρεμβαλλόμενων τιμών p ως προς ε_g μεταξύ δύο σημείων, καθορίζεται ξεχωριστά ενώ οι νέες τιμές του ε_g προκύπτουν κατανέμονται ομοιόμορφα μεταξύ των δύο προηγούμενων.

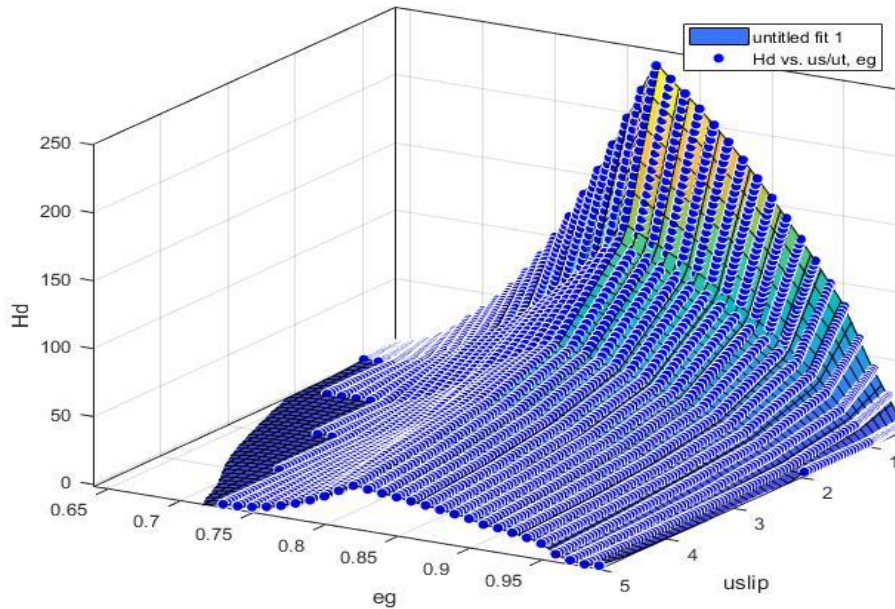
Για τον υπολογισμό των τιμών του συντελεστή ετερογένειας H_d εφαρμόζεται περιεχόμενη στο MATLAB μέθοδος τρισδιάστατης παρεμβολής επιφανείας "biharmonic interpolation". Πρόκειται επι της ουσίας για μία μέθοδο παρεμβολής με χρήση ακτινικών συναρτήσεων βάσης (radial basis functions-RBF). Κατά τις μεθόδους παρεμβολής RBF το γνωστό σημείο γίνεται μέρος ενός πολυωνύμου που ονομάζεται Spline. Ανήκουν στις ντετερμινιστικές μεθόδους και η παρεμβολή είναι

τοπική. Η επιφάνεια παρεμβολής που παράγεται περνάει ακριβώς από τα σημεία της δειγματοληψίας ενώ υπάρχει η δυνατότητα να προβλέψουν τιμές μεγαλύτερες από τη μέγιστη τιμή μεταβλητής και μικρότερες από την ελάχιστη τιμή μεταβλητής της δειγματοληψίας [67]. Εισάγοντας στην ενσωματωμένη εφαρμογή της MATLAB τα δεδομένα που προέκυψαν μετά την πύκνωση κατά U_{slip} , καθορίζεται σύμφωνα με την παραπάνω μέθοδο η επιφάνεια στην οποία κινούνται οι τιμές του συντελεστή ετερογένειας για κάθε ενδιάμεση τιμή του ϵ_g . Στην συνέχεια το μοντέλο αυτό καλείται για να υπολογίσει τις νέες παρεμβαλλόμενες τιμές του συντελεστή ετερογένειας H_d κατά ϵ_g .

Στα παρακάτω διαγράμματα παρουσιάζονται τα δεδομένα εκπαίδευσης πριν και μετά την διαδικασία πύκνωσής τους. Στην Εικόνα 5.4 παρουσιάζονται τα δεδομένα όπως αυτά προέκυψαν από την επίλυση των εξισώσεων του EMMS από τον κώδικα της Fortran. Τα δεδομένα αυτά αποτελούνται από τους συντελεστές ετερογένειας συναρτήσει της ταχύτητας ολίσθησης και του κλάσματος κενού. Στην Εικόνα 5.5 παρουσιάζονται τα δεδομένα των συντελεστών ετερογένειας μετά την διαδικασία πύκνωσης τους όπως αυτή περιεγράφηκε παραπάνω. Τα πυκνωμένα αυτά δεδομένα στη συνέχεια θα χρησιμοποιηθούν για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου.



Εικόνα 5.4: Μη πυκνωμένα δεδομένα



Εικόνα 5.5: Πυκνωμένα δεδομένα

5.2.3 Εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου

Έπειτα της διαδικασίας πύκνωσης των διαθέσιμων δεδομένων για την υπό εξέταση περίπτωση ακολούθησε η διαδικασία εκπαίδευσης του δικτύου με τα δεδομένα αυτά. Από την εργαλειοθήκη της MATLAB επιλέχθηκε η εφαρμογή Neural Net Fitting για την εκπαίδευση και ανάπτυξη του νευρωνικού δικτύου. Για την περιοχή της αραιής φάση χρησιμοποιήθηκαν 60256 δεδομένα τιμών τα οποία προέκυψαν έπειτα από πύκνωση των δεδομένων που εξήχθησαν από τον κώδικα της Fortran ενώ για την περιοχή της πυκνής φάσης χρησιμοποιήθηκαν 61321 δεδομένα τιμών.

Στο πλαίσιο της αρχικής ανάπτυξης νευρωνικού δικτύου για την επαλήθευση της ιδέας για την συγκεκριμένη κατάσταση λειτουργίας, η περιοχή της πυκνής φάσης χωρίστηκε σε τρία τμήματα ως προς την τιμή του κλάσματος κενού ε_g προκειμένου να βελτιωθεί η ακρίβεια πρόβλεψης του συντελεστή ετερογένειας στην εκάστοτε περιοχή. Η επιλογή των περιοχών αυτών προέκυψε μετά από μία σειρά δοκιμών που πραγματοποιήθηκαν. Από τις δοκιμές αυτές προέκυψε ότι ο βέλτιστος τρόπος διαχωρισμού των δεδομένων της πυκνής φάσης είναι να γίνει στα σημεία όπου συμπεριφορά των τιμών του συντελεστή ετερογένειας μεταβάλλεται σημαντικά. Έτσι για $\varepsilon_g < 0,75$ παρατηρήθηκε ότι η τιμές του συντελεστή ετερογένειας κυμαίνονται σε ιδιαίτερα χαμηλές τιμές ενώ παρουσιάζουν και μία μικρή διασπορά ως προς την γενική αύξουσα τάση τους. Για τιμές του $0,75 < \varepsilon_g < 0,82$ παρατηρείται μία απότομη αύξουσα συμπεριφορά των τιμών του συντελεστή ετερογένειας φτάνοντας την μέγιστη τιμή για $\varepsilon_g = 0,82$. Για μεγαλύτερες τιμές του ε_g , οι τιμές του συντελεστή ετερογένειας παρουσιάζουν φθίνουσα συμπεριφορά. Με βάση τα παραπάνω οι περιοχές στις οποίες χωρίστηκαν τα δεδομένα της πυκνής φάσης είναι :

Περιοχή 1: $\varepsilon_g < 0,75$

Περιοχή 2: $0,75 \leq \varepsilon_g \leq 0,82$

Περιοχή 3: $0,82 < \varepsilon_g < 0,95$

Για κάθε μία από τις παραπάνω περιοχές εκπαιδεύτηκε ένα νευρωνικό δίκτυο. Κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης το σετ δεδομένων μοιράστηκε σε σετ εκπαίδευσης, σετ αξιολόγησης και σετ δοκιμής. Ο παραπάνω διαχωρισμός γίνεται κατά τυχαίο τρόπο από την εφαρμογή της MATLAB ενώ το ποσοστό του συνόλου δεδομένων που θα περιέχονται σε κάθε σετ προκαθορίζεται από τον χρήστη. Στην εργασία αυτή επιλέχθηκε η κατανομή των δεδομένων να είναι:

- **Σετ εκπαίδευσης: 70%**

Τα δεδομένα αυτά εισάγονται στο δίκτυο κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης και δίκτυο προσαρμόζεται ανάλογα με το σφάλμα που προκύπτει σε σύγκριση με τις τιμές των δεδομένων αυτών.

- **Σετ αξιολόγησης: 15%**

Στο σετ αυτό εμπεριέχονται τα δεδομένα που χρησιμοποιούνται για να μετρηθεί η γενίκευση του δικτύου καθώς και για να τερματιστεί η διαδικασία της εκπαίδευσης όταν η γενίκευση του δικτύου σταματήσει να παρουσιάζει βελτίωση.

- **Σετ δοκιμής: 15%**

Τα δεδομένα αυτά δεν έχουν καμία επιρροή στην εκπαίδευση του δικτύου και έτσι χρησιμοποιούνται για να παρέχουν έναν ανεξάρτητο μέτρο για την μέτρηση της απόδοσης του δικτύου κατά και μετά της εκπαίδευση.

Μετά τον διαχωρισμό των αρχικών δεδομένων θα πρέπει να καθοριστεί η δομή του δικτιού. Στο σημείο αυτό επιλέγεται τόσο ο αριθμός των κρυφών επιπέδων και των επιπέδων εξόδου όσο και των νευρώνων του κάθε επιπέδου. Η επιλογή της κατάλληλης δομής του δικτύου) είναι μία διαδικασία δοκιμής και σφάλματος καθώς δεν υπάρχει προκαθορισμένος τρόπος δόμησης του δικτύου που να εξασφαλίζει την βέλτιστη αποτελεσματικότητα αυτού. Μετά από μία σειρά δοκιμών επιλέχθηκε η παρακάτω δομή του νευρωνικού δικτύου για κάθε υπο-περιοχή της πυκνής φάσης, η οποία παρουσίασε ικανοποιητικά αποτελέσματα ως προς την απόδοση του δικτύου.

	Αριθμός κρυφών επιπέδων	Αριθμός νευρώνων επιπέδου
Περιοχή 1	1	30
Περιοχή 2	1	40
Περιοχή 3	1	10

Πίνακας 5.2: Δομή νευρωνικού δικτύου

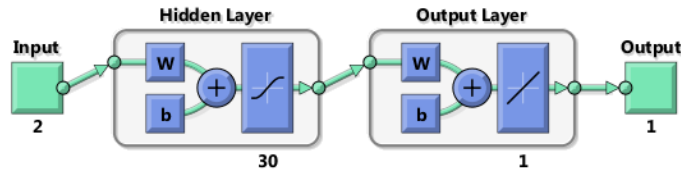
Για την εκπαίδευση των παραπάνω των παραπάνω δικτύων επιλέχθηκε ο αλγόριθμος εκπαίδευσης Levenberg-Marquardt. Τυπικά ο αλγόριθμος αυτός απαιτεί περισσότερη μνήμη αλλά λιγότερο χρόνο ενώ η διαδικασία σταματάει αυτόματα όταν η γενίκευση του δικτύου σταματήσει να βελτιώνεται. Το

γεγονός αυτό υποδεικνύεται από οποιαδήποτε αύξηση του μέσου τετραγωνικού σφάλματος του δείγματος αξιολόγησης.

5.3 Αποτελέσματα εκπαίδευσης

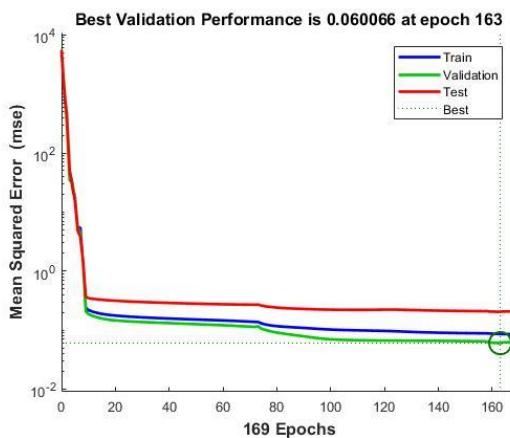
5.3.1 Πυκνή φάση Περιοχή 1

Το δίκτυο που αναπτύχθηκε για την περιοχή αυτή αποτελείται από ένα κρυφό επίπεδο με 30 συνολικά νευρώνες όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα.

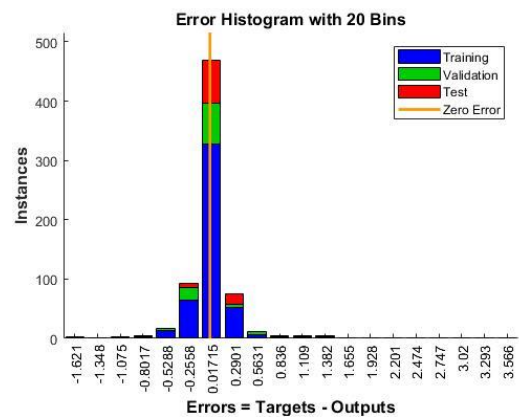


Εικόνα 5.6: Νευρωνικό δίκτυο περιοχής 1

Η εκπαίδευση του δικτύου της περιοχής 1 διήρκησε 22 δευτερόλεπτα και χρειάστηκαν 163 εποχές για να ολοκληρωθεί. Στο παρακάτω διάγραμμα φαίνεται η βελτίωση της απόδοσης του δικτύου κατά την αξιολόγηση του σε κάθε εποχή καθώς και το ιστόγραμμα σφάλματος για την εκπαίδευση αυτή.

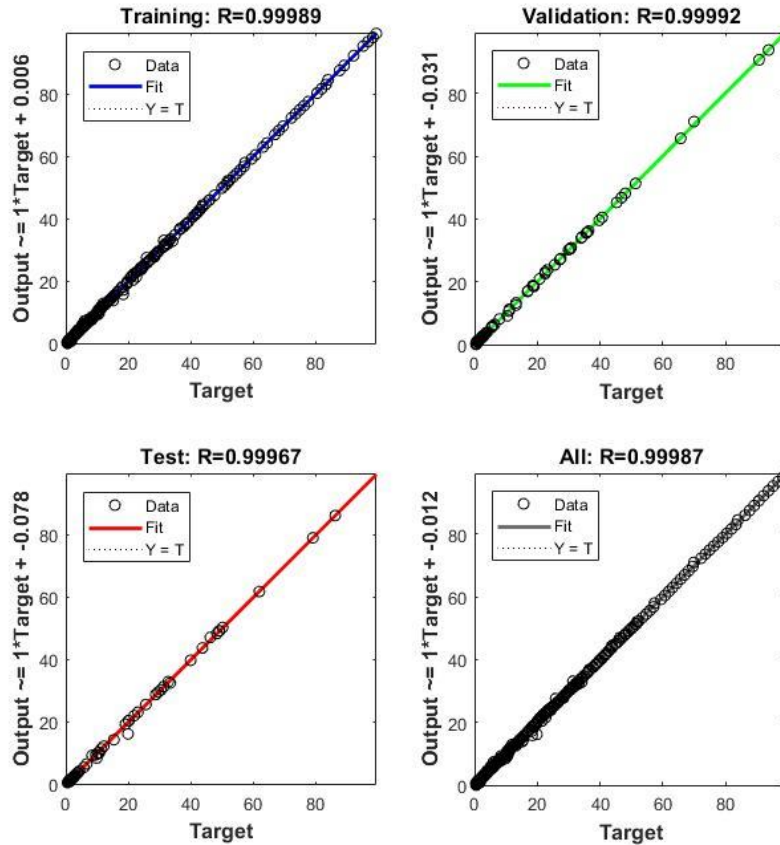


Εικόνα 5.7: διάγραμμα mse-Περιοχή 1



Εικόνα 5.8: Ιστόγραμμα σφάλματος-Περιοχή 1

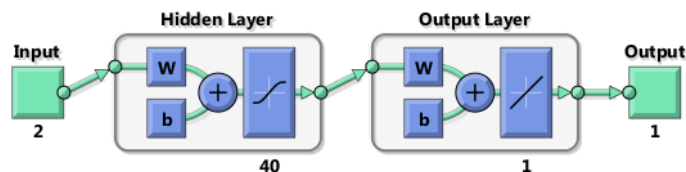
Ακόμη στα διαγράμματα του παρακάτω σχήματος παρουσιάζεται η συσχέτιση των αποτελεσμάτων του δικτύου με τους στόχους για κάθε σετ ξεχωριστά. Όπως παρατηρούμε αυτή είναι της τάξης του $R=0.999$.



Εικόνα 5.9: Διαγράμματα γραμμικής παλινδρόμησης-Περιοχής 1

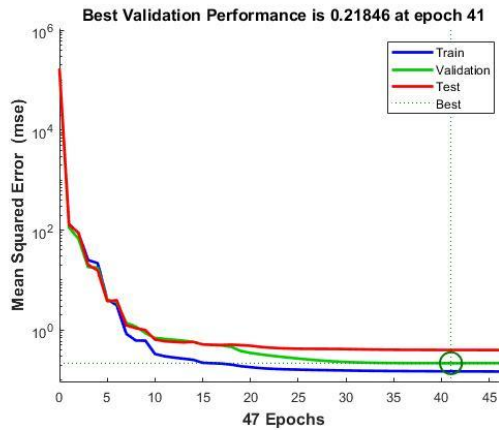
5.3.2 Πυκνή φάση Περιοχή 2

Για το δίκτυο της δεύτερης περιοχής η διάταξη που χρησιμοποιήθηκε φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Αυτό από τελείται από ένα κρυφό επίπεδος με 40 νευρώνες.

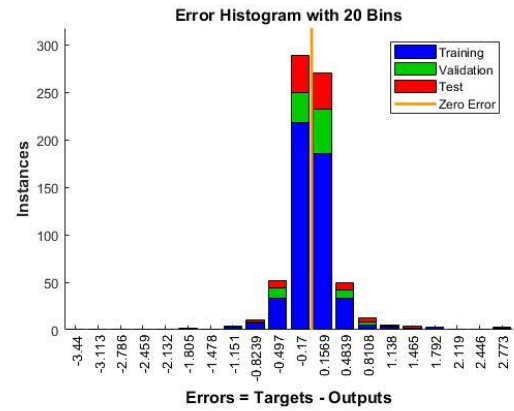


Εικόνα 5.10: Νευρωνικό δίκτυο Περιοχής 2

Η εκπαίδευση του δικτύου ολοκληρώθηκε σε μόλις 4 δευτερόλεπτα και 47 συνολικά εποχές. Παρακάτω παρουσιάζονται τα διαγράμματα της απόδοσης του δικτύου σε κάθε εποχή κατά την αξιολόγησή του καθώς και το ιστόγραμμα του σφάλματος.

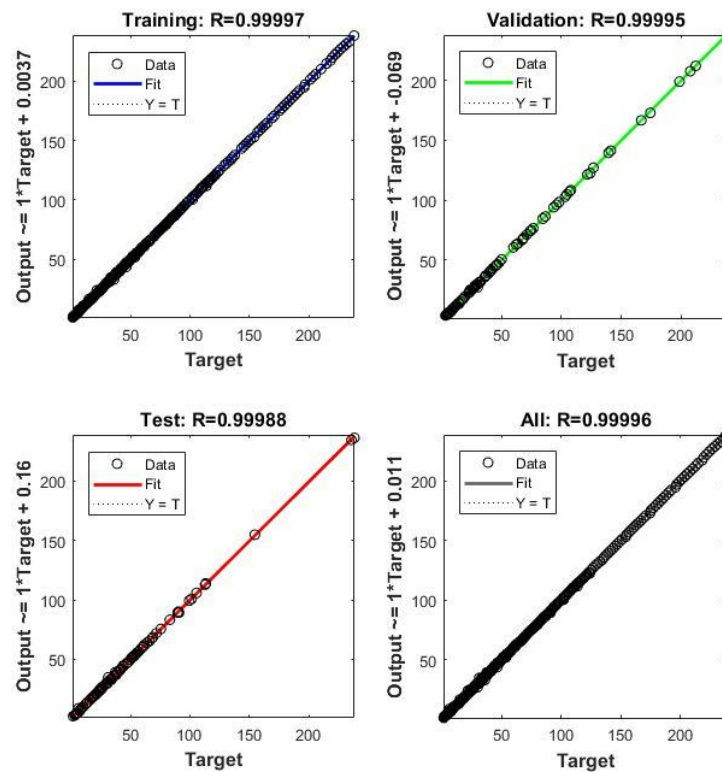


Εικόνα 5.11: Διάγραμμα mse-Περιοχή 2



Εικόνα 5.12: Ιστόγραμμα σφάλματος-Περιοχή 2

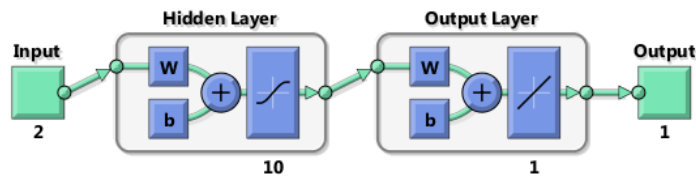
Όπως και στα δεδομένα της περιοχής ένα έτσι και σε αυτή την περίπτωση, η συσχέτιση των αποτελεσμάτων του δικτύου με τους ζητούμενους στόχους είναι της τάξης του $R=0,999$ για κάθε ένα από τα σετ δεδομένων.



Εικόνα 5.13: Διαγράμματα γραμμικής παλινδρόμησης-Περιοχής 2

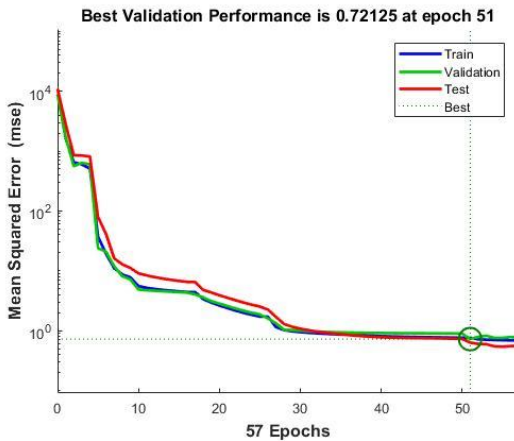
5.3.3 Πυκνή φάση Περιοχή 3

Για το δίκτυο της δεύτερης περιοχής η διάταξη που χρησιμοποιήθηκε φαίνεται στο παρακάτω σχήμα. Αυτό αποτελείται από ένα κρυφό επίπεδος με 10 νευρώνες.

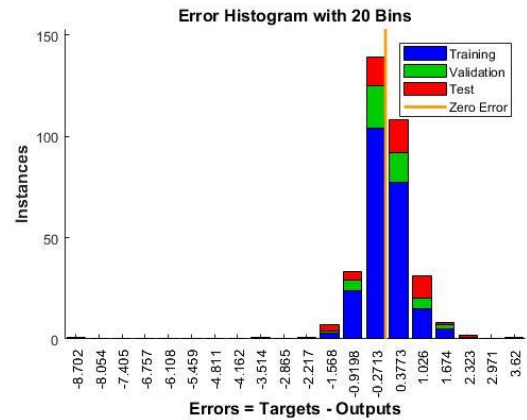


Εικόνα 5.14: Νευρωνικό δίκτυο-Περιοχή 3

Η εκπαίδευση του δικτύου ολοκληρώθηκε σε μόλις 7 δευτερόλεπτα και 51 συνολικά εποχές. Παρακάτω παρουσιάζονται τα διαγράμματα της απόδοσης του δικτύου σε κάθε εποχή κατά την αξιολόγησή του καθώς και το ιστόγραμμα του σφάλματος.

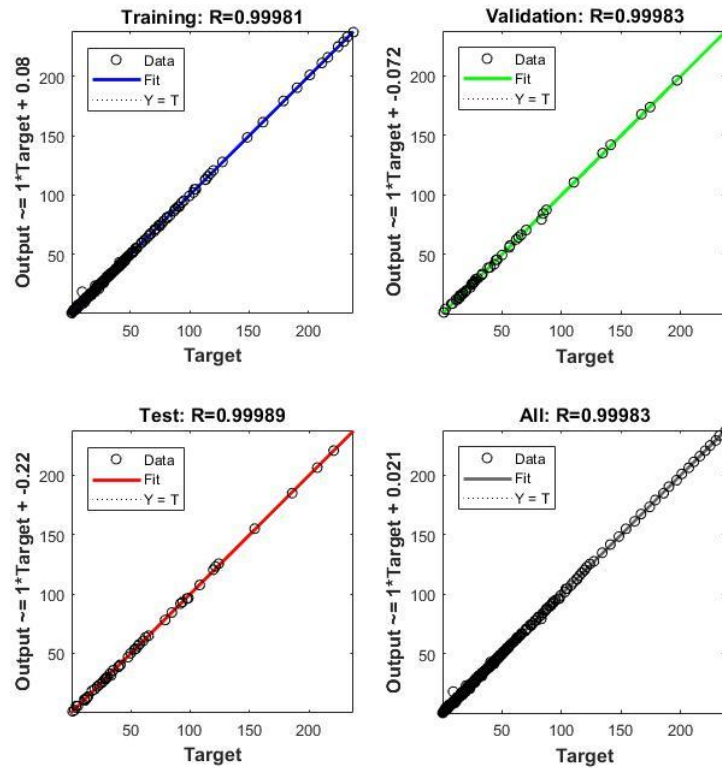


Εικόνα 5.15: Διάγραμμα mse-Περιοχή 3



Εικόνα 5.16: Ιστόγραμμα σφάλματος-Περιοχή 3

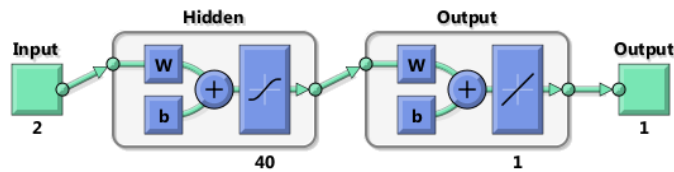
Όπως και στα δεδομένα της περιοχής ένα έτσι και σε αυτή την περίπτωση, η συσχέτιση των αποτελεσμάτων του δικτύου με τους ζητούμενους στόχους είναι της τάξης του $R=0,999$ για κάθε ένα από τα σετ δεδομένων.



Εικόνα 5.17: Διαγράμματα γραμμικής παλινδρόμησης-Περιοχής 3

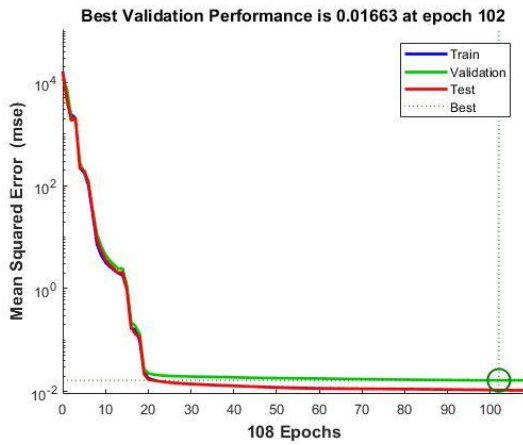
5.3.4 Αραιή φάση

Για την περιοχή της αραιής φάσης με $\epsilon_g > 0,95$, εκπαιδεύτηκε ξεχωριστό δίκτυο το οποίο αποτελείται από ένα κρυφό επίπεδο με 40 νευρώνες. Οι υπόλοιπες παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν στην εκπαίδευση των τριών δικτύων της πυκνής φάσης, όπως ο αλγόριθμος εκπαίδευσης, ο επιμερισμός των δεδομένων σε σετ εκπαίδευσης και η συνάρτηση ενεργοποίησης, παραμένουν ίδιες και σε αυτή την περίπτωση. Η δομή του δικτύου της αραιής φάσης φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.

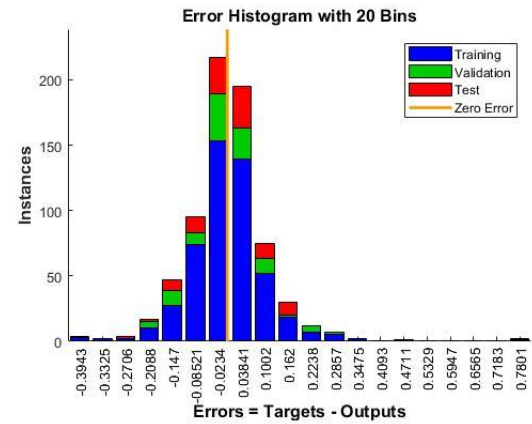


Εικόνα 5.18: Νευρωνικό δίκτυο Αραιής φάσης

Η εκπαίδευση του παραπάνω δικτύου ολοκληρώθηκε σε 14 δευτερόλεπτα και 118 εποχές ενώ η απόδοση του δικτύου κατά την διαδικασία αξιολόγησης του καθώς και το ιστόγραμμα του σφάλματος φαίνονται στα παρακάτω διαγράμματα.

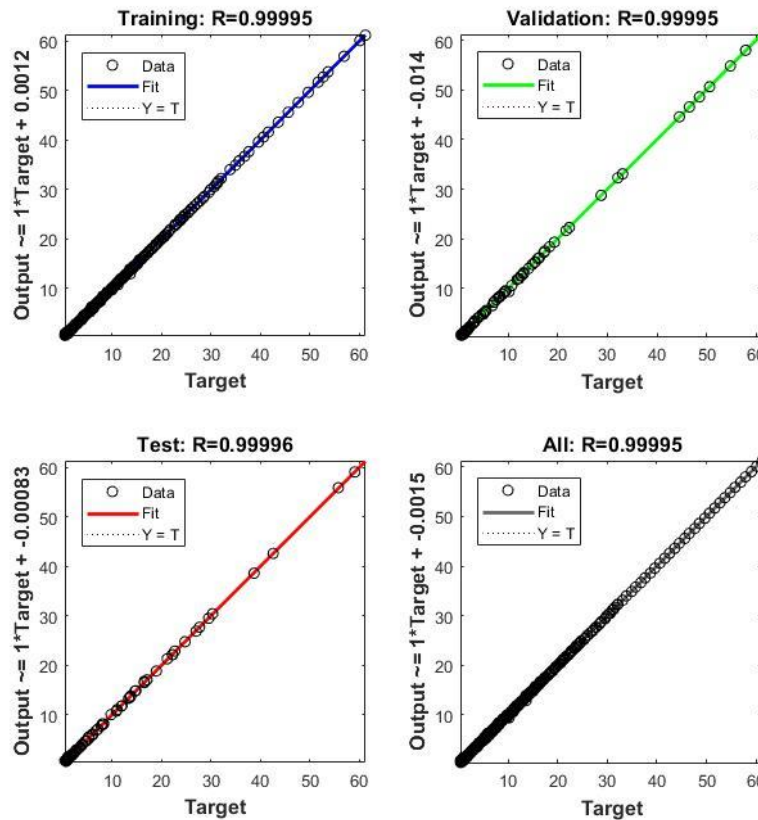


Εικόνα 5.19: Διάγραμμα mse-Αραιής φάσης



Εικόνα 5.20: Ιστόγραμμα σφάλματος-Αραιής φάσης

Η συσχέτιση των αποτελεσμάτων του δικτύου με τα ζητούμενα αποτελέσματα είναι και σε αυτή την περίπτωση της τάξης του $R=0.999$ για κάθε σέτ των δεδομένων εκπαίδευσης.



Εικόνα 5.21: Διαγράμματα γραμμικής παλινδρόμησης- Αραιή φάση

Τα δίκτυα που αναπτύχθηκαν και εκπαιδεύτηκαν παραπάνω, αξιολογήθηκαν κατόπιν της διαδικασίας εκπαίδευσης και ως προς την τιμή του μέσου ποσοστιαίου σφάλματος (mape) ανάμεσα στις τιμές που προέβλεψε το δίκτυο και της ζητούμενες τιμές. Οι τιμές τόσο του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mse) όσο και του μέσου απόλυτου ποσοστιαίου σφάλματος φαίνονται στο παρακάτω πίνακα.

$$mape = \frac{1}{n} \sum_1^n \left| \frac{Hd_{FORTRAN} - Hd_{ANN}}{Hd_{FORTRAN}} \right| * 100 \quad (5.2)$$

$$mse = \frac{1}{n} \sum_1^n (Hd_{FORTRAN} - Hd_{ANN})^2 \quad (5.3)$$

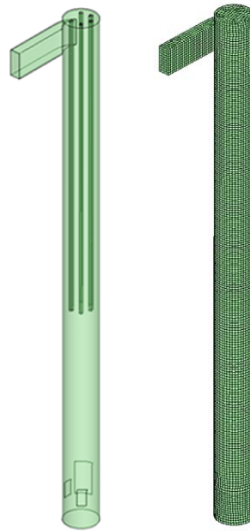
		mse	Mape %
	Περιοχή 1	0.06	4.5
Πυκνή φάση	Περιοχή 2	0.218	1.52
	Περιοχή 3	0.721	4.66
	Αραιή φάση	0.016	3.72

Πίνακας 5.3: Αποτελέσματα αξιολόγησης δικτύων

5.4 Αξιολόγηση δικτύου μέσω CFD

Τα παραπάνω δίκτυα προστέθηκαν σε συνάρτηση που αναπτύχθηκε σε περιβάλλον MATLAB της οποίας στόχος είναι να καλέσει το κατάλληλο δίκτυο ανάλογα με την περιοχή στην οποία ανήκει το κάθε σημείο καθώς και να εφαρμόζει τον έλεγχο για την οριακή τιμή του κλάσματος κενού ϵ_g . Προκειμένου να χρησιμοποιηθεί η παραπάνω συνάρτηση στο περιβάλλον του Fluent είναι απαραίτητη η διαμόρφωσή της σε κώδικα C. Η διαμόρφωση αυτή έγινε με την χρήση της εφαρμογής ‘‘MATLAB Coder’’ η οποία μετατρέπει κώδικες γραμμένους σε περιβάλλον της MATLAB (.m) σε κώδικες C. Ο κώδικας που προέκυψε επεξεργάστηκε κατάλληλα ώστε να μπορεί να εισαχθεί ως ‘‘ορισμένη από τον χρήστη συνάρτηση’’ (udf) στο Fluent και εφαρμόστηκε για την πρόβλεψη του συντελεστή ετερογένειας στο μοντέλο της υπο εξέταση περίπτωσης λειτουργίας κλίνης.

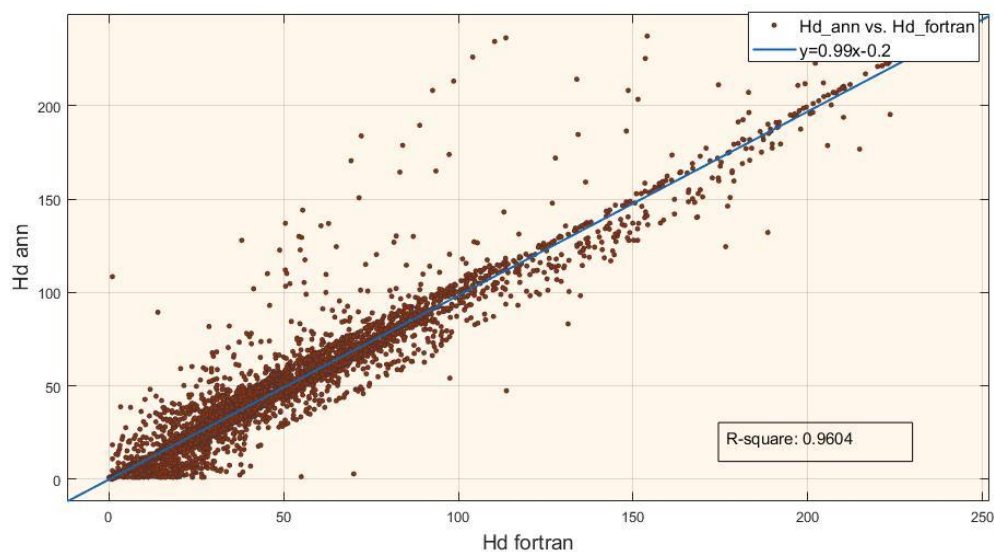
Για την αξιολόγηση του συνολικού δικτύου που αναπτύχθηκε χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο που παρουσιάστηκε στην εργασία των Zeneli et al. [42] με ελαφριές τροποποιήσεις ώστε ο συντελεστής ετερογένειας να υπολογίζεται και με τον κλασικό τρόπο, δηλαδή τα πολυώνυμα παρεμβολής που έχουν προκύψει από την εφαρμογή του κώδικα της Fortran αλλά και με την χρήση του νευρωνικού δικτύου. Το πλέγμα του παραπάνω μοντέλου παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα και αποτελείται από συνολικά 31208 κελία.



Εικόνα 5.22: Γεωμετρία κλίνης TUDA Carbonator [42]

Η παραπάνω προσομοίωση έτρεξε για ένα χρονικό βήμα (time step) και οι συντελεστές ετερογένειας οι οποίοι υπολογίστηκαν και με τους δύο τρόπους, εξήχθησαν με σκοπό την σύγκρισή τους και την τελική αξιολόγηση του νευρωνικού δικτύου.

Στο γράφημα της παρακάτω εικόνας φαίνεται η συσχέτιση των προβλεπόμενων τιμών των συντελεστών ετερογένειας κάθε κελιού με τις τιμές που υπολογίστηκαν από τον από το UDF στο fluent που υπολογίζει τους συντελεστές ετερογένειας με βάση πολυωνυμικές παρεμβολές που έχουν δημιουργηθεί από τα αποτελέσματα της Fortran . Παρατηρείται ότι για το μεγαλύτερο πλήθος των τιμών αυτών το σφάλμα μεταξύ των δύο τιμών παραμένει σε χαμηλά επίπεδα. Ο συντελεστής συσχέτισης είναι της τάξης του $R^2=0.94$ με παρεμβαλλόμενη την γραμμική σχέση $y=0.99x-0.2$



Εικόνα 5.23: Διάγραμμα γραμμικής παλινδρόμησης τελικού δικτύου

Η απόλυτη μέση τιμή του σφάλματος των παραπάνω τιμών είναι

$$\text{Err}_{\text{abs}}=1.34$$

Ενώ το μέσο απόλυτο ποσοστιαίο σφάλμα του συνολικού δικτύου προκύπτει

$$\text{Mare}=35.98\%$$

Εκ πρώτης όψεως παρατηρείται ότι αν και η κατά απόλυτη τιμή μέση διαφορά των προβλεπόμενων με της υπολογισμένες τιμές από την fortran είναι αμελητέα, αυτό δεν αντικατοπτρίζεται και από τη μέση τιμή του απόλυτου ποσοστιαίου σφάλματος. Η διαφορά αυτή οφείλεται στο γεγονός ότι στο εύρος τιμών του συντελεστή ετερογένειας ανήκουν και οι τιμές μεταξύ του μηδενός και της μονάδας. Έτσι για τιμές του συντελεστή ετερογένειας στο εύρος $[0,1]$, αν και η απόλυτη τιμή της διαφοράς μεταξύ των συγκρινόμενων τιμών είναι μικρότερη της μονάδας και δεν προβληματίζει ιδιαίτερα, το αντίστοιχο ποσοστιαίο σφάλμα είναι ιδιαίτερα υψηλό. Όπως αναδεικνύεται και στο παρακάτω ιστόγραμμα του σφάλματος για το 50% των προβλέψεων του δικτύου, το σφάλμα είναι κατά απόλυτη τιμή $<5\%$. Παρόλα αυτά παρατηρούνται ορισμένες τιμές με σφάλμα έως και 100% ή ακόμη και έως 4900% σε ορισμένες περιπτώσεις, οι οποίες ευθύνονται για της αυξημένη μέση τιμή του ποσοστιαίου σφάλματος.

Τα παραπάνω αποτελέσματα θεωρήθηκαν ιδιαίτερα ενθαρρυντικά για την περαιτέρω ανάπτυξη του νευρωνικού δικτύου και την προσπάθεια εφαρμογής του για διάφορες περιπτώσεις λειτουργίας κλινών. Με τον τρόπο αυτό επιδείχθηκε πως το εγχείρημα της ανάπτυξης ενός γενικευμένου μοντέλου πρόβλεψης των συντελεστών ετερογένειας με την χρήση νευρωνικών δικτύων είναι τεχνικά υλοποιήσιμο και η μεθοδολογία που επιλέχθηκε είναι εφαρμόσιμη.

6 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΓΕΝΙΚΕΥΣΗ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΔΙΚΤΥΟΥ

6.1 Δεδομένα εκπαίδευσης

Βασικός στόχος της παρούσας εργασίας, είναι η ανάπτυξη νευρωνικού δικτύου ικανού να προβλέπει την τιμή του συντελεστή ετερογένειας για ένα μεγάλο εύρος περιπτώσεων κλινών και συνθηκών λειτουργίας αυτών. Προκειμένου να επιτευχθεί η γενίκευση αυτή, ένα αρκετά μεγάλο πλήθος δεδομένων εκπαίδευσης είναι απαραίτητο. Η διαδικασία αναπαραγωγής των δεδομένων αυτών είναι ιδιαίτερα χρονοβόρα ενώ παράλληλα δεσμεύει σημαντική υπολογιστική ισχύει έως ότου ολοκληρωθεί.

Στην παρούσα εργασία αναπαρήχθησαν τιμές των συντελεστών ετερογένειας για συνολικά 22 διαφορετικές περιπτώσεις λειτουργίας κλινών, όπως αυτές περιγράφονται από τις τιμές των μεταβλητών:

- Διάμετρος Σωματιδίων d_p
- Πυκνότητα σωματιδίων ρ_s
- Πυκνότητα αερίου ρ_g
- Ιξώδες αερίου μ_g
- Διάμετρος αντιδραστήρα d_h

Για κάθε μία από τις περιπτώσεις αυτές υπολογίσθηκαν οι τιμές του συντελεστή ετερογένειας για ένα πλήθος το ίδιο πλήθος συνδυασμών των τιμών της ταχύτητας ολίσθησης και του κλάσματος κενού που χρησιμοποιήθηκε και στο κεφάλαιο επαλήθευσης της γενικής ιδέας. Δηλαδή:

u_{slip} : 0.5, 1, 2, 3, 4, 5

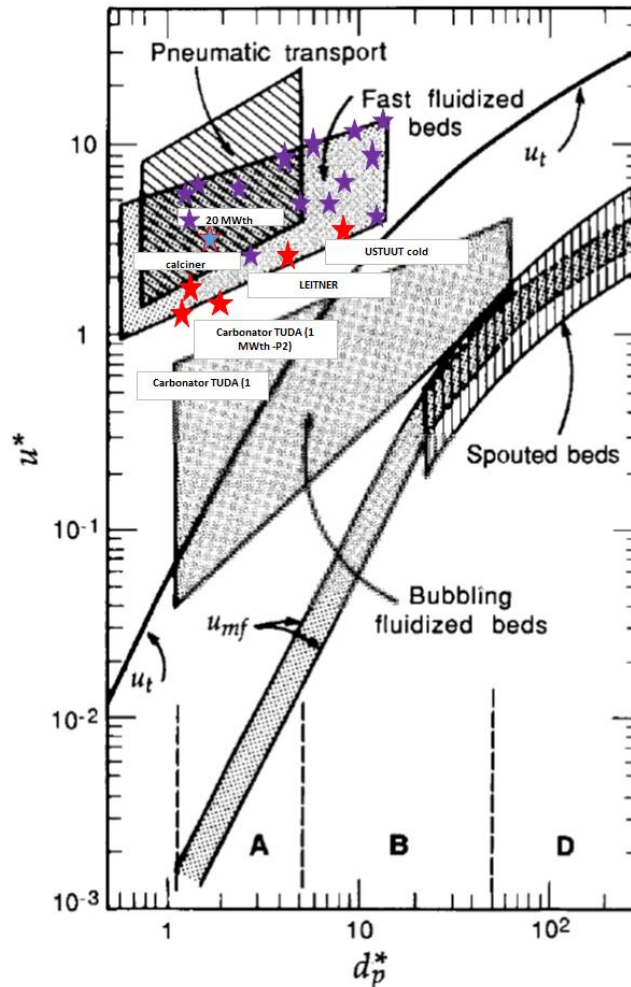
Πυκνή φάση ε_g : [0.64,0.95] με βήμα 0,01

Αραιή φάση ε_g : [0.95,0.99] με βήμα 0,001

Οι περιπτώσεις λειτουργίας κλινών που επιλέχθηκαν για να αναπαραχθούν τα δεδομένα εκπαίδευσης ανήκουν στην ευρύτερη περιοχή λειτουργίας των ταχέως ρευστοποιημένων κλινών. Πέντε συνολικά από τις περιπτώσεις αυτές αφορούν πραγματικές περιπτώσεις κλινών στις οποίες η μέθοδος EMMS έχει εφαρμοστεί και τα αποτελέσματά της έχουν επιβεβαιωθεί από αντίστοιχες πειραματικές τιμές. Οι υπόλοιπες περιπτώσεις επιλέχθηκαν με γνώμονα όσο το δυνατό την καλύτερη κάλυψη της περιοχής λειτουργίας των ταχέως ρευστοποιημένων κλινών. Με τον τρόπο αυτό επιλέχθηκαν τα σημεία που απεικονίζονται στο παρακάτω διάγραμμα Grace. Κατά την επιλογή των σημείων αποφεύχθηκαν τα σημεία με αδιάστατη τιμή της διαμέτρου των σωματιδίων $d_p^* < 1$ καθώς στο εύρος αυτό δεν έχουν επιβεβαιωθεί τα αποτελέσματα της εφαρμογής του EMMS μέσω του κώδικα της Fortran.

Στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρούνται τρεις διαφορετικοί χρωματισμοί των περιπτώσεων λειτουργίας (ΠΛ), όπου:

- ★ : Ελεγμένα σημεία με διαθέσιμες πειραματικές τιμές
- ★ : Ελεγμένο σημείο χωρίς διαθέσιμες πειραματικές τιμές
- ★ : Νέα σημεία προς έλεγχο χωρίς διαθέσιμες πειραματικές τιμές



Εικόνα 6.1: Απεικόνιση περιπτώσεων λειτουργίας κλινών

Αφού επιλέχθηκαν τα παραπάνω σημεία εξήχθησαν από το διάγραμμα οι αδιάστατες τιμές της διαμέτρου των σωματιδίων και της ταχύτητας του αερίου στις οποίες οι περιπτώσεις αυτές αντιστοιχούν. Στην συνέχεια υπολογίστηκαν οι υπόλοιπες τιμές των παραμέτρων λειτουργίας d_p , ρ_s , ρ_g , μ_g και d_h οι οποίες αντιστοιχούν στις παραπάνω αδιάστατες τιμές d_p^* και u^* . Καθώς οι επιλεγμένες τιμές των d_p^* και u^* δεν προκύπτουν από μοναδικούς συνδυασμούς των μεταβλητών d_p , ρ_s , ρ_g , μ_g και d_h , οι συνδυασμοί αυτοί επιλέχθηκαν με τέτοιο τρόπο ώστε να καλύπτεται όσο το δυνατό μεγαλύτερο εύρος πιθανών τιμών για κάθε μία από τις μεταβλητές αυτές.

Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται οι τιμές των μεταβλητών κάθε μίας από τις επιλεγμένες περιπτώσεις.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΠΤΩΣΕΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ

	d_p μm	ρ_s kg/m^3	ρ_g kg/m^3	μ_g $\text{kg}/(\text{ms})$	d_h m
ΠΛ 1	45	1700.48109	0.48109	0.000018	2
ΠΛ 2	40	7000.48109	0.8	0.000015021	4.5
ΠΛ 3	360	800	0.48109	0.000015021	4
ΠΛ 4	300	2500	0.45	0.000016	5
ΠΛ 5	100	1018.579	1.3	0.000025	1
ΠΛ 6	200	3000	1	0.000019	0.6
ΠΛ 7	250	501.773	1.5	0.000017	0.7
ΠΛ 8	140	5001.773	1.773	0.000015021	0.4
ΠΛ 9	490	601.12	0.4	0.000046	18.5
ΠΛ 10	110	2000	0.16843	0.000038	3
ΠΛ 11	1000	200.16843	0.16843	0.000065162	6
ΠΛ 12	700	1000.16843	0.18	0.00005	8
ΠΛ 13	490	601.12	0.4	0.000046	5
ΠΛ 14	60	6011.249	1.12	0.000065162	2
ΠΛ 15	490	601.12	0.4	0.000046	0.5
ΠΛ 16	450	3620	1.4	0.000064	0.4
ΠΛ 17	91.397	1650	0.389	0.0000391	0.59
ΠΛ 18	146.377	1900	0.39502 708	0.00004129	0.59
ΠΛ 19	108.432	1923.276	0.3567	0.000039515	1.700
ΠΛ 20	91.397	1650	0.3434	0.0000445	0.28- 0.3967
ΠΛ 21	260	2600	0.3068	0.000042277	0.417
ΠΛ 22	142	5700	1.225	0.000017894	0.03

Πίνακας 6.1: Πίνακας περιπτώσεων λειτουργίας

Τα δεδομένα αυτά διαχωρίστηκαν σε δεδομένα πυκνής και αραιής φάσης και οργανώθηκαν σε τμές εισόδου και επιθυμητής εξόδου με την παρακάτω διάταξη.

ΠΥΚΝΗ ΦΑΣΗ

ΠΕΡΙ Π.	Είσοδος							Έξοδος
	u_{slip}	ϵ_g	d_p	r_g	r_s	μ_g	d_h	H_d
1	0.50	0.600	0.000045000	0.481090	1700.48	0.00001800	2.00	0.45117
	0.50	0.610	0.000045000	0.481090	1700.48	0.00001800	2.00	0.44112
	0.50	0.620	0.000045000	0.481090	1700.48	0.00001800	2.00	0.43304
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
2	0.50	0.600	0.00004000	0.80	7000.48	0.00001502	4.5	0.56144
	0.50	0.610	0.00004000	0.80	7000.48	0.00001502	4.5	1.28157
	0.50	0.620	0.00004000	0.80	7000.48	0.00001502	4.5	0.91453
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
22	5	0.93	0.00014	1.225	5700	0.00001789	0.03	2.27433
	5	0.94	0.00014	1.225	5700	0.00001789	0.03	1.53236
	5	0.95	0.00014	1.225	5700	0.00001789	0.03	1.51028

Πίνακας 6.2: Ενδεικτικά δεδομένα πυκνής φάσης

ΑΡΑΙΗ ΦΑΣΗ

ΠΕΡΙ Π.	Είσοδος							Έξοδος
	u_{slip}	ϵ_g	d_p	r_g	r_s	μ_g	d_h	H_d
1	0.50	0.950	0.000045000	0.481090	1700.48	0.00001800	2.0	22.15930
	0.50	0.951	0.000045000	0.481090	1700.48	0.00001800	2.0	21.53533
	0.50	0.952	0.000045000	0.481090	1700.48	0.00001800	2.0	20.91633
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
2	0.50	0.950	0.00004000	0.80	7000.48	0.00001502	4.5	90.02488
	0.50	0.951	0.00004000	0.80	7000.48	0.00001502	4.5	86.46944
	0.50	0.952	0.00004000	0.80	7000.48	0.00001502	4.5	82.98405
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
22	5	0.997	0.00014	1.225	5700	0.00001789	0.03	1
	5	0.998	0.00014	1.225	5700	0.00001789	0.03	1
	5	0.999	0.00014	1.225	5700	0.00001789	0.03	1

Πίνακας 6.3: Ενδεικτικά δεδομένα αραιής φάσης

Από τις παραπάνω περιπτώσεις, τα δεδομένα της περίπτωσης 18 δεν χρησιμοποιήθηκαν σε κανένα στάδιο της εκπαίδευσης παρά μόνο στην μετέπειτα αξιολόγηση του νευρωνικού δικτύου. Η μεθοδολογία αυτή υιοθετήθηκε με σκοπό να διασφαλιστεί ότι η αξιολόγηση του δικτύου θα πραγματοποιηθεί εφαρμόζοντας το σε μία περίπτωση λειτουργίας κλίνης εντελώς “άγνωστης” για το δίκτυο. Φυσικά, κατά της διαδικασία εκπαίδευσης, πραγματοποιείται σταδιακή αξιολόγηση του δικτύου με σκοπό τον τερματισμό της διαδικασία χρησιμοποιώντας δεδομένα που δεν λαμβάνουν μέρος στην εκπαίδευση. Η επιλογή των δεδομένων που θα χρησιμοποιηθούν για την αξιολόγηση κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης επιλέγονται, όπως παρουσιάστηκε κατά την επαλήθευση της γενικής ιδέας, με τυχαίο τρόπο βάση ενός προκαθορισμένου ποσοστού. Παρόλα αυτά η δομή των δεδομένων εκπαίδευσης, επιτρέπει σε δεδομένα από την ίδια περίπτωση λειτουργίας, τα οποία διαφοροποιούνται

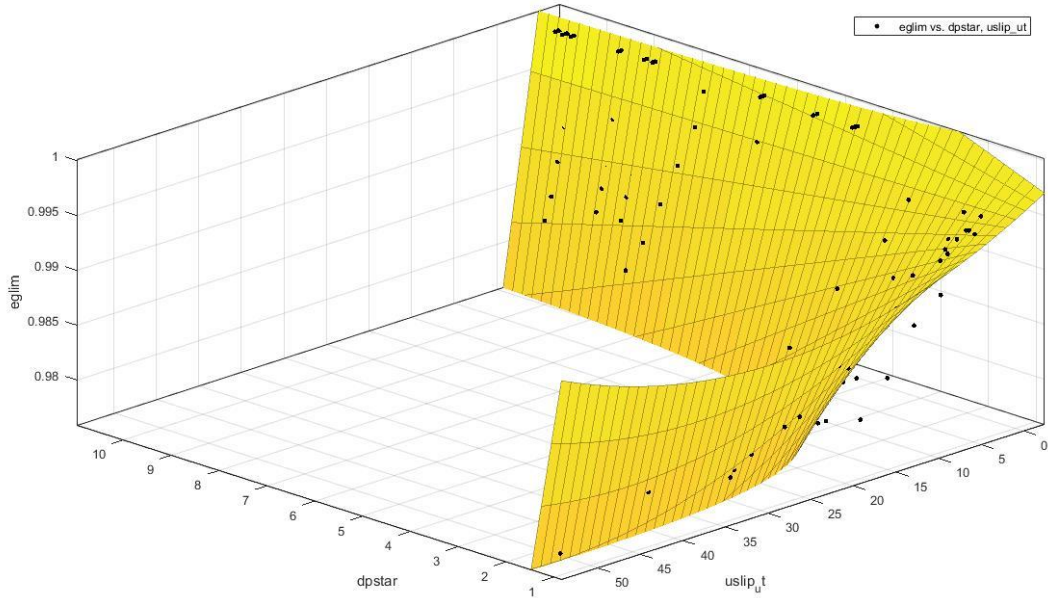
μόνο ως προς τις μεταβλητές (u_{slip} , ε_g) να χρησιμοποιούνται και στην διαδικασία της εκπαίδευσης και σε αυτή της αξιολόγησης. Προκειμένου να αποφευχθεί αυτό κρατήθηκαν τα δεδομένα της περίπτωσης 18, για την οποία υπάρχουν διαθέσιμες και πειραματικές τιμές, εκτός συνόλου εκπαίδευσης και χρησιμοποιήθηκαν μόνο για την αξιολόγηση του δικτύου.

6.2 Ανάπτυξη μοντέλου προσδιορισμού της οριακής τιμής του κλάσματος κενού

Ο προσδιορισμός της οριακής τιμής του κλάσματος κενού για οποιαδήποτε περίπτωση λειτουργίας κλίνης είναι ιδιαίτερα περίπλοκος καθώς δεν εξαρτάται αποκλειστικά από την ταχύτητα ολίσθησης, όπως στην περίπτωση που εξετάστηκε στην παράγραφο επαλήθευσης της γενικής ιδέας. Για το λόγο αυτό υπάρχει η ανάγκη συσχετισμού της οριακής τιμής του κλάσματος κενού τόσο με τις παραμέτρους που καθορίζουν της εκάστοτε περίπτωση λειτουργίας κλίνης όσο και με την παράμετρο της ταχύτητας. Η μεταβλητή της ταχύτητας ολίσθησης δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε αυτή την περίπτωση καθώς αυτή είναι ένα σχετικό μέγεθος με διαφορετική σημασία για κάθε περίπτωση λειτουργίας. Αντί αυτής, στο συγκεκριμένο μοντέλο, χρησιμοποιήθηκε μία αδιάστατη τιμή ταχύτητας η οποία ορίζεται ως το κλάσμα της ταχύτητας ολίσθησης προς την τελική (οριακή) τιμή της ταχύτητας κάθε περίπτωσης, $\frac{u_{slip}}{u_t}$, καθώς και η αδιάστατη τιμή της διαμέτρου των σωματιδίων d_p^* , ένα μέγεθος που εμπεριέχει όλες τις μεταβλητές προσδιορισμού της εκάστοτε περίπτωσης λειτουργίας κλίνης. Με τον τρόπο αυτό για κάθε περίπτωση λειτουργίας συγκεντρώθηκαν οι οριακές τιμές του κλάσματος κενού συναρτήσει της αδιάστατης ταχύτητας $\frac{u_{slip}}{u_t}$. Τα δεδομένα αυτά εισήχθησαν στην MATLAB και μέσω της εφαρμογής Curve Fitting δημιουργήθηκε το παρακάτω μοντέλο υπολογισμού της τιμής του $\varepsilon_{g,lim}$ όπου:

$$\varepsilon_{g,lim} = 7.99 \cdot 10^{-6} \cdot u^2 - 4.58 \cdot 10^{-6} \cdot dp^{*2} - 2.5 \cdot 10^{-4} \cdot u \cdot dp^* - 3.77 \cdot 10^{-4} \cdot u + 2.07 \cdot 10^{-4} \cdot dp^* + 0.995 \quad (6.1)$$

$$\text{με } u = \frac{u_{slip}}{u_t} \quad (6.2)$$



Εικόνα 6.2: Μοντέλο υπολογισμού οριακής τιμής κλάσματος κενού

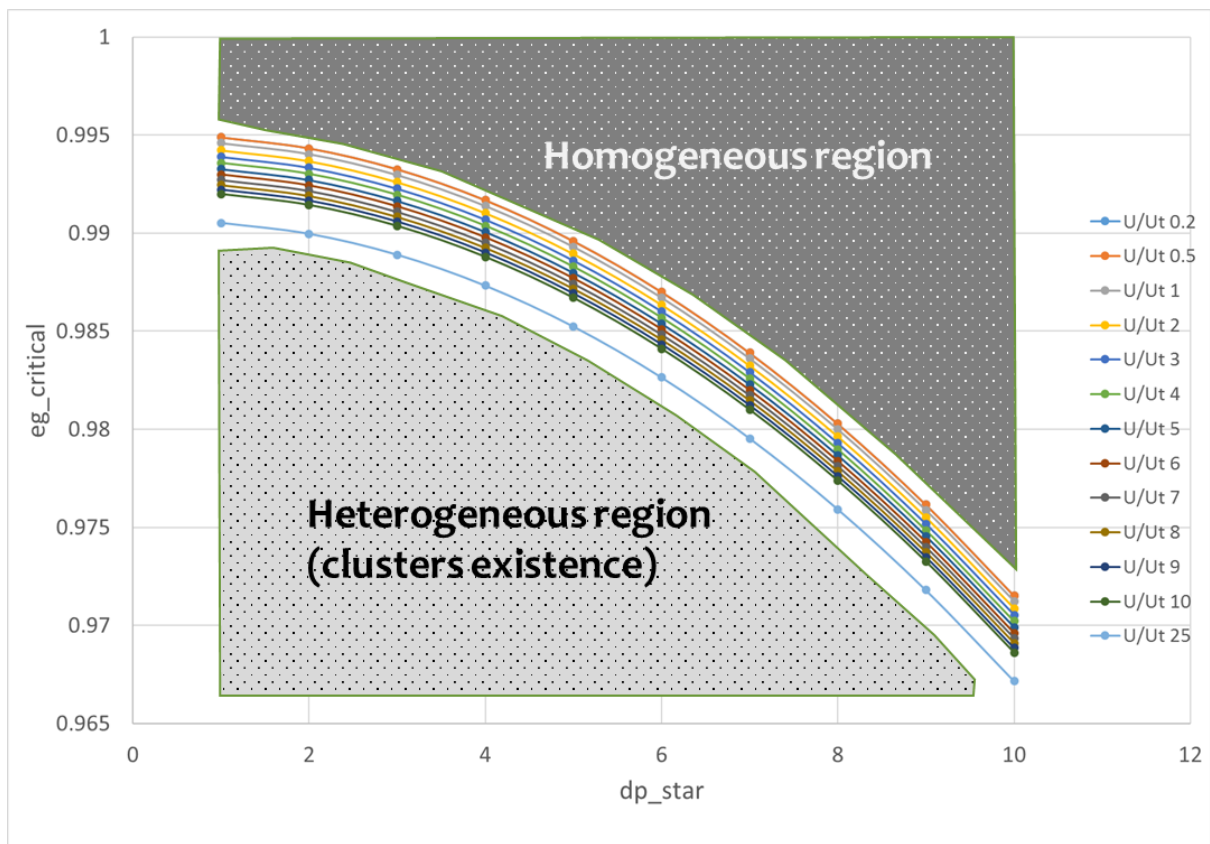
Το παραπάνω μοντέλο, με $R^2=0.65$, παρά της μικρές απώλειες σε όρους ακριβείας, δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα για,

$$0.2 < \frac{u_{slip}}{u_t} < 25 \quad \text{και}$$

$$1 < d_p^* < 10$$

Χρησιμοποιώντας το μοντέλο αυτό, έγινε μία προσπάθεια για την με σκοπό την περαιτέρω κατανόηση της συμπεριφοράς της οριακής τιμής του κλάσματος κενού. Κατά την προσπάθεια αυτή εξήχθησαν οι τιμές του $\varepsilon_{g,lim}$ για το εύρος εμπιστοσύνης του παραπάνω μοντέλου τόσο ως προς την μεταβλητή της ταχύτητας u όσο και ως προς την αδιάστατη τιμή της διαμέτρου των σωματιδίων d_p^* .

Από την βιβλιογραφική ανασκόπηση, δεν προέκυψε κάποια αντίστοιχη χαρτογράφηση της συμπεριφοράς αυτής και ως εκ τούτου, τα δεδομένα αυτά χρησιμοποιήθηκαν για την δημιουργία του παρακάτω γραφήματος το οποία αποτελεί μία πρώτη προσπάθεια χαρτογράφησης των οριακών τιμών του κλάσματος κενού.



Εικόνα 6.3: Χαρτογράφηση οριακών τιμών κλάσματος κενού

Ο προσδιορισμός μία σχέσης για τον υπολογισμό της τιμής $\varepsilon_{g,lim}$ είναι ιδιαίτερα σημαντικός καθώς, εκτός από το γεγονός ότι θέτει ένα άνω όριο για την τιμή του ε_g όπου θα εφαρμόζεται το μοντέλο του νευρωνικού δικτύου, αποτελεί και ένα χρήσιμο εργαλείο κατά την ρύθμιση της λειτουργίας μίας μονάδας για την αποφυγή ή όχι της ετερογένειας της ροής. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο για τον σχεδιασμό κλινών όπου είναι επιθυμητή είτε ομοιογενής είτε ετερογενείς ροή αλλά και για τον προσδιορισμό των τμημάτων μίας κλίνης όπου μπορούν να θεωρηθούν ως ομοιογενείς ενώ κάτι ανάλογο δεν έχει παρουσιαστεί μέχρι πρότινος στη διεθνή βιβλιογραφία. Στο παραπάνω διάγραμμα παρατηρείται για κάθε περίπτωση ταχύτητας ότι οι οριακή τιμή του κλάσματος κενού φθίνει όσο αυξάνεται η τιμή της αδιάστατης διαμέτρου των σωματιδίων ενώ παράλληλα για μεγαλύτερες τιμές του κλάσματος $\frac{u_{slip}}{u_t}$ οι τιμές του $\varepsilon_{g,lim}$ κινούνται σε χαμηλότερα επίπεδα.

6.3 Εκπαίδευση νευρωνικού δικτύου

Τα δεδομένα κάθε περίπτωσης λειτουργίας πυκνώθηκαν με την ίδια διαδικασία που περιεγράφηκε στην γενική επαλήθευση της ιδέας. Στη συνέχεια συγκεντρώθηκαν σε ένα ενιαίο σύνολο δεδομένων προκειμένου να χρησιμοποιηθούν για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου. Για την εκπαίδευση του δικτύου χρησιμοποιείτε η εφαρμογή Neural Net Fitting της MATLAB. Τόσο ο αλγόριθμος εκπαίδευσης όσο και ο επιμερισμός του συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης παραμένουν ως είχαν στην επαλήθευση της ιδέας, δηλαδή ως αλγόριθμος εκπαίδευσης επιλέγεται ο Levenberg-Marquardt και η αναλογία:

Σετ εκπαίδευσης: 70%

Σετ αξιολόγησης: 15%

Σετ δοκιμής: 15%

Για την περιοχή της αραιής φάσης εκπαιδεύτηκε ξεχωριστό δίκτυο ενώ σε αυτή την περίπτωση η περιοχή της πυκνής φάσης χωρίστηκε σε δύο μέρη και εκπαιδεύτηκαν αντίστοιχα δύο δίκτυα.

Έτσι έχουμε

Περιοχή 1 : $\epsilon_g < 0,82$

Περιοχή 2 : $0,82 \leq \epsilon_g < 0,95$

Με αυτό τον τρόπο προέκυψε η παρακάτω δομή του των επιμέρους δικτύων.

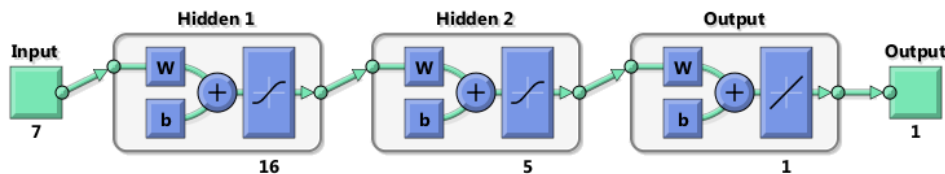
		Αριθμός κρυφών επιπέδων	Αριθμός νευρώνων επιπέδου 1	Αριθμός νευρώνων επιπέδου 2
Πυκνή φάση	Περιοχή 1	2	16	5
	Περιοχή 2	2	20	9
Αραιή φάση		2	15	8

Πίνακας 6.4: Δομή νευρωνικού δικτύου

6.4 Αποτελέσματα εκπαίδευσης

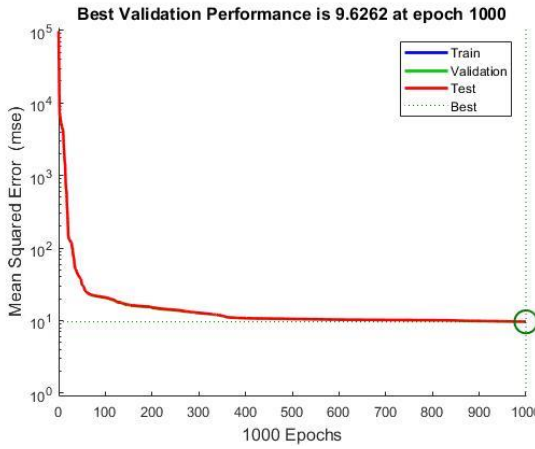
6.4.1 Πυκνή φάση Περιοχή 1

Για την εκπαίδευση του δικτύου της περιοχής 1 χρησιμοποιήθηκαν συνολικά 3.190.328 δεδομένα. Η βέλτιστη δομή του δικτύου αποτελείται από 2 κρυφά επίπεδα, το πρώτο με 16 νευρώνες και το δεύτερο με 5. Η εκπαίδευση διήρκησε συνολικά 22 ώρες 35λεπτα και 21 δευτερόλεπτα.

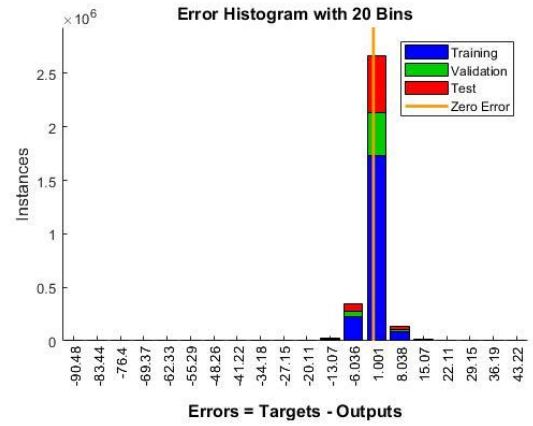


Εικόνα 6.4: Νευρωνικό δίκτυο Περιοχής 1

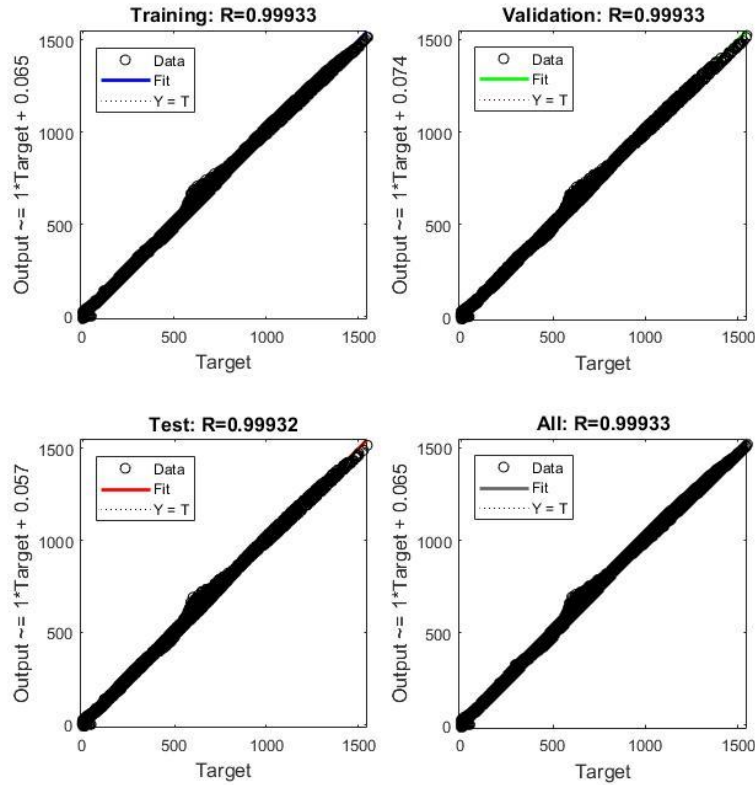
Στα παρακάτω διαγράμματα φαίνεται η απόδοση του δικτύου σε κάθε εποχή εκπαίδευσης, το ιστόγραμμα του σφάλματος καθώς και ο συσχετισμός των αποτελεσμάτων του δικτύου για κάθε σετ εκπαίδευσης.



Εικόνα 6.5: Διάγραμμα mse- Περιοχής 1



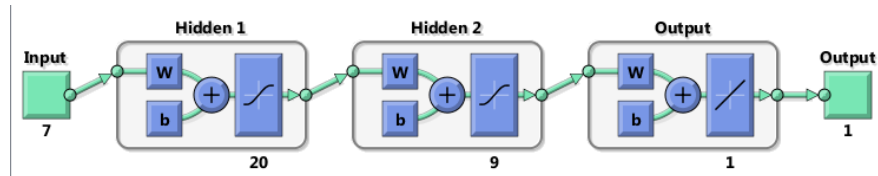
Εικόνα 6.6: Ιστόγραμμα σφάλματος- Περιοχή 1



Εικόνα 6.7: Διαγράμματα γραμμικής παλινδρόμησης- Περιοχή 1

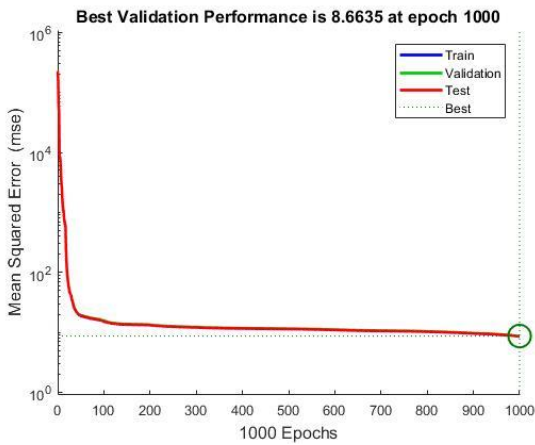
6.4.2 Πυκνή φάση Περιοχή 2

Για την εκπαίδευση του δικτύου της περιοχής 2 χρησιμοποιήθηκαν 2.383.301 δεδομένα. Η δομή του δικτύου αποτελείται από 2 κρυφά επίπεδα με 20 νευρώνες στο πρώτο και 9 στο δεύτερο. Η διαδικασία της εκπαίδευσης διήρκησε 19 ώρες 39 λεπτά και 12 δευτερόλεπτα.

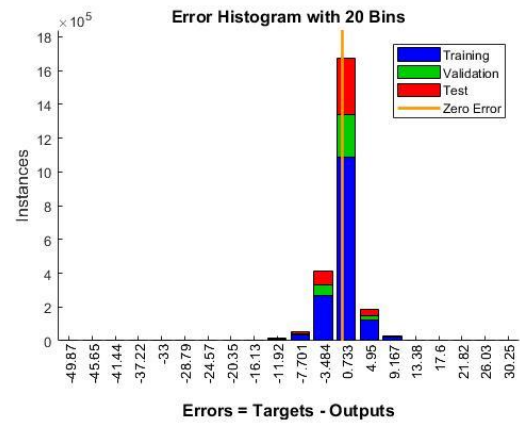


Εικόνα 6.8: Νευρωνικό δίκτυο Περιοχής 2

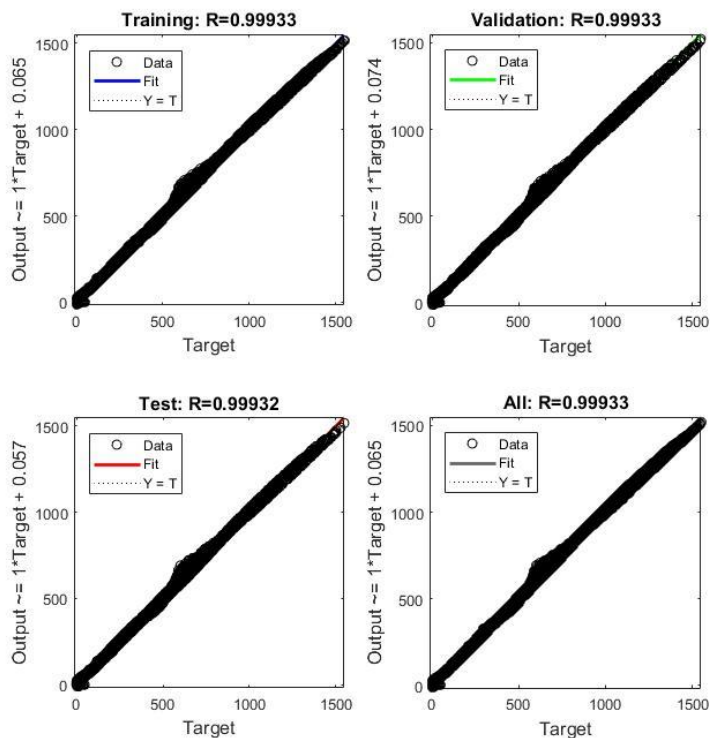
Στα παρακάτω διαγράμματα φαίνεται η απόδοση του δικτύου σε κάθε εποχή, το ιστόγραμμα σφάλματος καθώς και ο συσχετισμός των αποτελεσμάτων του δικτύου για κάθε σέτ δεδομένων εκπαίδευσης.



Εικόνα 6.9: Διάγραμμα mse- Περιοχή 2



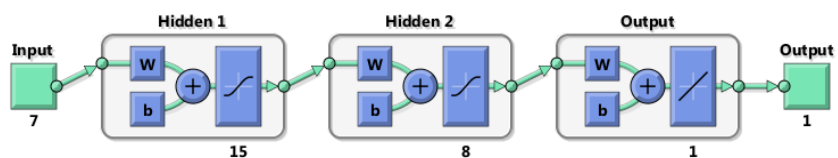
Εικόνα 6.10: Ιστόγραμμα σφάλματος- Περιοχή 2



Εικόνα 6.11: Διαγράμματα γραμμικής παλινδρόμησης Περιοχής 2

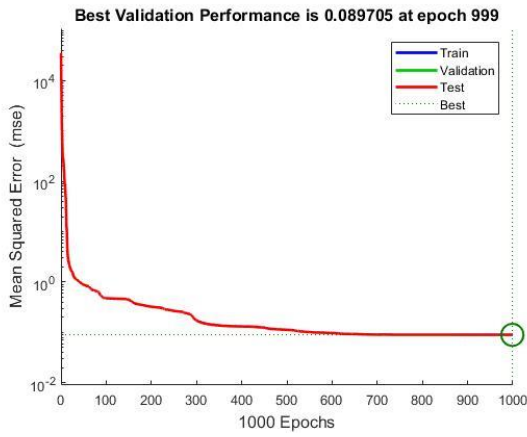
6.4.3 Αραιή φάση

Το δίκτυο της αραιής φάσης αποτελείται από δύο κρυφά επίπεδα με 15 νευρώνες στο πρώτο και 8 νευρώνες στο δεύτερο. Για την εκπαίδευση χρησιμοποιήθηκαν 7.521.622 δεδομένα ενώ η διαδικασία της εκπαίδευσης διήρκεσε 29 ώρες 46 λεπτά και 38 δευτερόλεπτα.

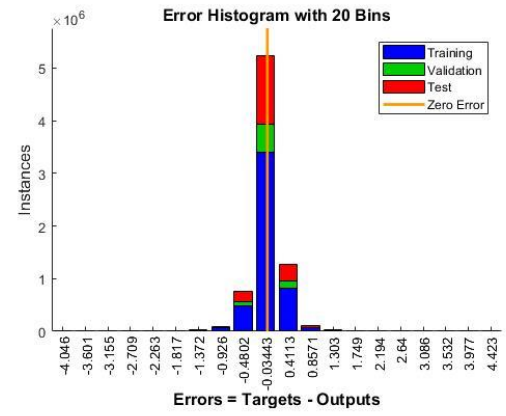


Εικόνα 6.12: Νευρωνικό δίκτυο αραιής φάσης

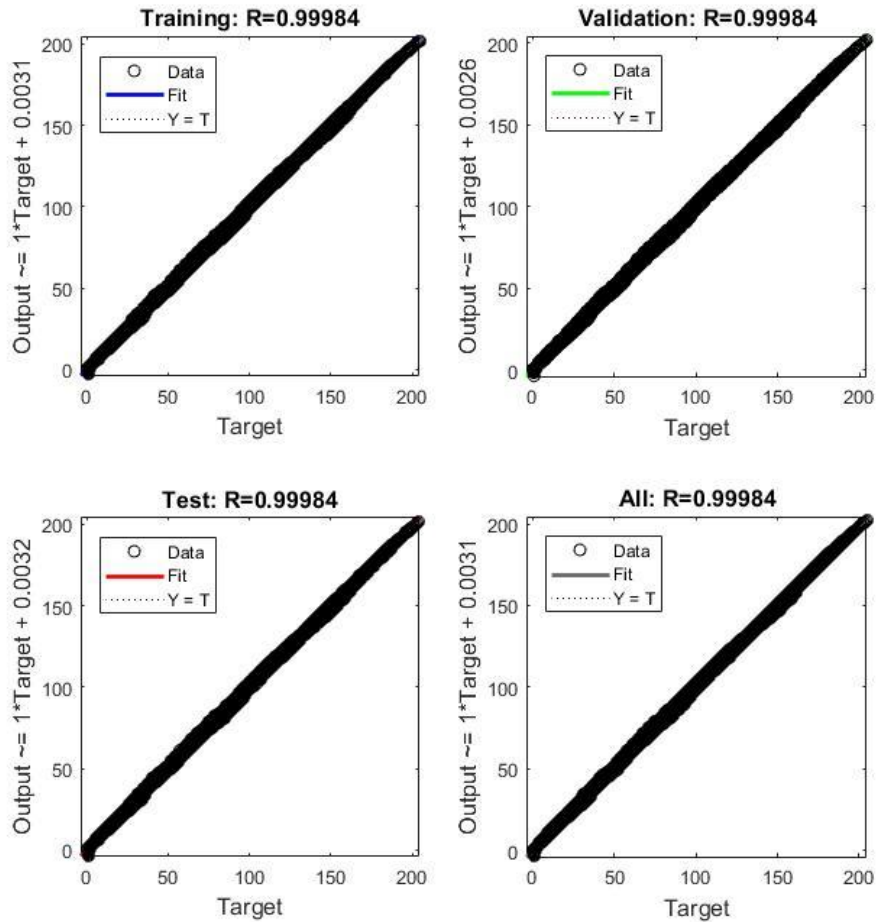
Στα παρακάτω διαγράμματα φαίνονται η απόδοση του δικτύου σε κάθε εποχή, το ιστόγραμμα του σφάλματος καθώς και ο συσχετισμών των αποτελεσμάτων για κάθε σετ εκπαίδευσης.



Εικόνα 6.13: Διάγραμμα mse-Αραιή φάση



Εικόνα 6.14: Ιστόγραμμα σφάλματος-Αραιή φάση



Εικόνα 6.15: Διαγράμματα γραμμικής παλινδρόμησης αραιής φάσης

Τα δίκτυα που αναπτύχθηκαν και εκπαιδεύτηκαν παραπάνω, αξιολογήθηκαν κατόπιν της διαδικασίας εκπαίδευσης και ως προς την τιμή του μέσου ποσοστιαίου σφάλματος (mape) ανάμεσα στις τιμές που προέβλεψε το δίκτυο και της ζητούμενες τιμές για την περίπτωση λειτουργίας 18 που διατηρήθηκε σε εκτός σερβερ εκπαίδευσης για τον σκοπό αυτό. Η περίπτωση λειτουργίας αυτή αντιστοιχεί σε πραγματική περίπτωση λειτουργίας κλίνης. Η κλίνη αυτή είναι η TUDA Carbonator 1MWth με παραμέτρους λειτουργίας όπως φαίνονται παρακάτω.

TUDA CARBONATOR P2

Διάμετρος Σωματιδίων d_p	146.377 μm
Πυκνότητα σωματιδίων ρ_s	1900 kg/m^3
Πυκνότητα αερίου ρ_g	0,395 kg/m^3
Ιξώδες αερίου μ_g	$4.13 \cdot 10^{-5}$ $\text{kg}/(\text{ms})$
Διάμετρος αντιδραστήρα d_h	0.59 m

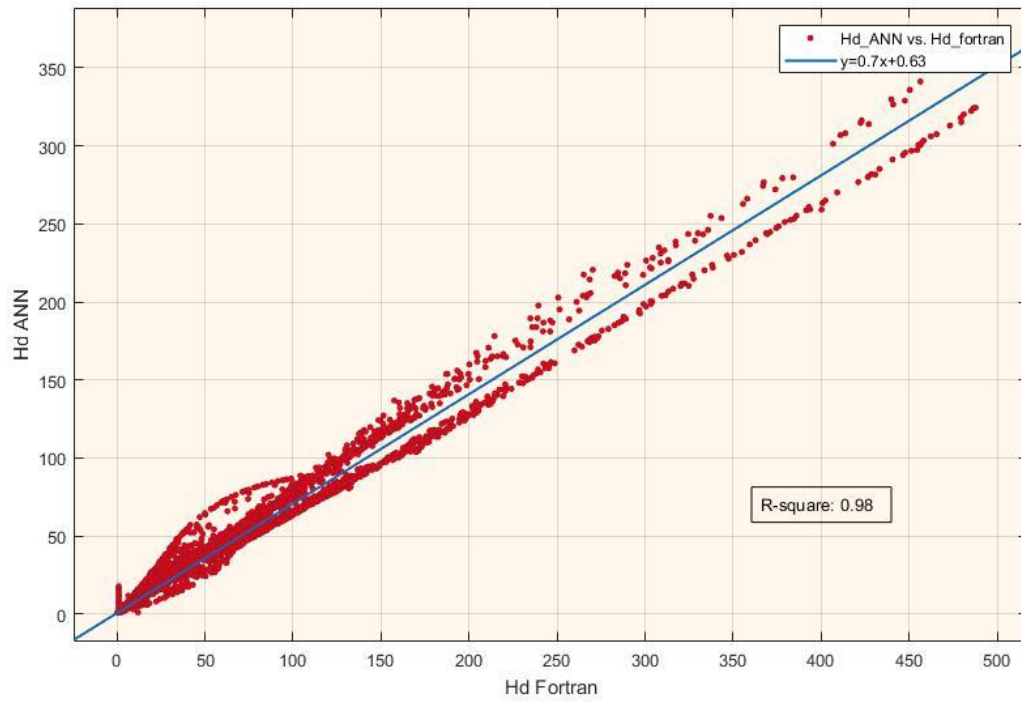
Πίνακας 6.5: Χαρακτηριστικά λειτουργίας κλίνης TUDA Carbonator P2

Οι τιμές τόσο του μέσου τετραγωνικού σφάλματος (mse) όσο και του μέσου απόλυτου ποσοστιαίου σφάλματος φαίνονται στο παρακάτω πίνακα.

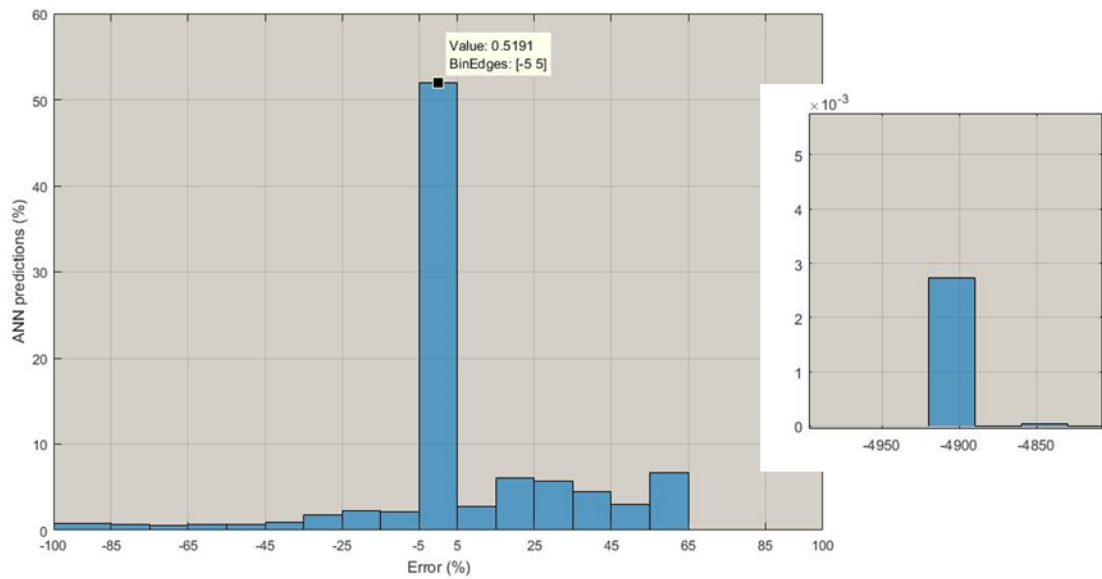
		mse	Mape %
Πυκνή φάση	Περιοχή 1	9,62	42,05
	Περιοχή 2	8,66	24,07
Αραιή φάση		0,089	22,95

Πίνακας 6.6: Αξιολόγηση νευρωνικών δικτύων

Το παραπάνω νευρωνικό δίκτυο, αφού μετατράπηκε σε κώδικα C, εισήχθη στο μοντέλο του fluent μέσω καθορισμένης από τον χρήστη συνάρτησης. Στο περιβάλλον του Fluent χρησιμοποιήθηκε το ίδιο μοντέλο, της κλίνης ενανθράκωσης (Carbonator) του TUDA, για το νέο σημείο λειτουργίας της περίπτωσης 18. Στα παρακάτω διαγράμματα βλέπουμε τόσο τον συσχετισμό των προβλέψεων του νευρωνικού δικτύου σε σχέση με τις υπολογισμένες από το EMMS τιμές μέσω του κώδικα της fortran, όσο και το ιστόγραμμα του ποσοστιαίου σφάλματος μεταξύ των τιμών αυτών για τα 31.208 κελιά ελέγχου της κλίνης. Και σε αυτή την περίπτωση ο συσχετισμός των αποτελεσμάτων είναι ικανοποιητικός ενώ ιδιαίτερα σημαντικό είναι το γεγονός ότι το ~52% των προβλέψεων παρουσιάζει απόλυτο ποσοστιαίο σφάλμα <5% ενώ για ένα μικρό ποσοστό των προβλέψεων αυτών, οι οποίες παρουσιάζουν συντελεστή ετερογένειας <1, το σφάλμα παρουσιάζει απόλυτη τιμή της τάξης του ~5000%.



Εικόνα 6.16: Διάγραμμα γραμμικής παλινδρόμησης τελικού δικτύου



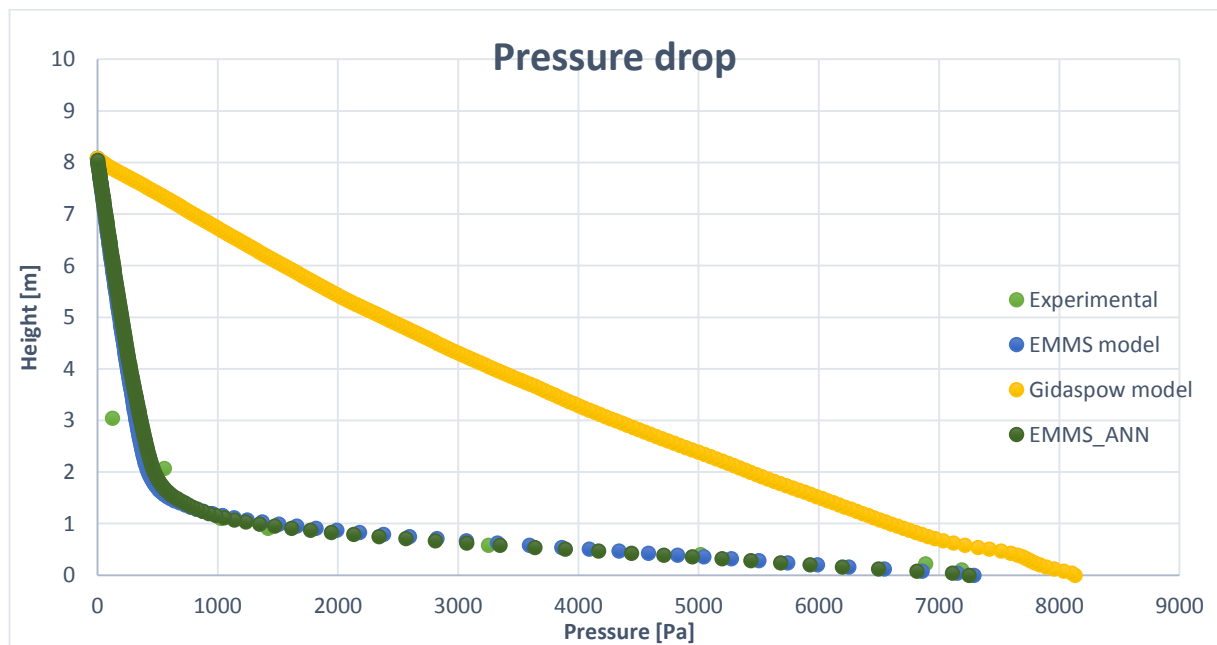
Εικόνα 6.17: Ιστόγραμμα σφάλματος τελικού δικτύου

6.5 Ανάλυση CFD

Για το συγκεκριμένο μοντέλο της κλίνης πραγματοποιήθηκε στο Fluent προσομοίωση της ροής εντός της κλίνης για συνολικά 22 δευτερόλεπτα ροής. Κατά την προσομοίωση αυτή, η ροή εντός της κλίνης προσομοιώθηκε για τρεις διαφορετικούς τρόπους υπολογισμού του συντελεστή ετερογένειας των κελιών. Τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν για συντελεστές ετερογένειας υπολογισμένους με:

- Το νευρωνικό δίκτυο
- Τον κώδικα της Fortran
- Την ενσωματωμένη στο Fluent μέθοδο Gidaspow

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για δύο βασικές παραμέτρους της ροής της κλίνης οι οποίες είναι η πτώση πίεσης καθ' ύψος της κλίνης καθώς και η ροή μάζας στην έξοδο της κλίνης.

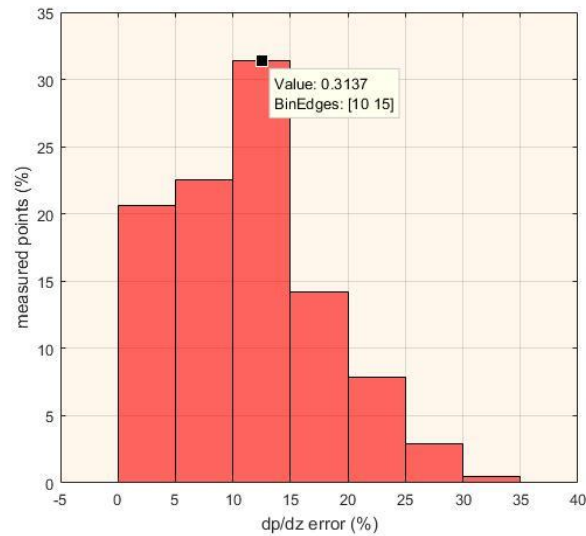


Εικόνα 6.18: Συγκριτικό διάγραμμα πτώσης πίεσης

Στο διάγραμμα αυτό παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της πτώσης πίεσης καθ' ύψος της κλίνης όπως αυτά προέκυψαν από το κάθε μοντέλο υπολογισμού της ετερογένειας κάθε κελιού και παράλληλα συγκρίνονται με τις μετρημένες πειραματικές τιμές από την πραγματική λειτουργία της συγκεκριμένης περίπτωσης λειτουργίας κλίνης. Όπως είναι εμφανές, τόσο τα αποτελέσματα που εξήχθησαν με το μοντέλο του EMMS χρησιμοποιώντας τον κώδικα της Fortran όσο και εκείνα που εξήχθησαν χρησιμοποιώντας το νευρωνικό δίκτυο, περιγράφουν με αρκετά μεγαλύτερη ακρίβεια τις πειραματικές τιμές σε σχέση με τα αποτελέσματα που προέκυψαν χρησιμοποιώντας το μοντέλο Gidaspow. Ακόμη είναι εμφανής η ταύτιση των αποτελεσμάτων του νευρωνικού δικτύου με εκείνα του κώδικα της Fortran.

Πιο συγκεκριμένα, προκειμένου να συγκριθούν τα αποτελέσματα του κλασσικού μοντέλου EMMS με το μοντέλο του νευρωνικού δικτύου, προσδιορίστηκε το σφάλμα της μεταβολής της πίεσης ως προς την μεταβολή του ύψους.

Συνολικά μετρήθηκαν οι τιμές της πίεσης σε 205 σημεία καθ' ύψος της κλίνης όπως αυτές προέκυψαν από την εφαρμογή του κλασσικού EMMS και του νευρωνικού δικτύου. Για κάθε σημείο υπολογίστηκαν οι μεταβολές $\frac{dp}{dz}$ όπου p η πίεση και z το ύψος του σημείου ως προς τον διασκορπιστή (distributor) και στην συνέχεια συγκρίθηκαν οι τιμές που προέκυψαν από το κάθε μοντέλο.



Εικόνα 6.19: Ιστόγραμμα σφάλματος μεταβολής $\frac{dp}{dz}$

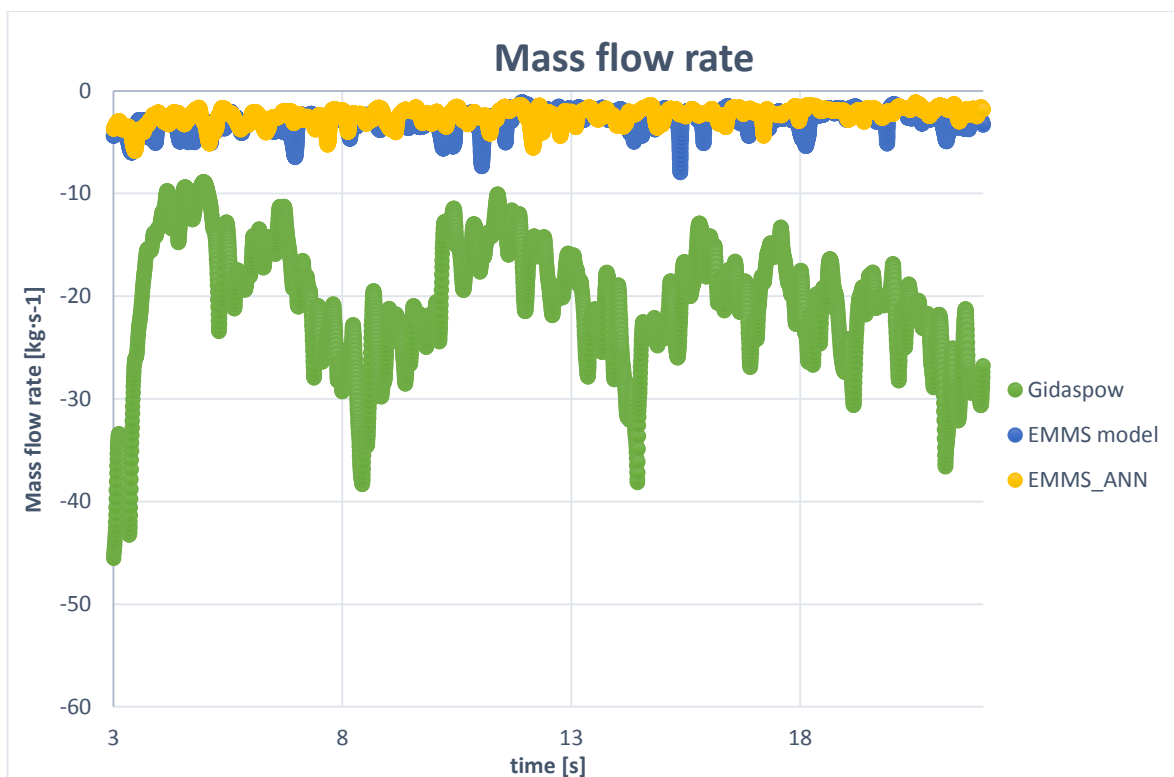
Από το παραπάνω ιστόγραμμα συμπεραίνεται ότι ~75% των τιμών που συγκρίθηκαν παρουσιάζουν σφάλμα, μεταξύ του κλασσικού μοντέλου EMMS με το νευρωνικό δίκτυο, μικρότερο του 15%. Για το σύνολο των 205 υπολογισμένων τιμών υπολογίστηκαν:

Μέση τιμή σφάλματος: 11.29%

Μέγιστη τιμή σφάλματος: 31,03 σε ύψος 1,2μ

Όπως είναι εμφανές και από το διάγραμμα πτώσης πίεσης, η μέγιστη τιμή σφάλματος $\frac{dp}{dz}$ παρατηρείται στο ύψος της κλίνης όπου παρατηρείται και η αλλαγή στον ρυθμό πτώσης της πίεσης σε σχέση με το ύψος της κλίνης.

Επιπρόσθετα εκτός του σφάλματος του μέτρου $\frac{dp}{dz}$, συγκρίθηκαν οι τιμές της πρόβλεψης του ρυθμού ροής των σωματιδίων στην έξοδο της κλίνης που προέκυψαν από τα δύο μοντέλα. Το παραπάνω μέτρο είναι ιδιαίτερα σημαντικό κατά την προσομοίωση μίας κλίνης καθώς χαρακτηρίζει την ανακυκλοφορία των σωματιδίων της κλίνης. Στο παρακάτω διάγραμμα παρουσιάζονται οι τιμές του ρυθμού ροής μάζας εκτός της κλίνης για δειγματικό χρόνο προσομοίωσης 18 δευτερολέπτων και για τα τρία μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν (Gidaspow, Emms και νευρωνικό δίκτυο).



Εικόνα 6.20: Συγκριτικό διάγραμμα ροής μάζας

Σε αυτή την περίπτωση δεν υπάρχουν πειραματικές τιμές του ρυθμού ροής μας. Παρόλα αυτά η μέθοδος Gidaspow είναι γνωστό ότι αδυνατεί να περιγράψει τις πραγματικές τιμές του μεγέθους αυτού οδηγώντας σε μεγάλες υπερεκτιμήσεις. Η μέθοδος EMMS αντίθετα προβλέπει τιμές πολύ πιο αντιπροσωπευτικές της πραγματικής κατάστασης. Στο παραπάνω διάγραμμα παρουσιάζονται οι τιμές του ρυθμού ροής μάζας για 9650 χρονικές στιγμές. Συγκρίνοντας τις τιμές που προέκυψαν από το μοντέλο EMMS και το νευρωνικό δίκτυο παρατηρείται ότι για το χρονικό διάστημα της προσομοίωσης, τόσο η μέση τιμή του ρυθμού ροής μάζας όσο και η τυπική απόκλιση για τις δύο περιπτώσεις διαμορφώνονται ως εξής:

	ΜΕΣΗ ΤΙΜΗ	ΤΥΠΙΚΗ ΑΠΟΚΛΙΣΗ
EMMS	-2.67 kg/s	0.93
ANN	-2.21 kg/s	0.63

Πίνακας 6.7: Σύγκριση αποτελεσμάτων ροής μάζας

Από τις παραπάνω τιμές παρατηρείται ότι το νευρωνικό δίκτυο προβλέπει ελαφρώς μικρότερες τιμές για τον ρυθμό ροής της μάζας με μικρότερη τυπική απόκλιση σε σύγκριση με το κλασικό μοντέλο EMMS. Αν και η απόκλιση αυτή φαίνεται σημαντική, παρόλα αυτά είναι πολύ μικρότερη από τις αποκλίσεις που προκύπτουν λόγω καταχρηστικής χρήσης των τιμών των συντελεστών ετερογένειας σε περιοχές όπου παράμετροι όπως η διάμετρος των σωματιδίων και άλλες έχουν διαφοροποιηθεί από τις αρχικές συνθήκες για τις οποίες οι συντελεστές αυτοί υπολογίστηκαν. .

7 ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν η ανάπτυξη ενός εξελιγμένου μοντέλου για των προσδιορισμό της οπισθέλκουσας δύναμης που ασκείται στα σωματίδια μίας ρευστοποιημένης κλίνης. Τα πιο διαδεδομένα μοντέλα που χρησιμοποιούνται σήμερα στις προσομοιώσεις τέτοιων ροών οδηγούν ως επί το πλείστον σε υπερεκτιμήσεις της οπισθέλκουσας δύναμης. Η αδυναμία αυτή οφείλεται κυρίως στην θεώρηση ομογενοποιημένης ροής εντός των κελιών ελέγχου του μοντέλου προσομοίωσης. Μία τέτοια θεώρηση δεν λαμβάνει υπόψιν των σχηματισμό πυκνότερων δομών σωματιδίων εντός του κελιού ελέγχου κάτι που επηρεάζει σημαντικά την ασκούμενη οπισθέλκουσα δύναμη.

Το μοντέλο EMMS βασίζεται στην θεώρηση της ύπαρξης των δομών αυτών και τις λαμβάνει υπόψιν ορίζοντας συντελεστές ετερογένειας για κάθε κελί ελέγχου προκειμένου να εισάγει στο μοντέλο τον παράγοντα της ετερογενούς ροής. Το μοντέλο EMMS παρουσιάζει σημαντικά πλεονεκτήματα ως προς την αντιπροσωπευτικότητα των αποτελεσμάτων που επιστρέφει σε σύγκριση με τα πιο διαδεδομένα μοντέλα υπολογισμού της οπισθέλκουσας όπως το μοντέλο Gidaspro. Παρόλα αυτά, η εφαρμογή του μοντέλου EMMS παρουσιάζει ορισμένες δυσκολίες. Η έως σήμερα εφαρμογή του μοντέλου απαιτεί μία ιδιαίτερα χρονοβόρα διαδικασία προσδιορισμού των πολυωνύμων υπολογισμού των συντελεστών ετερογένειας, η οποία βασίζεται σε συγκεκριμένες τιμές των χαρακτηριστικών και των παραμέτρων λειτουργίας της κλίνης. Οι παράμετροι αυτές δε ενδέχεται να μεταβάλλονται με την πάροδο του χρόνου κατά την λειτουργία της κλίνης κάτι που ο συγκεκριμένος τρόπος εφαρμογής του μοντέλου EMMS δεν λαμβάνει υπόψη. Προκειμένου να ξεπεραστούν οι δυσκολίες αυτές, στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε και εκπαιδεύτηκε ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο το οποίο καλείται να προβλέψει τους συντελεστές ετερογένειας κάθε κελιού ελέγχου ξεχωριστά δεδομένων των χαρακτηριστικών λειτουργίας της κλίνης. Το νευρωνικό δίκτυο εκπαιδεύτηκε χρησιμοποιώντας δεδομένα από 21 διαφορετικές περιπτώσεις λειτουργίας κλίνης και αξιολογήθηκε εφαρμοζόμενο σε ξεχωριστή περίπτωση λειτουργίας για την οποία υπήρχαν διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα. Κατά την διαδικασία αυτή προέκυψε δε και μία ιδιαίτερα χρήσιμη, για την διαδικασία σχεδιασμού νέων κλινών, χαρτογράφηση της ομογενούς και ετερογενούς περιοχής μίας κλίνης συνάρτηση των αδιάστατων τιμών της ταχύτητας και της διαμέτρου των σωματιδίων από την οποία μπορεί κανείς να προσδιορίσει σε ποια περιοχή λειτουργεί μια κλίνη ή μέρος αυτής βρίσκοντας την οριακή τιμή του κλάσματος κενού για τις εκάστοτε συνθήκες λειτουργίας. Ακόμη, το ανεπτυγμένο μοντέλο EMMS-ANN εφαρμόστηκε σε ανάλυση CFD για την περίπτωση λειτουργίας του TUDA Carbonator P2 όπου τα αποτελέσματα της ανάλυσης συγκρίθηκαν με τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την εφαρμογή του κλασσικού μοντέλου EMMS, του διαδεδομένου μοντέλου Gidaspro καθώς και τις πειραματικές τιμές. Τα αποτελέσματα αυτά χαρακτηρίστηκαν ως ιδιαίτερος ενθαρρυντικά. Σε σύγκριση με τα αποτελέσματα του διαδεδομένου μοντέλου Gidaspro εκείνα του μοντέλου EMMS-ANN περιγράφουν με πολύ μεγαλύτερη ακρίβεια τα πειραματικά δεδομένα ενώ η απόκλιση από τα δεδομένα του κλασσικού μοντέλου EMMS αν και δεν είναι αμελητέα, είναι μικρότερη από τις αποκλίσεις που προκύπτουν λόγω καταχρηστικής χρήσης των τιμών των συντελεστών ετερογένειας σε περιοχές όπου παράμετροι όπως η διάμετρος των σωματιδίων και άλλες έχουν διαφοροποιηθεί από τις αρχικές συνθήκες για τις οποίες οι συντελεστές αυτοί υπολογίστηκαν.

Επιπροσθέτως η εφαρμογή του μοντέλου EMMS-ANN παρουσιάζει δύο βασικά πλεονεκτήματα σε σύγκριση με το κλασικό μοντέλο EMMS. Αρχικά με την εφαρμογή του νέου μοντέλου αποφεύγεται η διαδικασία υπολογισμού των πολυωνύμων του συντελεστή ετερογένειας Hd ,μέσω του κώδικα της Fortran. Η διαδικασία αυτή απαιτεί ιδιαίτερο χρόνο καθώς για κάθε περίπτωση λειτουργίας μπορεί να διαρκέσει έως και έξι ημέρες. Η αποφυγή της διαδικασίας αυτής συνεπάγεται άμεσα και δυνατότητα εμπορικής εκμετάλλευσης του μοντέλου καθώς μπορεί να χρησιμοποιηθεί απευθείας από τον χρήστη χωρίς να είναι απαραίτητη η παράλληλη παροχή υπηρεσιών υποστήριξης για την εφαρμογή του μοντέλου σε διαφορετικές περιπτώσεις λειτουργίας. Το βασικότερο όμως πλεονέκτημα του νέο αυτού μοντέλου είναι η δυνατότητα να λαμβάνει υπόψιν την μεταβλητότητα των συνθηκών λειτουργίας και των χαρακτηριστικών της ροής της κλίνης, για κάθε όγκο ελέγχου ξεχωριστά. Η δυνατότητα αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη σε περιπτώσεις κλινών καύσης και αντιδράσεων όπου ορισμένες μεταβλητές εισόδου του μοντέλου, όπως η διάμετρος των σωματιδίων, η πυκνότητα του αερίου και η πυκνότητα των σωματιδίων, μεταβάλλονται σε ορισμένες περιοχές της κλίνης.

Παρά τα εμφανή πλεονεκτήματα του μοντέλου αυτού, υπάρχουν περιθώρια περαιτέρω βελτιστοποίησής του. Σε μελλοντικές εργασίες, περισσότερες διατάξεις και μέθοδοι εκπαίδευσης θα μπορούσαν να διερευνηθούν με σκοπό την καλύτερη γενίκευση του νευρωνικού δικτύου και την μείωση του σφάλματος πρόβλεψης των συντελεστών ετερογένειας. Για την βελτίωση της γενίκευσης του νευρωνικού δικτύου ιδιαίτερα χρήσιμη θα ήταν και η αύξηση των περιπτώσεων λειτουργίας που χρησιμοποιούνται κατά την διαδικασία της εκπαίδευσης. Ειδικότερα και με βάση εμπειρικά συμπεράσματα ένα πλήθος δεδομένων 60-80 περιπτώσεων λειτουργίας κλινών αναμένεται να φέρει σημαντική βελτίωση του νευρωνικού δικτύου. Σε κάθε περίπτωση η βελτίωση του παραπάνω μοντέλου συνεισφέρει στην γενικότερη προσπάθεια βελτίωσης των προσομοιώσεων ροών, μία ανάγκη διαρκώς εντεινόμενη στην σημερινή πραγματικότητα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] P. Basu, *Circulating Fluidized Bed Boilers-Desing, Operation and Maintenance*, vol. 4, no. 5. Halifax, Canada: Springer, 2015.
- [2] D. Kunii and O. Levenspiel, *Fluidization Engineering*. Butterworth-Heinemann, 1969.
- [3] F. Leuschke, “40 YEARS OF CIRCULATING FLUIDIZED BED (CFB) POWER PLANT TECHNOLOGY A review of the history , present status and future potential of the application of an innovative and successful combustion technology,” no. September, 2017.
- [4] J. R. Grace and F. Berruti, “Introduction and Overview,” *Can. J. Chem. Eng.*, vol. 73, pp. 577–578, 1995.
- [5] S. Benzarti, H. Mhiri, and H. Bournot, “Drag models for Simulation Gas-Solid Flow in the Bubbling Fluidized Bed of FCC Particles,” *Int. J. Chem. Mol. Eng.*, vol. 6, no. 1, pp. 111–116, 2012.
- [6] P. Basu, “Combustion of coal in circulating fluidized-bed boilers: A review,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, no. 22, pp. 5547–5557, 1999.
- [7] Ε. Κακκαράς, Σ. Καρέλλας, Π. Βουρλιώτης, Δ. Γιαννακόπουλος, and Χ. Χατζηλάου, “Αντιρρυπαντική τεχνολογία θερμικών σταθμών, Σημειώσεις-Παρουσιάσεις μαθήματος,” 2011.
- [8] J. R. Grace and B. Hsiao tao, “Circulating Fluidized Beds,” in *Handbook of Fluidization and Fluid-Particle Systems*, 2003.
- [9] A. Charitos, C. Hawthorne, A. R. Bidwe, L. Korovesis, A. Schuster, and G. Scheffknecht, “Hydrodynamic analysis of a 10kWth Calcium Looping Dual Fluidized Bed for post-combustion CO₂ capture,” *Powder Technol.*, vol. 200, no. 3, pp. 117–127, 2010.
- [10] A. Nikolopoulos, “Hydrodynamic study and design of solid circulation devices and configurations for dual fluidized bed system for CO₂ capture,” University of Stuttgart, 2006.
- [11] M. Helbig, J. Hilz, M. Haaf, A. Daikeler, J. Ströhle, and B. Epple, “Long-term Carbonate Looping Testing in a 1 MW th Pilot Plant with Hard Coal and Lignite,” *Energy Procedia*, vol. 114, no. November 2016, pp. 179–190, 2017.
- [12] L. M. Romeo *et al.*, “Oxyfuel carbonation/calcination cycle for low cost CO₂ capture in existing power plants,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 49, no. 10, pp. 2809–2814, 2008.
- [13] Lawrence J. Shadle, J. C. Ludlow, Josheph S. Mei, and C. Guenther, “Circulating Fluid-Bed Technology for Advanced Power Systems’,” in *National Energy Technology Laboratory*.
- [14] A. Nemet, C. Cheng, J. Yuan, J. Li, Z. Zhang, and F. N. Fett, “The EMMS model — its application, development and updated concepts,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, no. 22, pp. 5409–5425, 2002.
- [15] N. Yang, W. Wang, W. Ge, and J. Li, “CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient,” *Chem. Eng. J.*, vol. 96, no. 1–3, pp. 71–80, 2003.

- [16] A. Neri and D. Gidaspow, "Riser hydrodynamics: Simulation using kinetic theory," *AIChE J.*, vol. 46, no. 1, pp. 52–67, 2000.
- [17] V. Jiradilok, D. Gidaspow, S. Damronglerd, W. J. Koves, and R. Mostofi, "Kinetic theory based CFD simulation of turbulent fluidization of FCC particles in a riser," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 61, no. 17, pp. 5544–5559, 2006.
- [18] D. Gidaspow, *Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions*. Academic Press, 1994.
- [19] J. Li, Y. Tung, and M. Kwauk, *Method of Energy Minimization in Multi-Scale Modeling of Particle-Fluid Two-Phase Flow*. Pergamon Press plc, 2013.
- [20] L. G. Gibilaro, R. Di Felice, S. P. Waldram, and P. U. Foscolo, "Generalized friction factor and drag coefficient correlations for fluid-particle interactions," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 40, no. 10, pp. 1817–1823, 1985.
- [21] Y. Li, J. Zhang, and L. S. Fan, "Numerical simulation of gas-liquid-solid fluidization systems using a combined CFD-VOF-DPM method: Bubble wake behavior," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, no. 21, pp. 5101–5107, 1999.
- [22] J. Li, "Particle-fluid two-phase flow: the energy-minimization multi-scale method.," *Metall. Ind. Press*, 1994.
- [23] J. Li, "The Energy Minimization Multi-Scale Model of Gas–Solid Two-Phase Flow," *Inst. Chem. Metall. Acad. Sin. Beijing*, 1987.
- [24] Z. Shi, W. Wang, and J. Li, "A bubble-based EMMS model for gas-solid bubbling fluidization," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 66, no. 22, pp. 5541–5555, 2011.
- [25] K. Hong, Z. Shi, A. Ullah, and W. Wang, "Extending the bubble-based EMMS model to CFB riser simulations," *Powder Technol.*, vol. 266, pp. 424–432, 2014.
- [26] Q. Zhou and J. Wang, "CFD study of mixing and segregation in CFB risers: Extension of EMMS drag model to binary gas-solid flow," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 122, pp. 637–651, 2015.
- [27] A. Ullah, I. Jamil, A. Hamid, and K. Hong, "EMMS mixture model with size distribution for two-fluid simulation of riser flows," *Particuology*, vol. 38, pp. 165–173, 2018.
- [28] M. T. Zeneli, "Ανάπτυξη και διερεύνηση εξελιγμένου μοντέλου EMMS για τη μοντελοποίηση της ισοθερμοκρασιακής ροής σε ρευστοποιημένη κλίνη ανακυκλοφορίας," National Technical Univarcity of Athens, 2012.
- [29] W. Yang, *Handbook of fluidization and fluid-particle systems*. Marcel Dekker, 2003.
- [30] P. Douglas, S. De Vasconcelos, and A. L. A. Mesquita, "Minimum and Full Fluidization Velocity for Alumina Used in the Aluminum Smelter Regular Paper."
- [31] C. Y. Wen and Y. H. Yu, "A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity," *AIChE J.*, vol. 12, no. 3, pp. 610–612, 1966.
- [32] J. V. Fletcher, M. D. Deo, and F. V. Hanson, "Re-examination of minimum fluidization velocity correlations applied to Group B sands and coked sands," *Powder Technol.*, vol. 69, no. 2, pp. 147–155, 1992.

- [33] K. Suksankraisorn, S. Patumsawad, and B. Fungtammasan, "Prediction of minimum fluidisation velocity from correlations an observation," *Asian J. Energy Environ.*, vol. 2, no. 2, pp. 145–154, 2001.
- [34] P. Basu, *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. 2006.
- [35] C. Y. Wen and Y. H. Yu, "Mechanics of fluidization," *Chem. Eng. Prog. Symp.*, vol. 62, pp. 100–111, 1966.
- [36] M. Syamlal and T. . Brien, "Derivation of a drag coefficient from velocity-voidage correlation," Morgantown, West Virginia.
- [37] H. Arastoopour, P. Pakdel, and M. Adewumi, "Hydrodynamic analysis of dilute gas—solids flow in a vertical pipe," *Powder Technol.*, vol. 62, no. 2, pp. 163–170, Aug. 1990.
- [38] S. Ergun, "Fluid flow through packed columns," *Chem. Eng. Prog.* 48, pp. 89–94, 1952.
- [39] D. Geldart, "Types of Fluidisation," *Powder Technol.*, vol. 7, pp. 285–292, 1973.
- [40] W. Yang, *Handbook of fluidization and fluid-particle systems*. Marcel Dekker, 2003.
- [41] P. R. Naren, A. M. Lali, and V. V. Ranade, "Evaluating EMMS model for simulating high solid flux risers," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 85, no. 8 A, pp. 1188–1202, 2007.
- [42] M. Zeneli, A. Nikolopoulos, E. Kakaras, P. Grammelis, and N. Nikolopoulos, "Application of an advanced coupled EMMS-TFM model to a pilot scale CFB carbonator," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 138, pp. 482–498, 2015.
- [43] J. Wang, W. Ge, and J. Li, "Eulerian simulation of heterogeneous gas-solid flows in CFB risers: EMMS-based sub-grid scale model with a revised cluster description," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 63, no. 6, pp. 1553–1571, 2008.
- [44] D. Subbarao, "A model for cluster size in risers," *Powder Technol.*, vol. 199, no. 1, pp. 48–54, 2010.
- [45] W. Wang and J. Li, "Simulation of gas-solid two-phase flow by a multi-scale CFD approach of the EMMS model to the sub-grid level," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 62, no. 1–2, pp. 208–231, 2007.
- [46] D. Kriesel, *A brief introduction to Neural Networks*. 2005.
- [47] R. Lippmann, "An introduction to computing with neural nets," *IEEE ASSP Mag.*, vol. 4, no. 2, pp. 4–22, 1987.
- [48] Kung Y., *Digital Neural Networks*. PTR Prentice-Hall, 1998.
- [49] Spyridon Chapaloglou, "Smoothing of a non-interconnected island's power system load curve, with the use of a predictive BESS controller," National Technical University of Athens, 2018.
- [50] Ö. Çelik, A. Teke, and H. B. Yıldırım, "The optimized artificial neural network model with Levenberg–Marquardt algorithm for global solar radiation estimation in Eastern Mediterranean Region of Turkey," *J. Clean. Prod.*, vol. 116, pp. 1–12, Mar. 2016.
- [51] Graham Templeton, "Artificial neural networks are changing the world. What are they?," 2015. [Online]. Available: <https://www.extremetech.com/extreme/215170-artificial-neural-networks-are-changing-the-world-what-are-they>.

- [52] H. Demuth and M. Beale, “MATLAB Neural Networks Toolbox v4 User’s Guide,” *Mathworks inc*, 2005.
- [53] “Artificial Neural Network: Beginning of the AI revolution.” [Online]. Available: <https://hackernoon.com/artificial-neural-network-a843ff870338>.
- [54] Rajkumar, Thirumalainambi and J. Bardina, “Training data requirement for a neural network to predict aerodynamic coefficients,” *Proc. SPIE*, vol. 5102, p. 92, 2003.
- [55] B. Karlik, “Performance analysis of various activation functions in generalized MLP architectures of neural networks,” *Int. J. Artif. Intell. Expert Syst.*, vol. 1, no. 4, pp. 111–122, 2015.
- [56] D. R. Baughman and Y. A. Liu, “Fundamental and Practical Aspects of Neural Computing,” *Neural Networks Bioprocess. Chem. Eng.*, pp. 21–109, 2014.
- [57] N. Mastorakis, G. Tsekouras, and A. Bulucea, *Computational problem in science and engineering*. Springer International Publishing Switzerland, 2015.
- [58] R. Rojas, *Neural Networks*. Berlin: Springer-Verlag, 1996.
- [59] Α. Δήμου, “Μέθοδοι σταδιακής μάθησης σε Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα,” Πανεπιστήμιο Πειραιώς, 2018.
- [60] J. Han, M. Kamber, and J. Pei, *Data mining : concepts and techniques*. Elsevier Science, 2011.
- [61] Μ. Τσούχνικα, “ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ.”
- [62] A. Quesada, “5 algorithms to train a neural network | Neural Designer,” *neural desiner*. [Online]. Available: https://www.neuraldesigner.com/blog/5_algorithms_to_train_a_neural_network. [Accessed: 26-Oct-2018].
- [63] D. P. Mandic, “A Generalized Normalized Gradient Descent Algorithm,” *IEEE Signal Process. Lett.*, vol. 11, no. 2, pp. 115–118, Feb. 2004.
- [64] C. G. Broyden, “A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations,” *Math. Comput.*, vol. 19, no. 92, pp. 577–577, 1965.
- [65] J. J. Moré, “The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory,” Springer, Berlin, Heidelberg, 1978, pp. 105–116.
- [66] B. Lu, W. Wang, and J. Li, “Searching for a mesh-independent sub-grid model for CFD simulation of gas-solid riser flows,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, no. 15, pp. 3437–3447, 2009.
- [67] R. L. Hardy, “Theory and applications of the multiquadric-biharmonic method,” *Comput. Math. with Appl.*, vol. 19, no. 8/9, pp. 163–208, 1990.