

Eine neue Methode zur Charakterisierung von beliebigen Verteilungen

Für eine realistische Beurteilung einer beliebigen Verteilung müssen sowohl die Schwankungsbreite der beschreibenden Größe als auch ihre räumliche Verteilung berücksichtigt werden. Aus diesem Grund wurde eine neue Kennzahl (CoD – Verteilungskoeffizient) definiert, die beide Attribute der Verteilung bzw. der Mischung berücksichtigt. Erste Tests mit künstlichen und durch numerische Strömungsberechnungen ermittelten Tracerverteilungen lieferten vielversprechende Ergebnisse. Die neue Kennzahl stellt eine wirksame Methode zur realistischen Beurteilung von beliebigen Verteilungen dar und kann dabei helfen, die Möglichkeiten bei der Konstruktion und Entwicklung von Produkten zu verbessern. Darüber hinaus erweitert die neue Kennzahl CoD die Möglichkeiten zur genauen Definition von Kundenanforderungen.

Das Mischen von Komponenten gehört zu den ältesten Grundoperationen in der mechanischen Verfahrenstechnik. Großtechnisch stellen Mischprozesse – besonders bei Flüssigkeiten und insbesondere bei hohen Viskositäten, eine große Herausforderung dar. Da der zum Mischen erforderliche Aufwand mit der zu erzielenden Homogenität steigt, ist die Charakterisierung des Mischzustands von besonderem Interesse.

Die Beurteilung der Homogenität bzw. des Vermischungsgrads erfolgt für gewöhnlich mithilfe von Kennzahlen auf Basis statistischer Methoden. Ein eingeführter und allgemein anerkannter Wert ist der Variationskoeffizient CoV (*Coefficient of Variation*), der das Verhältnis

zwischen der Standardabweichung und dem Erwartungswert beschreibt.

Da der CoV-Wert eine gemittelte Größe über eine Region (Fläche oder Raum) ist, die keine räumliche Verteilung berücksichtigt, kann die ausschließliche Quantifizierung von Vermischungen mithilfe des CoV zu einer geringen Aussagefähigkeit oder zu Fehldeutungen führen. Mischungen, die sich nur in der räumlichen Verteilung der beschreibenden Größen unterscheiden, ergeben denselben CoV-Wert, obwohl ihre Eigenschaften offensichtlich unterschiedlich sind [1]. Bei chemischen Reaktionen können unterschiedliche Mischzustände zu großen Unterschieden in Ausbeute und Zusammensetzung führen.

Die zwei Mechanismen des Mischens

Innerhalb einer Mischung gibt es zwei Mechanismen, die die Qualität der Mischung verbessern können: das distributive Mischen und den diffusiven Ausgleich von Unterschieden innerhalb eines Konzentrationsfelds. Beim Letzteren handelt es sich um einen spontanen, selbstständigen Prozess, der keine zusätzliche Energie erfordert.

Das Ergebnis des diffusiven Transports lässt sich direkt über den CoV-Wert messen. Ebenso wichtig wie der diffusive Ausgleich ist das distributive Mischen, der zweite Mechanismus, der bei Mischvorgängen eine Rolle spielt. Es ist eine Voraussetzung für ein wirksames Mischen, da es die Kontaktfläche zwischen Regionen mit höherer und niedrigerer Konzentration vergrößert. Da sich der diffusive Transport proportional zu dieser Kontaktfläche und dem Konzentrationsgefälle verhält, hat eine größere räumliche Verteilung nicht nur eine direkte positive Auswirkung auf die Qualität der Mischung, sondern sollte sich auch positiv auf den Wert der Mischqualität auswirken.

CoV für die Diffusion – ϕ für die Verteilung

Das Ziel ist es, eine Methode zur Beurteilung beider Mischmechanismen – des diffusiven Transports und des distribu-

[1] Zwei Mischungen mit unterschiedlichen räumlichen Verteilungen, aber nahezu identischen CoV-Werten.



tiven Mischens – zu entwickeln. Dazu werden mehrere Verteilungen eines künstlichen Markierungsstoffes (*Tracer*) analysiert. Bild 2 zeigt neun verschiedene Mischsituationen, die sich in der Durchmischung und der räumlichen Verteilung unterscheiden. In vertikaler Richtung sinkt der CoV-Wert von oben nach unten, da die Durchmischung durch einen Ausgleich der Werte (zur Simulation eines diffusen Transportmechanismus) zunimmt. In diesen Fällen bleibt die räumliche Verteilung konstant. In horizontaler Richtung hingegen bleibt der CoV-Wert konstant, aber die Längenskala, auf der Segregation auftritt, nimmt ab, d.h., die räumliche Verteilung des Tracers nimmt in horizontaler Richtung zu (zur Simulation eines distributiven Mischprozesses).

Wie bereits erwähnt, lässt sich der diffusive Ausgleich mithilfe des Variationskoeffizienten CoV quantifizieren. Auf die künstlichen Verteilungen in 2 angewandt, entspricht die Durchmischung in der ersten Reihe einem CoV-Wert von 100%, in der zweiten Reihe von 60% und in der dritten Reihe von 20%. Diese Werte sind unabhängig von der räumlichen Verteilung.

Die Größe der farbigen Quadrate beschreibt bei diesem Beispiel die Längenskala, auf der die Schwankungen auftreten. Je kleiner die einzelnen Quadrate sind, desto besser ist die Verteilung. Ein gutes Maß für die Größe dieser Quadrate ist die Länge der Kontaktlinie zwischen Regionen unterschiedlicher Konzentration. In der Realität ist diese Kontaktlinie (bzw. Kontaktfläche) ebenfalls von besonderem Interesse, da der diffusive und dispersive Ausgleich stark davon abhängt. Die Länge der Kontaktlinie lässt sich als dimensionslose Größe ausdrücken, indem sie auf eine charakteristische Längenskala wie z.B. den hydraulischen Durchmesser bezogen wird. Auf die verschiedenen Verteilungen in 2 angewandt, ist diese dimensionslose Zahl ϕ gleich 2 (= 16/8) für die rechte Spalte, 6 (= 48/8) für die mittlere Spalte und 14 (= 112/8) für die linke Spalte

(8 ist die [Referenz-]Breite jeder einzelnen Verteilung). Diese Werte sind unabhängig vom Vermischungsgrad bzw. dem CoV.

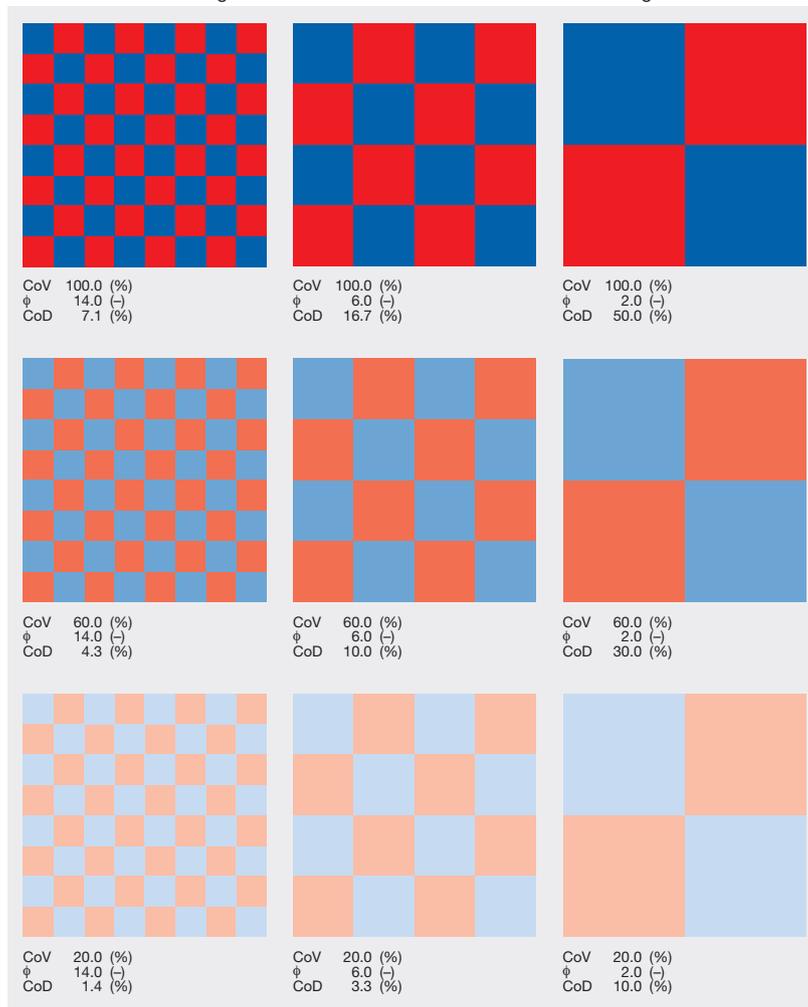
CoD für den Vergleich von Verteilungen unterschiedlicher Schwankungsbreite und -verteilung

Hier stehen zwei Kennzahlen zur Verfügung, die verschiedene Aspekte einer skalaren Verteilung charakterisieren: der allgemein verwendete CoV-Wert zur Beschreibung der Größe der Schwankungen und der Wert ϕ zur Beschreibung der räumlichen Verteilung dieser Schwankungen. Die Kombination beider Werte führt intuitiv zur Definition des Verteilungskoeffizienten CoD (*Coefficient of Distribution*), des Quotienten aus dem CoV und dem Wert ϕ , und

ermöglicht den Vergleich von Verteilungen unterschiedlicher Schwankungsbreite und -verteilung (diagonale Richtung in Bild 2). Der Wert des Verteilungskoeffizienten CoD (der diffusive und distributive Mischeffekte kombiniert) reicht in Bild 2 von 50% für den schlechtesten Mischzustand (oben rechts) bis etwa 1% für den besten Mischzustand (unten links).

Im Gegensatz zu künstlichen Systemen wie in diesem Beispiel ist bei realen Systemen die Länge der Kontaktlinie nicht ohne Weiteres feststellbar. Eine Lösung bietet die Maßtheorie. Es ist bekannt, dass bei einem vollständig segregierten System die Integration über die Norm des Gradienten eines normalisierten Wertes genau die Länge der Kontakt-

2 Darstellungen von unterschiedlichen künstlichen Speziesverteilungen. Von oben nach unten nimmt die Durchmischung und von rechts nach links die räumliche Verteilung zu.



Formel	Skalare Größe	Vektorielle Größe
Mittelwert	$\bar{c} = \frac{1}{n} \sum_i c_i$	$\bar{u} = \frac{1}{n} \sum_i \bar{u}_i$
Standardabweichung	$\sigma = \sqrt{\frac{1}{ A } \int_A (c - \bar{c})^2 dA}$	$\sigma = \sqrt{\frac{1}{ A } \int_A (\bar{u} - \bar{u})^2 dA}$
Variationskoeffizient CoV	$CoV = \frac{\sigma}{\bar{c}}$	$CoV = \frac{\sigma}{ \bar{u}_{FD} }$
Norm des Gradienten	$\ \nabla c\ _2 = \sqrt{\sum_i (\partial_i c)^2}$	$\ \nabla \bar{u}\ _2 = \sqrt{\sum_i \sum_j (\partial_i u_j)^2}$
Längenskala	$\phi = \frac{\ell}{\ell_{ref}} = \frac{d_h}{A} \frac{\int \ \nabla c\ _2 dA}{2\sigma}$	$\phi = \frac{\ell}{\ell_{ref}} = \frac{d_h}{A} \frac{\int \ \nabla \bar{u}\ _2 dA}{2\sigma}$
Verteilungskoeffizient CoD	$CoD = \frac{CoV}{\phi}$	$CoD = \frac{CoV}{\phi}$

3 Formeln zur Berechnung des neuen Kennwerts CoV zur Charakterisierung einer Mischung.

linie (zwischen dem Wert 0 und dem Wert 1) ergibt. Auf reale Systeme angewandt, werden die Verteilungen mittels Division durch 2σ dimensionslos gemacht und skaliert. Die charakteristische Längenskala ergibt sich aus dem Verhältnis des Querschnitts zum hydraulischen Durchmesser. Die grundlegenden Formeln hierzu sind in 3 aufgeführt.

Eine Einschränkung für die Berechnung der Länge der Kontaktlinie tritt bei Systemen mit einem massiv, zunehmenden diffusiven Ausgleich auf. In diesem Fall verliert sie an Bedeutung, doch da die erreichten Werte kleiner werden, ergibt sich ein konservativer CoD-Wert.

Anwendung auf industriell relevante Fälle

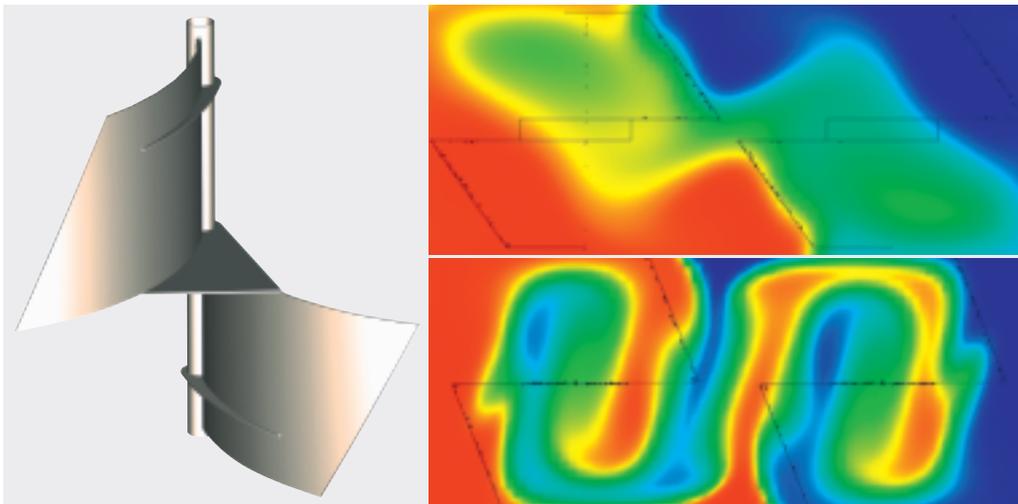
Die Anwendbarkeit der hier entwickelten Theorie wird anhand von Ergebnissen numerischer Strömungsberechnungen geprüft. Bild 4 zeigt Tracerverteilungen von Mischprozessen mit Contour™-Mischern verschiedener Ausführung (von Sulzer Chemtech). Die anfängliche Verteilung des Tracers war in beiden Fällen die gleiche: ein vollständig segregiertes System mit einer Tracerkonzentration von eins in der linken Hälfte des Kanals und von null in der rechten Hälfte (Bild 1 links). Bild 4 (rechts oben und unten) zeigt die Verteilungen auf

einem Querschnitt des Mischkanals in einem gewissem Abstand hinter den Mischern. Obwohl der CoV-Wert in beiden Fällen nahezu identisch ist (70%), würde man die Durchmischung im unteren Bild intuitiv als besser bezeichnen. Berücksichtigt man jedoch die Länge der Kontaktlinie, unterscheidet sich die Qualität der beiden Verteilungen um den Faktor drei.

Das Konzept zur Beurteilung von Vermischungen durch eine Beurteilung der Schwankungsbreite einer beschreibenden Größe sowie deren räumlicher Verteilung ist nicht auf skalare Verteilungen wie Konzentrations- oder Temperaturfelder beschränkt, sondern kann auch auf vektorielle Verteilungen wie Geschwindigkeitsfelder angewandt werden.

Die neue Kennzahl, der Verteilungskoeffizient CoD, stellt eine wirksame Methode zur realistischen Beurteilung von beliebigen Verteilungen dar, die dabei helfen kann, die Möglichkeiten bei der Konstruktion und Entwicklung von Produkten zu verbessern. Darüber hinaus erweitert die neue Kennzahl CoD die Möglichkeiten zur genaueren Definition von Kundenanforderungen.

4 In der Vergangenheit wurden verschiedene Designs des Sulzer-Chemtech-Contour™-Mischers, eines statischen Mischers für hochturbulente Gasströmungen (links), getestet. Rechts sind die Tracerverteilungen für zwei Ausführungen dargestellt. In beiden Fällen wurde von der gleichen Anfangsverteilung – rot links und blau rechts – ausgegangen.



Carsten Stemich
 Sulzer Markets and Technology AG
 Sulzer Innotec
 Sulzer-Allee 25
 8404 Winterthur
 Schweiz
 Telefon +41 52 262 21 96
 carsten.stemich@sulzer.com