

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation.....	1
1.2	Zielstellung.....	2
1.3	Gliederung	3
2	Theoretische Grundlagen	5
2.1	Theorie der Tropfen-Aerosolbildung	5
2.1.1	Binäre homogene Keimbildung	6
2.1.2	Tropfenwachstum	12
2.1.3	Koagulation	17
2.2	Populationsbilanzgleichungen.....	21
2.2.1	Algorithmus zur Lösung der Populationsbilanzgleichung	23
2.2.2	Implementierung des Populationsbilanzmodells	24
2.2.3	Modellvalidierung	27
2.3	Messmethoden zur Tropfengrößenverteilung	29
2.3.1	Statische Lichtstreuung.....	30
2.3.2	Mie Theorie	32
3	Monte Carlo Methode für das 2D Simulationsmodell	39
3.1	Kinetische Monte Carlo Methode (KMC).....	39
3.1.1	Zeitschrittberechnung in der KMC-Simulation.....	40
3.1.2	Simulierte Partikelanzahl in der KMC-Simulation.....	40
3.1.3	Verlauf der Monte Carlo Simulation	41
3.1.4	Vergleich der verschiedenen MC-Methoden	43
3.2	Optimierungsmethoden der Koagulation.....	45
3.2.1	Traditionelle MC-Methode des Koagulationsprozesses	45
3.2.2	Optimierungsmethode durch Klassifizierung.....	51
3.3	Ablauf der Monte Carlo Methode der binären Aerosolbildung.....	59
3.3.1	Erzeugung der Ausgangsdaten des Partikelsystems	59
3.3.2	Berechnung eines Zeitintervalls	62
3.3.3	Auswahl eines Mechanismus	63
3.3.4	Wachstum aller Partikeln	66
4	Ergebnisse der Simulation des binären Dampfgemisches	73
4.1	Genauigkeit und Performance der Koagulation	73
4.1.1	Genauigkeit der Klassenmethode	73
4.1.2	Einfluss der Klassenanzahl in der Koagulation	75
4.1.3	Einfluss der gesamten simulierten Partikelanzahl.....	77
4.1.1	Analyse der Simulationszeit.....	79

4.2	Genauigkeit und Performance der gesamten Populationsbilanz- simulation einschließlich Keimbildung und Wachstum	83
4.2.1	Genauigkeit der MC-Methode in der vollständigen Simulation	83
4.2.2	Einfluss der Untergrenze für das Wachstum	85
4.3	Einfluss des Wachstums	89
4.4	Einfluss der Koagulation auf das Tropfenwachstum	94
4.5	Einfluss der kondensierenden Dampfmenge	97
4.5.1	Tropfenentstehung	97
4.5.2	Tropfenwachstum	98
4.6	Einfluss der Dampfzusammensetzung	101
4.7	Reihenfolge des Einsatzes der drei Mechanismen	109
4.8	Potentielle Matrix-Auswahlmethode zur Beschleunigung der Wachstumsberechnung	111
5	Experimentelle Untersuchung der Aerosolbildung	115
5.1	Generierung des Aerosols	116
5.1.1	Aufbau der Apparatur	116
5.1.2	Stabilität der Aerosolbildung	121
5.2	Geräte zur Aerosolmessung	125
5.2.1	Goniometer	126
5.2.2	Weißlichtspektrometer	138
5.3	Durchführung der Experimente	142
5.4	Vergleich der Messergebnisse mit der Simulation	144
6	Konzept zur Kopplung der Monte Carlo Methode und CFD.....	153
6.1	CFD Code in OpenFOAM	153
6.2	Mechanismen des Transports.....	155
6.3	Implementierung des Modells	159
7	Zusammenfassung	163
	Literaturverzeichnis	169
	Anhang	185