

# LES-PDF modelling of nucleation and growth of DBP droplets

von der  
Fakultät Energie-, Verfahrens- und Biotechnik  
der Universität Stuttgart  
zur Erlangung der Würde eines  
Doktors der Ingenieurwissenschaften  
(Dr.-Ing) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von  
Dipl. Phys. Niko Seubert  
aus Stuttgart, Deutschland

Hauptberichter: Prof. Dr. Andreas Kronenburg

Mitberichter: Priv. Doz. Dr. Peter Gerling

Tag der mündlichen Prüfung: 10. Oktober 2016

Institut für Technische Verbrennung  
der Universität Stuttgart  
2019



# Erklärung

Hiermit versichere ich:

1. dass ich meine Arbeit selbständig verfasst habe,
2. dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
3. dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist,
4. dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, Januar 2019

Niko Seubert



# Danksagung

Zunächst möchte ich Professor Dr. A. Kronenburg danken für das Vertrauen in meine Fähigkeiten und für die Möglichkeit, am Institut für Technische Verbrennung arbeiten zu können. Der Freiraum für eigenständige Kreativität in den Bereichen der Forschung, der Gestaltung der Infrastruktur des Instituts, sowie der Betreuung von Tutorien und Studenten ermöglichte mir Wachstum in allen Bereichen.

Danken möchte ich auch Dr. Peter Gerlinger für seine Tätigkeit als Mitberichter bei der Evaluierung der Dissertation.

Auch gilt mein Dank Dr. Oliver T. Stein für sein stets offenes Ohr und die vielen guten Ratschläge.

Zudem danke ich meinen Kollegen, für den anregenden Wissensaustausch, die inspirierenden Gespräche und natürlich auch für die vielen schönen gemeinsamen Momente. Im Besonderen möchte ich Gregor Olenik erwähnen, der mit seinem unstillbaren Wissensdurst und „geekyness“ über die Wertschätzung seiner Persönlichkeit hinaus meinen höchsten Respekt und Anerkennung innehält. Nicht zuletzt gilt mein Dank meiner Familie und meinen Freunden, die mich sehr unterstützt haben und meine Welt zu einem wundervollen Ort machen. Mein besonders großer, ewiger Dank gilt meinem Vater und Freund Michael Seibert für ALLES! Es ist nicht möglich so viel in wenige Worte zu fassen.

Mit ganzem Herzen danke ich Juliane Hieret für ihre Liebe und fürsorgliche Unterstützung.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Erklärung</b>	<b>I</b>
<b>Danksagung</b>	<b>III</b>
<b>Inhaltsverzeichnis</b>	<b>V</b>
<b>Abstract</b>	<b>VII</b>
<b>Kurzfassung</b>	<b>IX</b>
<b>Nomenklatur</b>	<b>XI</b>
<b>1 Einleitung und Motivation</b>	<b>1</b>
1.1 Stand der Forschung . . . . .	3
1.2 Zielsetzung und Vorgehen . . . . .	6
<b>2 Theoretische Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1 Strömungsmechanische Grundlagen . . . . .	7
2.2 Nukleation und Kondensation . . . . .	8
2.3 WDF-Methoden . . . . .	10
2.4 Aerosole und deren Beschreibung durch Populationsbilanzgleichung . . . . .	13
2.4.1 Lösungsverfahren für die Populationsbilanzgleichung . . . . .	14
2.4.1.1 Analytische Methoden . . . . .	15
2.4.1.2 Momenten-Methoden . . . . .	15
2.4.1.3 Sektionale Methoden . . . . .	16
2.4.1.4 WDF-Methoden . . . . .	16
<b>3 Modellierung</b>	<b>19</b>
3.1 Modellierung turbulenter Strömungen . . . . .	19
3.1.1 Filterung . . . . .	20
3.1.2 Smagorinsky-Modell . . . . .	20
3.2 Modellierung der Populationsbilanzgleichung . . . . .	21
3.3 Modellierung der Oberflächenspannung und homogenen Nukleation . . . . .	22
3.4 Modellierung der Kondensation . . . . .	29
3.5 Modellierung der Phasenübergangswärme . . . . .	30
3.6 Modellierung des turbulenten Mischens . . . . .	31
3.6.0.1 IEM-Mischungsmodell . . . . .	32
3.6.0.2 MCD-Mischungsmodell . . . . .	33

<b>4</b>	<b>Numerische Umsetzung</b>	<b>35</b>
4.1	Montecarlo-Partikel	37
4.1.1	Räumliche und zeitliche Mittelung	38
4.1.2	Injektion, Bewegung und Randbedingungen	38
4.1.3	Partikelmanagement	39
4.1.3.1	Klonen	40
4.1.3.2	Löschen	40
4.1.4	Nukleation	43
4.1.5	Kondensation	44
4.1.6	Phasenübergangswärme und kondensierte Masse	44
<b>5</b>	<b>Experiment, frühere Simulationen und numerisches Äquivalent</b>	<b>45</b>
5.1	Experiment	45
5.2	Frühere Simulationen	46
5.3	Simulationsgeometrie und Netze	48
<b>6</b>	<b>Ergebnisse – numerische Aspekte</b>	<b>53</b>
6.1	Rechnungen und Ressourcen	53
6.2	Turbulenzrandbedingungen und Geschwindigkeitsfeld	56
6.3	Effekt der Kondensation und Phasenübergangswärme	59
6.4	Evaluierung der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle	65
6.4.1	Vergleich der MC-Partikel-Zahl-Kontroll-Algorithmen	66
6.4.2	Einfluss der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle	69
6.5	Unabhängigkeitsstudien	74
6.5.1	LES-Auflösung	74
6.5.2	Lagrange Auflösung	81
6.5.3	Auflösung der Größenverteilungsfunktion	86
<b>7</b>	<b>Ergebnisse – Referenzfall und Aspekte der Modellierung</b>	<b>89</b>
7.1	Analyse des Referenzfalls	89
7.2	Einfluss der Turbulenz	105
7.3	Abhängigkeit von $X_{dbp}$	121
7.4	Mischungsmodelle	134
7.5	Einfluss der Oberflächenspannung	157
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>165</b>
8.1	Zusammenfassung	165
8.2	Ausblick	166
<b>9</b>	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>169</b>
<b>10</b>	<b>Erratum</b>	<b>181</b>
10.1	Ursache der Inkonsistenz	182
<b>11</b>	<b>Anhang</b>	<b>185</b>
11.1	Feynman-Kac Theorem	185
11.2	Erweiterung der OpenFOAM-Vektorklasse	186
11.3	Kondensationsrate der 25. Sektion des Referenzfalls	189



# Abstract

Phase transitions are omnipresent in nature and govern natural cycles. The use of phase transitions significantly influences the technical and social progress. The phases of matter can be transformed into each other by the corresponding energy change. Despite several centuries of research in the field of phase transitions, a complete scientific description is lacking. This also applies to the phase transition of gaseous matter into the liquid state (nucleation and condensation), which is the subject of this research.

In this work, a Large Eddy Simulation (LES)-Probability Density Function (PDF) method using Monte Carlo particles (MC particles) and a discretized size distribution function for the process of homogeneous nucleation and droplet growth by condensation was implemented. This method enables a resource-efficient calculation of the size distribution function of the droplets formed, without prior definition of the form of the distribution. The solution of the equation of motion of the MC particles is achieved with the aid of the velocity fields provided by the LES simulation. The LES simulation uses the dynamic Smagorinsky model for closure. The turbulent mixing of the MC particles is carried out by means of the Interaction by Exchange with the Mean (IEM) model and the Modified Coalescence and Dispersion (MCD) model. As part of the numerical implementation, an occupation number control algorithm for MC particle density (MC particles per LES cell) was developed and its effects considered. The validation of the model is carried out with the help of existing experimental data and simulation results from previous work. The system considered is a hot, dibutyl phthalate-containing jet, which cools when mixed with the cooler ambient air, resulting in homogeneous nucleation and condensation.

In the first part of this thesis the theoretical basics are discussed and the modeling for considered processes is presented. Details of the numerical implementation complete the theoretical part of the thesis.

The examination of the results is divided into two chapters. First, numerical aspects of the implementation of the LES-PDF method are considered. This is preceded by an overview of the simulations carried out and the resources required. The consideration of the velocity field is followed by the analysis of the effects of the phase transition on characteristic quantities. Furthermore, two MC particle population control methods are compared. In addition, the effects of the control mechanism for the MC particle number density (MC particles per LES cell) developed in the context of the implementation of the intensive particle method are considered for characteristic quantities. An independence study of various dimensions ensures the independence of the results from the number of nodes and completes the consideration of numerical effects.

In the second chapter of the results analysis, the results of the reference case are examined in detail and aspects of modeling are examined. Following the detailed consideration of the reference case, the influence of the considered information of turbulent structures on the rate of saturation, homogeneous nucleation and condensation is investigated. Here, the effects of temporal and spatial information of the smallest structures are considered separately by filtering and averaging operations and compared with the results, which result from the consideration of all available information. On the basis of the behavior of

characteristic quantities with variation of the boundary conditions, in comparison with experimental data, the physically correct implementation of the concept is ensured. In addition, the effect of the mixing models on the dependent variables (scalar distributions, nucleation rate, condensation rate, size distribution function and zeroth moment) is investigated and the properties of the mixture models are discussed on the basis of simulation data and put into context to the technical literature. Furthermore, the influence of surface tension on the process of droplet formation is investigated.

The calculation of the size distribution function of the droplets formed with resolution-independent resolutions can be carried out with reasonable computational effort. The LES PDF simulation provides results whose comparison with available data demonstrates the physically correct implementation of the method. The variation of boundary conditions shows a physically correct behavior of dependent quantities. The analysis of the influence of small-scale turbulence illustrates the need to numerically account for them. The comparison of the mixture models shows, in accordance with observations of the experts, the more physical behavior of the MCD model and the influence of the mixture model on the dependent quantities. The newly developed control algorithm for the MC particle density makes it possible to carry out the simulations and the influence on the results can be regarded as low.

The further development of the LES-PDF method was intended to investigate the effect of further mixture models. In particular, the Multiple Mapping Condition (MMC) model should be used as it uses another dimension to localize the mixing process and the effect of MC particle density on the results is smaller. In addition, using the MMC model, conditions for MC particle count control can be relaxed, or a less invasive mechanism can be used. The behavior of the solver should also be examined for the variation of other constraints such as the Reynolds number and a stream splitting.

# Kurzfassung

Phasenübergänge sind in der Natur allgegenwärtig und bestimmen die natürlichen Kreisläufe. Die Nutzung der Phasenübergänge beeinflusst maßgeblich den technischen und gesellschaftlichen Fortschritt. Die Phasen der Materie können durch die entsprechende Energieänderung ineinander überführt werden. Trotz der bereits mehrere Jahrhunderte andauernden Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der Phasenübergänge ist eine vollständige, wissenschaftliche Beschreibung nicht vorhanden. Dies gilt auch für den Phasenübergang von gasförmiger Materie in den flüssigen Zustand (Nukleation und Kondensation), welcher Gegenstand dieser Forschungsarbeit ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Large Eddy Simulation (LES)-Probability Density Function (PDF)-Methode unter Zuhilfenahme von Monte-Carlo-Partikeln (MC-Partikel) und einer diskretisierten Größenverteilungsfunktion für den Prozess der homogenen Nukleation und des Tropfenwachstums durch Kondensation umgesetzt. Diese Methode ermöglicht eine ressourceneffiziente Berechnung der Größenverteilungsfunktion der gebildeten Tropfen, ohne vorherige Festlegung der Form der Verteilung. Die Lösung der Bewegungsgleichung der MC-Partikel wird mit Hilfe der von der LES-Simulation zur Verfügung gestellten Geschwindigkeitsfelder erreicht. Die LES-Simulation verwendet das dynamische Smagorinsky-Modell zur Schließung. Das turbulente Mischen der MC-Partikel wird mittels des Interaction by Exchange with the Mean (IEM)-Modells und des Modified Coalescence and Dispersion (MCD)-Modells durchgeführt. Im Rahmen der numerischen Umsetzung wurde ein Besetzungszahl-Kontroll-Algorithmus für die MC-Partikel-Dichte (MC-Partikel pro LES-Zelle) entwickelt und dessen Effekte betrachtet. Die Validierung des Modells wird mit Hilfe vorliegender, experimenteller Daten und Simulationsergebnisse früherer Arbeiten durchgeführt. Das betrachtete System ist ein heißer, dibutylphthalathaltiger Jet, welcher beim Durchmischen mit der kühleren Umgebungsluft abkühlt, was zu homogener Nukleation und Kondensation führt.

Zunächst werden im Rahmen dieser Arbeit die theoretischen Grundlagen erörtert und die Modellierungen für betrachtete Vorgänge vorgestellt. Details der numerischen Umsetzung schließen den theoretischen Teil der Arbeit ab.

Die Betrachtung der Ergebnisse ist in zwei Kapitel eingeteilt. Zunächst werden numerische Aspekte der Umsetzung der LES-PDF-Methode betrachtet. Vorangestellt ist ein Überblick über die durchgeführten Rechnungen und die benötigten Ressourcen. Auf die Betrachtung des Geschwindigkeitsfelds folgt die Analyse der Effekte des Phasenübergangs auf charakteristische Größen. Des Weiteren werden zwei Methoden zur MC-Partikel-Populationskontrolle einander gegenüber gestellt. Zudem werden die Effekte des im Rahmen der Umsetzung der intensiven Partikel-Methode entwickelten Kontroll-Mechanismus für die MC-Partikel-Zahl-Dichte (MC-Partikel pro LES-Zelle) auf charakteristische Größen betrachtet. Eine Unabhängigkeitsstudie in verschiedenen Dimensionen stellt die Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Anzahl der Stützstellen sicher und schließt die Betrachtung numerischer Effekte ab.

Im zweiten Kapitel der Ergebnisanalyse werden die Ergebnisse des Referenzfalls ausführlich betrachtet sowie Aspekte der Modellierung untersucht. Im Anschluss an die

detaillierte Betrachtung des Referenzfalls wird der Einfluss der berücksichtigten Informationen turbulenter Strukturen auf die Rate der Sättigung, der homogenen Nukleation und der Kondensation untersucht. Hierbei werden die Auswirkungen zeitlicher und räumlicher Informationen kleinster Strukturen durch Filterungs- und Mittelungsoperationen getrennt betrachtet und mit den Resultaten verglichen, welche aus der Berücksichtigung aller verfügbaren Information resultieren. Anhand des Verhaltens charakteristischer Größen bei Variation der Randbedingungen, im Vergleich mit experimentellen Daten, wird die physikalisch korrekte Umsetzung des Konzeptes sichergestellt. Im Rahmen der Arbeit wird zudem der Effekt der Mischungsmodelle auf die abhängigen Größen (Skalarverteilungen, Nukleationsrate, Kondensationsrate, Größenverteilungsfunktion und nulltes Moment) untersucht sowie die Eigenschaften der Mischungsmodelle anhand von Simulationsdaten erörtert und in den Bezug zur Fachliteratur gesetzt. Des Weiteren wird der Einfluss der Oberflächenspannung auf den Prozess der Tropfenbildung untersucht.

Die Berechnung der Größenverteilungsfunktion der gebildeten Tropfen mit stützstellenunabhängigen Auflösungen kann mit vertretbarem Rechenaufwand durchgeführt werden. Die LES-PDF-Simulation liefert Ergebnisse, deren Vergleich mit vorliegenden Daten die physikalisch korrekte Umsetzung der Methode demonstriert. Die Variation von Randbedingungen zeigt ein physikalisch korrektes Verhalten abhängiger Größen. Die Analyse des Einflusses der kleinskaligen Turbulenz verdeutlicht die Notwendigkeit selbige numerisch abzubilden. Der Vergleich der Mischungsmodelle zeigt, im Einklang mit Beobachtungen der Fachwelt, das physikalischere Verhalten des MCD-Modells und den Einfluss des Mischungsmodells auf die abhängigen Größen. Der neu entwickelte Kontrollalgorithmus für die MC-Partikel-Dichte ermöglicht die Durchführung der Simulationen, der Einfluss auf die Ergebnisse kann als gering betrachtet werden.

Die Weiterentwicklung der LES-PDF-Methode sollte den Effekt weiterer Mischungsmodelle untersuchen. Insbesondere sollte das „Multiple Mapping Condition“-Modell (MMC) zur Anwendung kommen, da dieses eine weitere Dimension zur Lokalisierung des Mischvorgangs verwendet und die MC-Partikel-Dichte die Ergebnisse weniger stark beeinflusst. Zudem können bei Verwendung des MMC-Modells die Bedingungen für die MC-Partikelzahl-Kontrolle relaxiert, oder ein weniger invasiver Mechanismus verwendet werden. Das Verhalten des Löser sollte zudem auf die Variation weiterer Randbedingungen wie die Reynolds-Zahl und eine Stromaufteilung untersucht werden.

# Nomenklatur

## Einheiten

$g$	Gramm
$J$	Joule
$kg$	Kilogramm
$K$	Kelvin
$m$	Meter
$N$	Newton
$Pa$	Pascal
$s$	Sekunden

## Lateinische Symbole

$\#$	Anzahl	$[-]$
$N_a$	Avogadro-Konstante	$[\#/mol]$
$k_b$	Boltzmann-Konstante	$[J/K]$
$l$	charakteristische Länge	$[m]$
$Co$	Courant-Zahl	$[-]$
$p$	Druck	$[Pa]$
$d_0$	Durchmesser der ersten Sektion der Größenverteilungsfunktion	$[-]$
$d_i$	Durchmesser der Sektion $i$ der Größenverteilungsfunktion	$[m]$
$D_d$	Düsendurchmesser	$[m]$
$f'$	Feinstrukturanteil von $f$	$[-]$
$A$	Fläche	$[m^2]$
$L_{ij}$	Germano-Identität	$[N/m^2]$
$u$	Geschwindigkeitsvektor $(u_i, u_j, u_k)$	$[m/s]$
$\tilde{u}$	Geschwindigkeitsvektor, gefiltertert	$[m/s]$
$u'$	Geschwindigkeitsvektors des Feinstrukturanteils	$[m/s]$
$u_h$	Geschwindigkeit des Hüllstroms	$[m/s]$
$u_{jet}$	Geschwindigkeit des Jets	$[m/s]$
$\tilde{u}_j$	Geschwindigkeitsanteil, gefilterter in Richtung $j$	$[m/s]$

$w$	Gewicht	[ $kg$ ]
$x_i$	kartesische Koordinate $i$ ( $x_i, x_j, x_k$ )	[ $m$ ]
$Kn$	Knudsen-Zahl	[-]
$G$	Kondensationsrate	[ $m/s$ ]
$d_{krit}$	kritischer Durchmesser	[ $m$ ]
$Y_i$	Massenbruch der Spezies $i$	[-]
$N_{MC}$	MC-Partikel, Anzahl	[#]
$N_{MC,min}$	MC-Partikel/Zelle, untere Grenze	[ $N_{MC}/Zelle$ ]
$N_{MC,z}$	MC-Partikel/Zelle, gewünschte Anzahl	[ $N_{MC}/Zelle$ ]
$N_{MC,max}$	MC-Partikel/Zelle, obere Grenze	[ $N_{MC}/Zelle$ ]
$Z$	Mischungsbruch	[-]
$M(\vec{x}, \Phi_i)$	Mischungsoperator	[-]
$D$	molekulare Diffusivität	[ $m^2/s$ ]
$m_{m,i}$	molekulare Masse der Spezies $i$	[ $kg/\#$ ]
$X_i$	Molenbruch der Spezies $i$	[-]
$\bar{M}$	molare Masse eines Gemisches	[ $kg/mol$ ]
$s_{mon}$	molare Oberfläche	[ $m^2/mol$ ]
$v_m$	molares Volumen	[ $m^3/mol$ ]
$B$	Nukleationsrate	[ $\#/sm^3$ ]
$m_n$	$n$ -tes Moment der Größenverteilungsfunktion	[ $\#/m^3$ ]
$p_i$	Partialdruck der Spezies $i$	[ $Pa$ ]
$d_p$	Partikeldurchmesser	[ $m$ ]
$Pr$	Prandtl-Zahl	[-]
$W(\Phi_i)$	Quellterm	[-]
$\tilde{f}$	räumliche Filterung von $f$ oder Favre-Filterung	[-] [-]
$Re$	Reynolds-Zahl	[-]
$O_2$	Sauerstoff	[-]
$S$	Sättigung	[-]
$p_s$	Sättigungsdruck	[ $Pa$ ]
$Sc$	Schmidt-Zahl	[-]
$S_{ij}$	Schubspannungstensor	[ $1/s$ ]
$c_s$	Smagorinsky-Konstante	[-]
$N_2$	Stickstoff	[-]
$St$	Stokes-Zahl	[-]
$T$	Temperatur	[ $K$ ]
$T_h$	Temperatur des Hüllstrom	[ $m/s$ ]
$T_{jet}$	Temperatur des Jet	[ $m/s$ ]

$N$	Tropfendichte	$[\#/m^3]$
$n$	Tropfendichte pro Sektionsbreite	$[\#/(m^3 \Delta d_p)]$
$N_k$	Tropfendichte der Sektion k der Größenverteilungsfunktion	$[\#/m^3]$
$D_t$	turbulente Diffusivität	$[m^2/s]$
$u_t$	turbulente Fluktuationen aus dem Turbulenzgenerator	$[m/s]$
$V$	Volumen	$[m^3]$
$c_w$	Wachstumsfaktor	$[-]$
$t$	Zeit	$[s]$
$t_i$	Zeitpunkt i	$[s]$
$\Delta t$	Zeitschrittweite	$[s]$
$\bar{f}$	zeitliche Mittelung von $f$	$[-]$

*Griechische Symbole*

$\rho$	Dichte	$[kg/m^3]$
$\Gamma$	Diffusionskoeffizient	$[m^2/s]$
$\delta$	Dirac'sche Delta-Funktion	$[-]$
$\Psi$	Ereignisraum	$[-]$
$\Delta$	Filterweite	$[m]$
$\rho_{fl}$	Flüssigkeitsdichte	$[kg/m^3]$
$\eta$	Kolmogorov-Mikro-Skala	$[m]$
$\delta_{ij}$	Kronecker-Delta	$[-]$
$\tau_m$	Mischungszeit	$[s]$
$\sigma$	Oberflächenspannung	$[N/m]$
$\dot{\omega}$	Quellterm	$[\#/s]$
$\tau_{ij}$	Reynolds-Stress-Tensor	$[N/m^2]$
$\tau_{ij}^{sgs}$	Feinstrukturanteil des Reynolds-Stress-Tensors	$[N/m^2]$
$\Phi$	skalare Größe	$[-]$
$\hat{\Delta}$	Test-Filterweite	$[m]$
$\mu$	dynamische Viskosität	$[Pa \cdot s]$
$\mu_t$	turbulente Viskosität	$[Pa \cdot s]$
$\nu$	kinematische Viskosität	$[m^2/s]$
$\nu_t$	turbulente Viskosität	$[m^2/s]$

*Mathematische Symbole*

$\langle \mid \rangle$	bedingter Erwartungswert
$\langle \rangle$	Erwartungswert, Ensemble-Mittelwert
'	Feinstrukturanteil
*	neu zugewiesener Wert
$\sim$	räumliche Filterung oder Favre-Filterung
-	zeitliche Mittelung

*Abkürzungen*

CMC	Conditional Moment Closure
DBP	Dibutylphthalat
DNS	Direkte Numerische Simulation
DQMOM	Direct Quadrature Method Of Moments
GDE	General Dynamic Equation
IEM	Interaction by Exchange with the Mean
IO	Input/Output
LES	Large Eddy Simulation (Grobstruktursimulation)
MMC	Multiple Mapping Condition
MCD	Modified Coalescence and Dispersion
MC-Partikel	Monte-Carlo-Partikel
PBE	Population Balance Equation
PBG	Populationsbilanzgleichung
PDF	Probability Density Function
PSD	Particle Size Distribution
QMOM	Quadrature Method Of Moments
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
WDF	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion



# 1 Einleitung und Motivation

Phasenübergänge sind in der Natur allgegenwärtig und bestimmen die natürlichen Kreisläufe. Die Nutzung der Phasenübergänge beeinflusst maßgeblich den technischen und gesellschaftlichen Fortschritt. Die Phasen der Materie-Energie können durch die entsprechende Energieänderung ineinander überführt werden. Nachweislich gilt die Relation  $E = mc^2$  und elektromagnetische Strahlung kann als eine Phase betrachtet werden. Im hochenergetischen Bereich nimmt Materie verschiedene Zustände an, bevor sie, mit steigender Ordnung und abnehmender (innererkinetischer) Energie, schließlich Plasma, Atome oder Moleküle bildet [101, 134]. Atomare und molekulare Gase können in den flüssigen oder festen Zustand überführt werden. Die nötige Energieänderung hängt vom jeweils betrachteten System ab. Historisch betrachtet hat die industrielle Nutzung von Phasenübergängen der Menschheit großen technischen Fortschritt ermöglicht. Die Benennung von Epochen wie Bronze- oder Eisenzeit zeigt die geschichtlichen Auswirkungen und Umwälzungen, die durch die Beherrschung der Phasenumwandlungen bei Metallen eingeleitet wurde. Die späteren Etappen der Industriellen Revolution wurden durch die Umsetzung von Energie aus einem neuen Energieträger, Kohle, befeuert [107]. Die Umwandlung der gespeicherten chemischen Energie in Bewegungsenergie gelang mittels des Phasenübergangs von Wasser. Die digitale Revolution, unter anderem ermöglicht durch den kontrollierten Kristallisationsprozess von Silizium, ist ein Beispiel aus der jüngeren Vergangenheit, welches ebenfalls die Omnipräsenz und den Einfluss von Phasenübergängen verdeutlicht. Die Erfindung des Gefrierschranks, welcher einen Phasenübergang nutzt, um einen anderen Phasenübergang zu erzeugen, ist ein weiteres Beispiel für tiefgreifende gesellschaftliche Veränderungen, welche aus der technischen Nutzung von Phasenübergängen resultieren. In der chemischen Industrie werden häufig Mehrphasenreaktoren verwendet, bei denen die Umsatzrate von der zur Verfügung stehenden Oberfläche abhängt, welche durch die Größenverteilung gebildeter neuer Phasen bestimmt wird. Im Falle granularer Endprodukte wird die Produktqualität und somit auch die Prozesseffizienz von der Größenverteilungsfunktion bestimmt [1, 23]. Bei einer Phasenumwandlung zu einer Phase mit höherer Ordnung findet der Prozess bevorzugt an Keimen (Fremdkörpern) statt, weniger begünstigt ist die Bildung einer neuen Phase ohne Keime. Beide Prozesse führen zu einer hohen Zahl kleinster Körper der geordneteren Phase im Trägermedium und verleihen dem Gemisch (Aerosol) aus Trägermedium und geordneterer Phase neue Eigenschaften. Durch Ausbreitung mit dem Trägermedium sowie die große Oberfläche der Partikel kann ein Aerosol seine Umgebung stark beeinflussen. Neben technischen Anwendungen sind daher die Auswirkungen von Aerosolen auf das Klima und die Gesundheit in den letzten Jahren zunehmend in den Fokus gerückt [19, 158]. Zu den „klassischen“ Quellen, wie Waldbrände, Holz- und Kohlefeuerung, Verbrennungsmotoren etc.,

kommen industriell gefertigte Nanopartikel, deren Ausbreitung und Auswirkungen durch die Größenverteilung bestimmt werden [54, 66]. Die Phasenübergänge in allen energetischen Bereichen sind weiterhin Gegenstand der Forschung. Die Umwandlung von Gasen zu Flüssigkeiten stellt einen kleinen, aber nicht minder relevanten Teil dieser Prozesse dar. Industrielle Anwendungen, die Auswirkungen von industriellen Anwendungen oder die Beschreibung der Natur selbst führen zu der Notwendigkeit diese Prozesse wissenschaftlich zu analysieren, um Optimierungen durchführen und Vorhersagen treffen zu können. Ein wichtiges Werkzeug für eine wissenschaftlichen Beschreibung ist die numerisch effiziente Lösung der „Population Balance Equation“ (PBE) (oder auch „General Dynamics Equation“ (GDE)), welche die räumliche und zeitliche Entwicklung der Größenverteilungsfunktion von Aerosolen in beliebigen Systemen beschreibt. Im Allgemeinen können turbulente Strömungen nicht vollständig aufgelöst werden, stellen jedoch die Mehrzahl der Fluidbewegungen dar. Turbulente Fluktuationen des Geschwindigkeitsfeldes führen zu Fluktuationen aller Skalare. Die Prozesse, die Änderungen in der Größenverteilungsfunktion hervorrufen, sind jedoch hoch sensitiv bezüglich der zugrunde liegenden Skalarverteilungen und kleine Fluktuationen haben große Auswirkungen. Die Wechselwirkung der Fluktuationen der Skalarverteilungen (z. B. Temperatur und Größenverteilungsfunktion) beeinflussen die Effekte der Turbulenz. Der Informationsverlust durch mangelnde Auflösung und die Anwendung von Schließungstechniken kann die Lösung der PBE maßgeblich beeinflussen und muss mit Bedacht durchgeführt werden. Forschungsarbeiten zu diesem Thema können daher in den allgemeinen Kontext der Forschung zur Berechnung turbulenter, reaktiver Strömungen gestellt werden. Die nichtlineare Abhängigkeit von Verbrennungsvorgängen und der homogenen Nukleation von den zugrunde liegenden Skalarverteilungen (Massenbrüche, Temperatur) und die Mehrskaligkeit der Turbulenz in Raum und Zeit bringen die Notwendigkeit mit sich, bestehende Modelle zu verfeinern und zu erweitern, um mit heutigen und zukünftigen Computerressourcen verlässliche Vorhersagen treffen zu können. Im Zuge der allgemeinen Forschungsarbeiten zu Schließungstechniken bei der Berechnung nicht linear abhängender Größen in turbulenten Strömungen wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Large Eddy Simulation-Probability Density Function (LES-PDF)-Methode unter Zuhilfenahme von Monte-Carlo-Partikeln (MC-Partikel) und einer diskretisierten Größenverteilungsfunktion für den Prozess der homogenen Nukleation und Tropfenwachstum durch Kondensation umgesetzt.

## 1.1 Stand der Forschung

„Nucleation is a common and basic physical phenomenon, the details of which are still poorly understood.“ H. Vehkamäki 2005 [148].

Phasenübergänge sind im Kreislauf der Natur allgegenwärtig und auch bei vielen technischen Prozessen die entscheidende Größe. Sei es bei der Kristallisation von Schmelzen, dem terrestrischen Wasserkreislauf oder der Energietransformation bei Verbrennungsvorgängen. Materie existiert in vielen Phasen (Phase aus dem Altgriechischen: „Erscheinung“).

Bereits seit einigen hundert Jahren werden Studien zu Phasenübergängen betrieben. Im Jahre 1724 stellte der deutsche Physiker Daniel Gabriel Fahrenheit bei Experimenten mit Wasser fest, dass der Gefrierpunkt von den Umgebungsbedingungen abhängt. Joseph Louis Gay-Lussac und Claude Louis Berthollet stellten Anfang des 19. Jahrhunderts den Zusammenhang zwischen der Nukleation bei supersaturierten Gasen, Phasenübergängen von überhitzten Flüssigkeiten, der Bläschenbildung in überexpandierten Flüssigkeiten und dem Kristallisationsverhalten bei unterkühlten Liquiden her. Es wurde beobachtet, dass äußere Einflüsse, wie Vibration oder Kondensationskeime, den Phasenübergang stark beeinflussen oder initialisieren können. Die Anfänge der klassischen Nukleationstheorie wurden 1806 von Pierre Simon Laplace durch die Herleitung des mechanischen Gleichgewichtes von Oberflächen zwischen zwei Phasen gelegt. Josiah Willard Gibbs verknüpfte 1906 die nötige Energie für die Bildung der neuen Phase mit deren Stabilität. Nach weiteren Pionierarbeiten in diesem Gebiet leiteten Richard Becker und Werner Döring 1935 sowie Yakov Borisovich Zeldovich 1942 die klassische Nukleationstheorie mit einem kinematischen Ansatz her. [148, 12, 31]

Die technischen Voraussetzungen, um solch hochsensitive Vorgänge mit kleinsten Raum- und Zeitskalen experimentell auf mikroskopischer Ebene zu erfassen, wurden erst Ende des letzten Jahrhunderts geschaffen und seither stetig verbessert. Dennoch sind experimentelle Daten meist mit Unsicherheiten behaftet und weichen unter verschiedenen Forschungsgruppen teilweise stark voneinander ab [4]. Zudem legen die hohen Kosten sowie Risiken für Umwelt und Gesundheit eine ergänzende numerische Forschung in diesen Bereichen nahe.

In Konfigurationen mit niedrigen Reynolds- und Partikelzahlen kann ein Lagranges-Partikel-Tracking individueller Partikel angewandt werden. Eine „Direkte Numerische Simulation“ (DNS) zur Berechnung des Strömungsfelds und die Berechnung der Partikelbahnen mit den Newtonschen-Bewegungsgleichungen wurden in idealisierten Systemen durchgeführt [155, 156, 157]. Ein vereinfachtes System zur Simulation von Tropfenverteilungen bei der Dieseleinspritzung wurde 1978 von Dukowicz mit dieser Technik simuliert [32].

Eine Lösung der PBE in einem homogenen Reaktor mit einer Wachstumsfunktion, welche lediglich vom Partikelvolumen abhängt, wurde 1972 von Randolph und Larson veröffentlicht [125]. Weitere numerische Arbeiten zur Lösung der PBE unter stark vereinfachten Bedingungen (idealisierte Reaktoren) wurden von Gelbard und Seinfeld (1978) [42], Batterham et al. (1981) [11], Marchal et al. (1988) [79] und Hounslow (1988) [51] durchgeführt.

In den Jahren 1990 bis 2000 wurden die Techniken zur Lösung der PBE in vereinfachten Systemen ausgebaut. Xiong und Pratsinis [161] entwickelten 1991 ein zweidimensionales Modell, um sowohl die Größe als auch die Form von Partikeln aus Sinterprozessen vorherzusagen. Das Wachstum von Brom-Silber-Kristallen in einer wässrigen Lösung wurde 1995 von Muhr et al. [98] berechnet, mit besonderem Fokus der Diskretisierung auf das Verhalten der Finiten-Differenzen-Methode bei der Lösung der PBE. Nicmanis und Hounslow [99] entwickelten 1998 einen finiten Elemente Algorithmus, um die PBE im stationären Fall eines gut durchmischten Systems zu berechnen.

Die Forschungsarbeiten verlagerten sich um die Jahrtausendwende zunehmend zu komplexeren Problemstellungen, was auch der stetig steigenden Rechenleistung zuzuschreiben ist. Im Jahr 2002 adressierten Ramkrishna und Mahoney [124] die Notwendigkeit, die PBE in komplexen, turbulenten Strömungsfeldern zu berechnen. Die Autoren schlagen die separate Berechnung des Strömungsfeldes mit Kopplung an die PBE vor. Die Berechnung von Momenten der Größenverteilungsfunktion, deren Gleichungen sich leichter als die Repräsentation der vollständigen Größenverteilungsfunktion mit dem Strömungsfeld koppeln lassen, wurden z. B. von Hulburt und Katz [52] durchgeführt. Marchisio et al. [80] verwendeten im Jahre 2003 die „Quadrature Method of Moments“-Methode (QMOM), um die PBE zu lösen. Eine Weiterentwicklung, die „Direct Quadrature Method of Moments“-Methode (DQMOM), wurde im Jahr 2004 von Fan et al. [34] verwendet, um die PBE in einem Wirbelschichtreaktor zu lösen. Für die Berechnung der Ausscheidung von Bariumsulfid in einem turbulenten Reaktor verwendete Paschedag [103] im Jahre 2004 eine Reynolds-Averaged-Navier-Stokes-Simulation (RANS) in Kombination mit einem  $k$ - $\epsilon$ -Modell. Es wurde die Boussinesq-Annahme zur Modellierung der unbekanntenen Fluktuations-Korrelationen im Wachstumsterm verwendet. Die Berechnung von Rußpartikeln wurde im Jahre 2006 von Zucca et al. [165] mit der QMOM-Methode an turbulenten Flammen vorgenommen.

Im Jahre 2008 verwendeten Garmory und Mastorakos [41] die „Stochastic Fields“-Methode, um die homogene Nukleation und das Wachstum durch Kondensation von Dybutylphthalat-Tropfen in einem turbulenten Jet zu berechnen. Die Methode geht auf Arbeiten von Valino [145] und Sabel'nikov und Soulard [133] zurück.

Die Klasse der PDF-Methoden bietet den Vorteil, dass die Quellterme in geschlossener Form vorliegen. Es muss jedoch das turbulente Mischen modelliert werden. PDF-Methoden, welche Momente der Größenverteilungsfunktion transportieren und selbige aus den Momenten mit einer angenommenen Form (z. B. Gauss oder  $\beta$ -PDF) rekonstruieren, werden als „presumed-PDF“-Methoden bezeichnet. Eine Serie von Arbeiten mit der „presumed-PDF“-Methode von Baldyga et al. findet sich in den Quellen [9, 10, 8]. Der „transported PBE-PDF“-Ansatz wurde 2007 von Rigopoulos [129] vorgeschlagen, um das Schließungsproblem bei der Lösung der PBE zu umgehen. Hierbei wird eine vereinte PDF der reaktiven Skalare und der diskretisierten Größenverteilungsfunktion transportiert. Es werden keine Annahmen bezüglich der Form der PDF getroffen. Das System wird von einem Ensemble stochastischer Monte-Carlo-Partikel repräsentiert. Pionierarbeit auf dem Gebiet der Partikelmethode wurde auch von Pope geleistet [110, 113, 115, 117]. Rigopoulos [129] demonstrier-

te 2007 erfolgreich die Anwendung einer „transported-PDF“-Methode mit Monte-Carlo-Partikeln und einer RANS zur Strömungsberechnung anhand eines „Partially Stirred Reactor“. Die Technik wurde verfeinert und von Veroli und Rigopoulos [150] 2009 zur Berechnung der Ausscheidung von Bariumsulfat in einer turbulenten Rohrströmung verwendet. Diese Arbeiten können als Vorläufer der Simulationen, welche im Rahmen dieser Dissertation durchgeführt worden sind, betrachtet werden. Eine Übersicht über die Forschungsarbeiten der letzten Jahre findet sich in Rigopoulos [130].

## 1.2 Zielsetzung und Vorgehen

Das Ziel dieser Arbeit ist die Umsetzung einer transportierten-PBE-PDF-Methode unter Zuhilfenahme von MC-Partikeln zur Lösung der PBE unter Berücksichtigung kleinskaliger Turbulenz. Hierbei wird das Strömungsfeld mit einer LES-Simulation berechnet, wobei das dynamische Smagorinsky-Modell zur Schließung verwendet wird. Die Bewegungsgleichung der MC-Partikel wird mit Hilfe des von der LES-Simulation bereit gestellten Geschwindigkeitsfelds gelöst. Für die Validierung der Methode anhand einer Jetströmung, welche im Verlauf der Durchmischung mit dem Hüllstrom zu Übersättigung, homogener Nukleation und Wachstum gebildeter Tropfen durch Kondensation führt, werden diese Vorgänge numerisch abgebildet.

Neben den theoretischen Grundlagen der Methode werden im Rahmen dieser Arbeit auch die Modellierung der homogenen Nukleation, der Kondensation und der zugrunde liegenden Größen erörtert. Die Schließung der zu lösenden Gleichungen der MC-Partikel geschieht mit dem „Interaction by Exchange with the Mean“-Mischungsmodell und dem „Modified Coalescence and Dispersion“-Mischungsmodell zur Modellierung des turbulenten Mischens.

Zunächst werden numerische Aspekte der Umsetzung der LES-PDF-Methode betrachtet. Angeführt wird dies durch die Analyse des Geschwindigkeitsfeldes, gefolgt von der Betrachtung der Effekte des Phasenübergangs auf charakteristische Größen. Eine Unabhängigkeitsstudie in verschiedenen Dimensionen stellt die Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Anzahl der Stützstellen sicher. Des Weiteren werden zwei Methoden zur MC-Partikel-Populationskontrolle gegenüber gestellt. Zudem werden die Effekte des im Rahmen der Umsetzung der intensiven Partikel-Methode entwickelten Kontroll-Mechanismus für die MC-Partikelzahl-Dichte (MC-Partikel pro LES-Zelle) auf charakteristische Größen betrachtet.

Auf eine detaillierte Analyse der Ergebnisse des Referenzfalls sowie den Vergleich mit Daten früherer numerischer und experimenteller Forschungsarbeiten folgt eine Analyse des Einflusses der Turbulenz auf den Prozess der Tropfenbildung und Wachstum durch Kondensation. Hierzu werden die Auswirkungen zeitlicher und räumlicher Information kleinster Strukturen durch Filterungs- und Mittelungsoperationen getrennt betrachtet und mit den Resultaten verglichen, welche aus der Berücksichtigung aller verfügbaren Information resultieren. Anhand des Verhaltens charakteristischer Größen bei Variation der Randbedingungen, im Vergleich mit experimentellen Daten, wird die physikalisch korrekte Umsetzung des Konzeptes sichergestellt. Im Rahmen der Arbeit wird zudem der Effekt der Mischungsmodelle auf die abhängigen Größen (Skalarverteilungen, Nukleationsrate, Kondensationsrate, Größenverteilungsfunktion und nulltes Moment) untersucht sowie die Eigenschaften der Mischungsmodelle anhand von Simulationsdaten erörtert und in den Bezug zur Fachliteratur gesetzt. Des Weiteren wird der Einfluss der Modellierung der Oberflächenspannung auf den Prozess der Tropfenbildung untersucht.

## 2 Theoretische Grundlagen

In diesem Abschnitt wird die theoretische Grundlage der Arbeit formuliert. Dies umfasst die strömungsmechanischen Grundgleichungen, die Lösung der Transportgleichung der Größenverteilungsfunktion sowie Phasenumwandlung durch Nukleation und das Tropfenwachstum durch Kondensation. Des Weiteren soll ein Überblick über Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion-Methoden (WDF-Methoden), Partikel-Methoden und deren kombinierte Anwendung gegeben werden.

### 2.1 Strömungsmechanische Grundlagen

Die Beschreibung der Natur durch Gleichungen hat eine lange Tradition. Auch strömungsmechanische Problemstellungen sind schon lange Gegenstand wissenschaftlicher Betrachtung. Bereits 1755 wurde von Leonhard Euler die Strömung reibungsfreier Fluide durch die Eulergleichung beschrieben. Im Allgemeinen sind Strömungen jedoch weder reibungsfrei noch laminar und die Berechnung von Strömung und Turbulenzeffekten ist weiterhin Gegenstand der Forschung. Mit Hilfe der Reynolds-Zahl  $Re = \frac{u \cdot l}{\nu}$  wird ein wichtiges Charakteristikum von Strömungen, die Turbulenz, quantifiziert. Bei hoher Strömungsgeschwindigkeit  $u$ , großen Abmessungen  $l$  eines Objektes, das um- oder durchströmt wird, oder sehr niedriger Viskosität  $\nu$  und damit einhergehender schwacher Dissipation und Dämpfung kleiner Störungen, setzt ein Transitionsprozess hin zu einer turbulenten Strömung ein. Im Lauf der Forschungsgeschichte wurde ein komplexes Gleichungssystem zur Beschreibung von Strömungen und dem damit verbundenen Skalar, Impuls und Energietransport und weiterer Größen geschaffen. Dieses Gleichungssystem stellt ein Anfangswertproblem dar. Die analytische Lösung ist im Allgemeinen nicht möglich. Für numerische Lösungsverfahren muss eine geeignete Anzahl von Stützstellen definiert werden. Die nötige Auflösung, um alle relevanten Prozesse abbilden zu können, kann aber für die Mehrzahl turbulenter oder reaktiver Strömungen nicht erreicht werden. Die vollständige räumliche und zeitliche Auflösung aller Strukturen wird als „Direkte Numerische Simulation“ (DNS) bezeichnet und ist nur in Ausnahmefällen anwendbar. Auflösungen, die eine numerische Berechnung erlauben, sind im Allgemeinen mit einem Informationsverlust behaftet, der zu ungeschlossenen Termen führt. Die Schließung erfolgt durch die Modellierung der unbekanntenen Größen mittels vorhandener Information. Die bekanntesten Techniken sind die Reynolds Mittelung und die Bussinesque Annahme welche zur Klasse der Wirbelviskositäts-Modelle führt. Die Anwendung dieser Technik auf die Navier-Stokes Gleichung führt zur Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichung „Reynolds Averaged Navier-Stokes Equation“ (RANS). Ein analoges Vorgehen unter Zuhilfenahme einer räumlichen Filteropera-

tion führt zur Grobstruktursimulation („Large Eddy Simulation“) (LES) [35, 47]. Diese wird im Rahmen dieser Arbeit zur Berechnung der Strömung verwendet und in Abschnitt 3.1 beschrieben. Zunächst sollen jedoch die strömungsmechanischen Grundgleichungen in diesem Abschnitt dargelegt werden. Die Herleitung erfolgt mittels Erhaltungsprinzipien und einer kontinuumsmechanischen Betrachtungsweise. Die Massenerhaltung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (2.1)$$

wird durch Gleichung 2.1 ausgedrückt. Die Impulserhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{s=1}^{N_s} Y_s f_{s,j} \quad (2.2)$$

wird durch Gleichung 2.2, für die Richtung  $j$ , ausgedrückt. Die Volumenkräfte, die auf eine Spezies  $s$  in Richtung  $j$  wirken, werden durch  $f_{s,j}$  dargestellt. Der Schubspannungstensor  $\tau_{ij}$

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - p \delta_{ij} \quad (2.3)$$

ist in Gleichung 2.3 zu betrachten. Zur Darstellung wurden die dynamische Viskosität  $\mu$  und das Kroneker-Delta  $\delta_{ij}$  verwendet. Die Forderung nach der Erhaltung der Spezies  $s$  führt zu Gleichung 2.4.

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho(u_i + V_{si})Y_s) = \dot{\omega}_s \quad (2.4)$$

Die Diffusionsgeschwindigkeit in die  $i$ -te Richtung der Spezies  $s$  wird durch  $V_{si}$  dargestellt und  $\dot{\omega}_s$  repräsentiert den Quellterm. Das Gleichungssystem kann durch die Enthalpietransportgleichung

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \vec{v} \cdot \nabla h = \frac{\partial p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla p - \nabla j_q + q_R \quad (2.5)$$

ergänzt und auch mit den Maxwell-Gleichungen gekoppelt werden, um Änderungen im thermodynamischen Potential sowie elektromagnetische Effekte zu erfassen. [108, 144, 136]

## 2.2 Nukleation und Kondensation

In Gasen kommt es aufgrund der Molekularbewegung ständig zu Kollisionen von Molekülen. Dabei können instabile Molekülcluster entstehen. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich weitere Moleküle anlagern und ein stabiler Nukleus entsteht, bevor der Cluster wieder zerfällt, ebenso wie die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Cluster selbst bilden, wird von der Stoßfrequenz  $\nu_s$  mitbestimmt. Hierbei ist das Verhältnis von



„Fremdspezies“ zu Trägermedium maßgeblich, ebenso wie die mittlere Geschwindigkeit der Moleküle. Entsteht ein Cluster, so wird Bindungsenergie freigesetzt, es muss jedoch zunächst die Energie für die Bildung einer neuen Oberfläche als Phasengrenze aufgewandt werden. Die frei werdende Energie  $\Delta E_f$  sphärischer Tropfen im Gemisch idealer Gase kann nach Gleichung 2.6 berechnet werden. Hierbei ist  $\sigma$  die Oberflächenspannung und  $A$  die Oberfläche des Tropfens. Die Summe wird über alle Spezies ausgeführt. Die Summanden sind die Anzahl der Moleküle  $N_{i,t}$  der Spezies  $i$  im Tropfen  $t$  multipliziert mit deren chemischem Potential  $\mu_i$  [148].

$$\Delta E_f = \sum \Delta \mu_i N_{i,t} + \sigma A \quad (2.6)$$

Die Änderung des chemischen Potentials  $\Delta \mu_i$  ist in Gleichung 2.7 dargestellt. Die Phasenaktivität  $A_{i,g/f}$  der Gasphase (g) oder flüssigen Phase (f) aller Spezies  $i$  kann mit der Sättigung verknüpft werden und beschreibt die Neigung zum Phasenübergang.

$$\Delta \mu_i = -k_b T \ln \left( \frac{A_{i,g}}{A_{i,f}(x_{i,f})} \right) \quad (2.7)$$

Unter geeigneten Bedingungen entstehen Cluster, welche eine kritische Größe überschreiten, stabil sind und durch weitere Anlagerung von Molekülen zu wachsen beginnen. Diese werden als Keim oder Nukleus bezeichnet. Der Gleichgewichtszustand eines Systems kann aus einer Energiebetrachtung hergeleitet und der bevorzugte Systemzustand durch einen Minimierungsansatz bestimmt werden. Ein weiteres Konzept, welches das Phänomen des Phasenübergangs zu beschreiben vermag, ist die Übersättigung  $S$  (eng. supersaturation). Gleichung 2.8 zeigt die Definition der Übersättigung unter Zuhilfenahme des Partialdruckes  $p_i$  der Fremdspezies  $i$  (welcher zur Verknüpfung des Phasenübergangs mit dem Massenbruch der Spezies  $Y_i$  führt) und des Sättigungsdruckes  $p_s$ . Der Sättigungsdruck wird durch den Gleichgewichtszustand von koexistierender flüssiger und gasförmiger Phase definiert (siehe z. B. [7, 83]). Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird die Sättigung

$$S = \frac{p_i}{p_s} \quad (2.8)$$

zur Charakterisierung der Neigung des Systems zum Phasenübergang verwendet. Das System neigt für  $S > 1$  zum Phasenübergang. Wie bereits erwähnt, spielt auch die Stoßfrequenz eine entscheidende Rolle beim Phasenübergang. Die Stoßfrequenz ist über die mittlere Molekülgeschwindigkeit  $v$  mit der Temperatur  $T$  verknüpft. Es gilt für ideale Gase  $\frac{mv^2}{2} = \frac{3}{2}k_b T$  [26]. Somit kann die mikroskopische Betrachtung der Gaskinetik mit makroskopischen Größen verknüpft werden. In Abbildung 2.1 ist ein Phasendiagramm zu sehen. Es verdeutlicht die möglichen Aggregatzustände in Abhängigkeit vom Sättigungsdruck und der Temperatur. Am Tripelpunkt (mit TP gekennzeichnet) können alle drei Phasen koexistieren. C ist der kritische Punkt, für  $T > T_c$  kann nicht mehr zwischen Gasphase und flüssiger Phase unterschieden werden. Für alle Paare koexistierender Phasen  $k$  und  $k'$  gilt für das chemische Potential

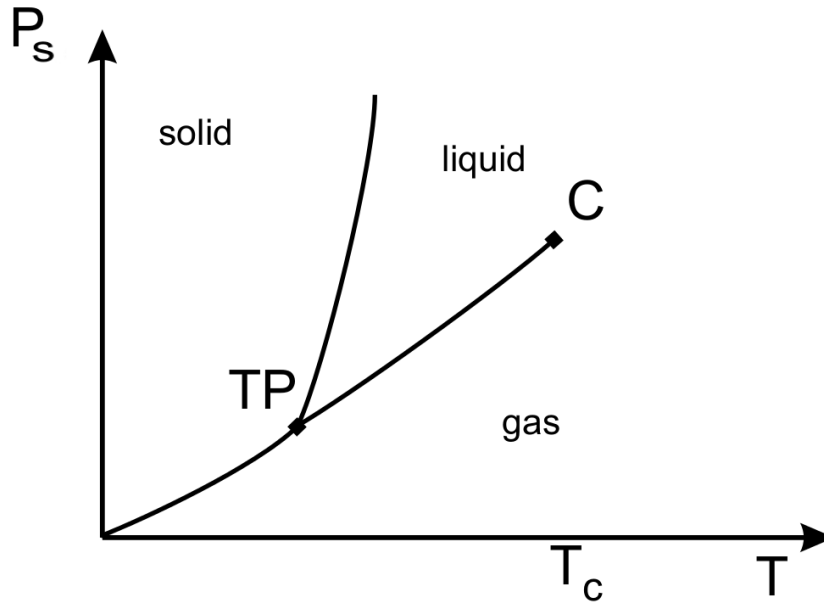


Abbildung 2.1: Phasendiagramm mit festem, flüssigem und gasförmigem Zustand in Abhängigkeit von Temperatur und Sättigungsdruck

$$\mu_{i,k}(p_s, T) = \mu_{i,k'}(p_s, T) \quad [148].$$

Die Wachstumsgeschwindigkeit der Cluster durch Anlagerung von Molekülen aus der Gasphase wird ebenfalls durch die Kollisionsfrequenz der freien Moleküle gleicher Spezies mit den bereits gebildeten Clustern bestimmt. Die Kollisionsfrequenz lässt sich aus der kinetischen Gastheorie herleiten und ist durch

$$\nu_s = \pi d^2 \bar{v} n \quad (2.9)$$

gegeben. Hierbei ist  $d$  der Moleküldurchmesser,  $\bar{v}$  die mittlere Geschwindigkeit und  $n$  die Anzahl der Moleküle pro Volumen [49]. Die Modellierung der homogenen Nukleation und Kondensation wird in den Abschnitten 3.3 und 3.4 erörtert. Tiefere Einsichten in die Materie können in den verwendeten Quellen [21, 59, 148, 75, 49, 26, 7, 83] gefunden werden.

## 2.3 WDF-Methoden

Wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, stellen die aufgeführten Gleichungen ein Anfangswertproblem dar, was eine deterministische Behandlung nahelegt. Das Verhalten turbulenter Strömungen ist jedoch maßgeblich durch kleinskalige Fluktuationen bestimmt, welche zu ungeordnetem und chaotischem Verhalten führen, im Allgemeinen nicht aufgelöst werden können und daher eine statistische Beschreibung in den Fokus rücken lassen. Die statistische Information stochastischer Variablen in einem turbulenten Strömungsfeld kann durch ein Wahrscheinlichkeitsdichtefunktional (Probability Density Functional) beschrieben werden. Reduziert man die Be-

trachtung auf einen Zeitpunkt und Ort, so kann die Beschreibung mit einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (WDF, engl. „Probability Density Function“ (PDF)) geschehen. Es können alle Momente der Zufallsvariablen aus der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gewonnen werden. Informationen über zeitliche oder räumliche Korrelationen sind jedoch nicht verfügbar. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion einer Zufallsvariablen  $\Phi$  sei mit  $P(\hat{\Phi}; \mathbf{x}, t)$  dargestellt. Die Definition der Wahrscheinlichkeit, dass sich die Zufallsvariable zum Zeitpunkt  $t$  am Ort  $\mathbf{x}$  im Bereich  $d\hat{\Phi}$  um  $\hat{\Phi}$  befindet, ist durch

$$P(\hat{\Phi})d\hat{\Phi} \equiv Prob[\hat{\Phi} \leq \Phi < \hat{\Phi} + d\hat{\Phi}] \quad (2.10)$$

gegeben. Die Erweiterung auf einen  $M$ -dimensionalen Zufallsvektor  $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_M)^T$  mit Werten im Zustandsraum  $\Psi = (\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_M)^T$  führt zur Verbund-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $P(\Psi)$  mit der Wahrscheinlichkeit

$$P(\Psi)d\Psi \equiv Prob[\Psi \leq \Phi < \Psi + d\Psi] \quad (2.11)$$

für Werte der Zufallsvariablen  $\Phi$  im Bereich  $\Psi \leq \Phi < \Psi + d\Psi$ . Notwendige Eigenschaften einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion sind

$$P(\Psi) \geq 0 \quad (2.12)$$

wodurch der Ausschluss negativer Werte mathematisch formuliert ist. Zudem wird eine Normierung nach

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\Psi)d\Psi = 1 \quad (2.13)$$

gefordert. Die Funktion muss stückweise stetig sein. Ein definiertes Limesverhalten

$$\lim_{\Psi \rightarrow -\infty} P(\Psi) = \lim_{\Psi \rightarrow \infty} P(\Psi) = 0 \quad (2.14)$$

nach Gleichung 2.14 ist ebenfalls zu erfüllen. Das  $n$ -te Moment  $m_n$  kann aus der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion nach

$$m_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^n P(\Psi)d\Psi \quad (2.15)$$

gebildet werden. Der Erwartungswert  $\langle \Phi \rangle$  entspricht dem ersten Moment. Die Favre-gemittelte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$\tilde{P}(\Psi) \equiv \frac{\rho(\Psi)P(\Psi)}{\langle \rho \rangle} \quad (2.16)$$

wird zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeit bei Fluiden mit inhomogener, variabler Dichte verwendet. Die Massendichtefunktion  $\mathcal{P}$  (MDF) ist durch

$$\mathcal{P}(\Psi) \equiv \rho(\Psi)P(\Psi) \quad (2.17)$$

definiert. Die Transportgleichung der WDF ist

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\langle \rho | \Psi \rangle P(\Psi)) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \rho u_j | \Psi \rangle P(\Psi)) = \\ & - \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \left( P(\Phi) \left\langle \left( \frac{\partial}{\partial t} (\rho \Phi_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \Phi_i) \right) \middle| \Psi \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Der linken Seite der Gleichung, mit der lokalen zeitlichen Änderung und der konvektiven Änderung, steht der Drift im Phasenraum auf der rechten Gleichungsseite gegenüber. Spezifiziert werden müssen noch die entsprechenden Quellterme, die von der Wahl der betrachteten Variablen  $\Phi_i$  abhängen.  $\Phi_i$  sind die Elemente des Vektors  $\Phi$ . Für die betrachteten Dimensionen in dieser Arbeit ist dies in Gleichung 2.27 gegeben. Eine Herleitung der allgemeinen WDF-Transportgleichung findet sich in [106]. Im Falle vieler einzelner Realisierungen  $\Phi$  eines Systems, kann die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines Zustandes an einem Ort und zu einem Zeitpunkt mit der momentanen Verbund-WDF (engl. fine grained PDF)

$$P(\Psi, \mathbf{x}, t) \equiv \delta(\Phi(\mathbf{x}, t) - \Psi) = \prod_{\alpha} \delta(\Phi_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - \Psi_{\alpha}) \quad (2.19)$$

als Produkt von Deltafunktionen dargestellt werden. Der Erwartungswert der momentanen Verbund-WDF führt im Falle unendlich vieler Realisierungen zur WDF

$$P(\Psi, \mathbf{x}, t) = \langle P(\Psi, \mathbf{x}, t) \rangle = \int \delta(\Phi' - \Psi) P(\Phi') d\Phi'. \quad (2.20)$$

Die Berechnung von Quelltermen  $W_{\alpha}(\Phi)$ , welche im Allgemeinen eine Modellierung erfordern, kann durch Verwendung der WDF nach

$$\langle W_{\alpha} \rangle = \int W_{\alpha} P(\Psi) d\Psi \quad (2.21)$$

erfolgen und löst somit das Schließungsproblem. In Lagrangen WDF-Methoden werden stochastische Modelle verwendet, um die Entwicklung der einzelnen Partikel zu beschreiben. Ein einfaches stochastisches Modell ist die Langevin-Gleichung, welche einen Markov-Prozess beschreibt. Ein zentraler Bestandteil der Methode ist die Tatsache, dass in einem turbulenten Fluid die WDF der transportierten Stoffe durch ein Ensemble von Partikeln repräsentiert werden kann. Die diskrete WDF kann aus den Zuständen der N-Partikel des Ensembles

$$F_N(\Psi) \equiv \frac{1}{\sum_{n=1}^N m^n} \sum_{n=1}^N m^n \cdot \delta(\Phi^n - \Psi) \quad (2.22)$$

gewonnen werden, wobei  $\delta$  die Dirac-Funktion repräsentiert und  $m$  die Partikelmasse. Im Limes strebt der Erwartungswert der diskreten WDF gegen den mathematischen Erwartungswert. Der Erwartungswert der diskreten WDF entspricht der

kontinuierlichen WDF, diese Beziehung drückt sich durch

$$\langle F_N(\Psi) \rangle = F(\Psi) \quad (2.23)$$

aus. Aus der diskreten WDF  $F_N$  können Ensemble-Mittel beliebiger Funktionen  $Q = Q(\Phi)$  durch

$$\langle Q(\Phi) \rangle_N = \frac{1}{\sum_{n=1}^N m^n} \sum_{n=1}^N m^n Q(\Phi^n) \quad (2.24)$$

gebildet werden. Die Änderung der WDF kann durch den Transport eines repräsentativen Partikel-Ensembles im physikalischen Raum und Zustandsraum abgebildet werden. Die einzelnen Realisierungen des stochastischen Systems (fortan Monte-Carlo-Partikel bzw. MC-Partikel genannt) haben jedoch keine physikalische Bedeutung. Für die physikalische Interpretation müssen die WDF und deren Momente heran gezogen werden [113]. Die Berechnung der WDF mit Partikel-Verfahren bietet einige Vorteile, wie die lineare Abhängigkeit des Rechenaufwandes und der Speicherbelegung mit der Anzahl der unabhängigen Variablen, sowie das Auftreten der Quellterme in geschlossener Form, und ist Gegenstand dieser Arbeit. Weitere Einsichten können durch die Lektüre der verwendeten Quellen [106, 115, 5, 110, 113, 111, 123] gewonnen werden.

## 2.4 Aerosole und deren Beschreibung durch Populationsbilanzgleichung

Aerosole sind eine Suspension von Tropfen oder Partikeln in einem Gas. Die sehr allgemein gefasste Definition spiegelt bereits die große Zahl möglicher Stoffe, Quellen und Bereiche wider, die mit Aerosolen in Verbindung stehen. Sprachlich werden Aerosole im Allgemeinen mit ihrer Herkunft verknüpft. Staub beschreibt meist kleine Partikel aus Desintegrationsprozessen. Rauch und Abgas deuten auf eine brennende Quelle hin. Ruß bildet eine weitere Unterkategorie von Kohlenstoffpartikeln, welche aus der Verbrennung fossiler Brennstoffe stammen. Wolken oder Nebel spezifizieren hingegen kleine Flüssigkeitströpfchen. Ein Aerosol bildet ein dynamisches System, dessen Eigenschaften weitgehend durch Form und Größenverteilung beschrieben werden können. Die Größe der Partikel oder Tropfen, die ein Aerosol bilden, liegen im Bereich von Nano- bis Mikrometern. Neben der Bildung durch Nukleation (Gas zu Flüssigkeit), Resublimation (Gas zu Feststoff), Erosion (Abrieb von Feststoffen), werden die Eigenschaften noch durch Kondensation, Agglomeration und Zerbrennen beeinflusst [50], [22], [163]. Die Beschreibung des Aerosols kann durch eine Größenverteilungsfunktion  $n_d(d_p, \vec{x}, t)$  erfolgen, welche durch  $n_d(d_p, \vec{x}, t) = \frac{dN}{d(d_p)}$  definiert wird.  $N$  stellt die Anzahl der Partikel pro Volumen dar und  $d_p$  den Partikeldurchmesser [71]. Die räumliche und zeitliche Entwicklung der Größenverteilungsfunktion kann durch die Populationsbilanzgleichung (PBG) (engl. „Population Balance Equation“) beschrieben werden. Eine allgemeine Form findet

sich z. B. in [131]

$$\frac{\partial n(x_i, t)}{\partial t} - \frac{\partial [u_i \cdot n(x_i, t)]}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 \cdot n(x_i, t)}{\partial x_i^2} + B + B_{agg} - D_{agg} + B_{br} - D_{br}. \quad (2.25)$$

Zu der zeitlichen Änderung (linke Seite) aufgrund von Konvektion und Diffusion (erste zwei Terme der rechten Seite) kommen Änderungen aufgrund von Nukleation (B), Agglomeration (Quelle:  $B_{agg}$ , Senke:  $D_{agg}$ ) und Zerschneiden (Quelle:  $B_{br}$ , Senke:  $D_{br}$ ) hinzu. Die Modellierung der Populationsbilanzgleichung wird in Abschnitt 3.2 erörtert. Für eine diskretisierte Behandlung der Größenverteilungsfunktion kann Gleichung 2.25 in eine Transportgleichung für die Besetzungsdichte der einzelnen Sektionen  $N_k = N(d_k)$  überführt werden. Für die k-te Sektion ist diese durch

$$\frac{\partial N_k}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) N_k = D \cdot \nabla^2 N_k + \dot{W}_k \quad (2.26)$$

gegeben. Hierbei fasst  $\dot{W}_k$  die bereits beschriebenen Quellterme zusammen. Eine vereinfachte Transportgleichung der vereinten WDF für die Spezies und die diskretisierte Größenverteilungsfunktion  $f(\mathbf{y}, \mathbf{n}, \mathbf{x}, t)$  ist durch

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial f}{\partial x_j} = \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} [\langle u'_j | \mathbf{y}, \mathbf{n} \rangle \cdot f] - \frac{\partial}{\partial y_\alpha} [\langle D_\alpha \nabla^2 y_\alpha | \mathbf{y}, \mathbf{n} \rangle \cdot f] - \frac{\partial}{\partial y_\alpha} [w_\alpha(\mathbf{y}, \mathbf{n}) \cdot f] \\ & - \frac{\partial}{\partial n_k} [\langle D_k \nabla^2 n_k | \mathbf{y}, \mathbf{n} \rangle \cdot f] - \frac{\partial}{\partial n_k} [W_k(\mathbf{y}, \mathbf{n}) \cdot f] \end{aligned} \quad (2.27)$$

dargestellt. Hierbei repräsentiert  $\mathbf{n}$  die Variablen  $N_k$  im Zustandsraum und  $\mathbf{y}$  den Zustandsraum der Spezies. Die Quellterme sind durch  $w_\alpha$  und  $W_k$  dargestellt. Es wurde die Reynolds-Zerlegung verwendet.

## 2.4.1 Lösungsverfahren für die Populationsbilanzgleichung

Die Populationsbilanzgleichung (Gleichung 2.25) stellt ein komplexes Integral-Differential-Gleichungssystem dar, dessen Lösung mit erheblichem Aufwand verbunden ist [130], [122], [30]. Nur in stark vereinfachten Fällen kann eine analytische Lösung erreicht werden. Inhomogenitäten im Strömungsfeld haben jedoch starken Einfluss auf die Größenverteilungsfunktion. Zur Berücksichtigung inhomogener Strömungsfelder kann die PBG im Falle laminarer Strömungen ohne großen Aufwand mit der Navier-Stokes-Gleichung gekoppelt werden. In turbulenten Strömungsfeldern, welche im Allgemeinen nicht vollständig aufgelöst werden können, führen turbulente Fluktuationen der Skalarverteilungen sowie der Größenverteilungsfunktion selbst zu ungeschlossenen Termen. Im Folgenden wird ein Überblick über die wichtigsten Lösungsansätze gegeben sowie die exemplarische Aufführung von Forschungsarbeiten mit der jeweiligen Methode vorgenommen.

### 2.4.1.1 Analytische Methoden

Unter vereinfachten Bedingungen kann für die PBG eine analytische Lösung erreicht werden. Lage [64] sowie Patil und Andrews [104] leiteten eine analytische Lösung der PBG unter Berücksichtigung von Agglomeration und Zerbrechen her, jedoch unter der restriktiven Bedingungen, dass die Gesamtzahl der Partikel konstant ist. Eine Lösung für voneinander unabhängige Agglomerations- und Zerbrechens-Raten, jedoch mit Beschränkungen für die Form der Verteilung, wurde von verschiedenen Forschern veröffentlicht [14, 33, 17]. Eine Übersicht über Arbeiten zur analytischen Lösung der PBG findet sich in [84].

### 2.4.1.2 Momenten-Methoden

Eine Lösung der PBG mit Hilfe von Momenten-Methoden wurde erstmals von Hulburt und Katz 1964 [53] vorgeschlagen. Das n-te Momente der Größenverteilungsfunktion ist durch

$$m_n(\mathbf{x}, t) = \int_0^\infty n(d_p, \mathbf{x}, t) d_p^n dd_p \approx \sum_{j=1}^N w_j d_{p,j}^k \quad (2.28)$$

definiert. Die Transportgleichungen der Momente sind gewöhnliche Differentialgleichungen, während die WDF-Transportgleichung eine partielle Integral-Differential-Gleichung darstellt. Die Behandlung der Momenten-Transportgleichungen bringt jedoch ein Schließungsproblem mit sich. Eine effektive Technik zur Schließung wurde 1997 von McGraw [85] mit der „Quadrature Method of Momentes“ (QMOM) eingeführt. Hierbei werden die Integrale durch eine Reihenentwicklung dargestellt (rechte Seite von Gleichung 2.28). Die Abszisse  $d_p$  und die Gewichte  $w_j$  wurden mit dem „Product-Difference“-Algorithmus (PD) [46] berechnet. Die Transportgleichung für das n-te Moment ist

$$\frac{\partial m_n(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \langle u_i \rangle \frac{\partial m_n(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \Gamma_t \frac{\partial m_n(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} \right] = S_n(\mathbf{x}, t). \quad (2.29)$$

Die Reynolds-gemittelte Geschwindigkeit der i-ten Richtung ist durch  $\langle u_i \rangle$  repräsentiert, die turbulente Diffusivität durch  $\Gamma_t$  und der Quellterm durch  $S_k(\mathbf{x}, t)$ , welcher durch

$$S_n(\mathbf{x}, t) = (0)^n B(\mathbf{x}, t) + \int_0^\infty n d_p^{n-1} G(d_p) n(d_p, \mathbf{x}, t) dd_p + B_{a,n}(\mathbf{x}, t) - D_{b,n}(\mathbf{x}, t) \quad (2.30)$$

gegeben ist. Die Gleichung berücksichtigt den Quellterm  $B(\mathbf{x}, t)$ , die Wachstumsrate  $G(d_p)$  sowie die Quellen und Senken aufgrund von Agglomeration  $B_{a,n}(\mathbf{x}, t)$  und Zerbrechen  $D_{b,n}(\mathbf{x}, t)$ . Die QMOM-Methode stellt auch die Terme auf der rechten Seite von Gleichung 2.30 durch Summen über  $d_{p,j}$  und  $w_j$  dar. In der Literatur finden sich viele Beispiele für die Anwendung der QMOM-Methode. Die Forschergruppe um Fox veröffentlichte bereits einige Arbeiten, bei welchen diese Methode angewandt



wurde [80, 165, 154, 81, 82]. Weitere Arbeiten wurden z. B. von Menwer et al. [6] und Wan et al. [152] durchgeführt. Eine Weiterentwicklung, die „Direct Quadrature Method of Moments“-Methode (DQMOM), wurde im Jahr 2004 von Fan et al. [34] vorgestellt. Eine LES zur Berechnung der Nachlaufströmung von Fahrzeugen in Kombination mit der DQMOM-Methode wurde von Chan und Liu [20] zur Berechnung von Abgaspartikeln von Fahrzeugen verwendet. Ein weitere Variante ist die „Conditional Quadrature Method of Moments“-Methode (CQMOM) von Yuan und Fox [162]. Ebenfalls eine Modifikation des ursprünglichen Ansatzes ist die „Method of Moments with Interpolative Closure“ (MOMIC), welche von Müller et al. [97] zur Berechnung von Rußpartikeln verwendet wurde.

### 2.4.1.3 Sektionale Methoden

Die Darstellung der Größenverteilungsfunktion durch einen Diskretisierungsansatz wird als „Classes Methods“ (CM) bezeichnet. Im Allgemeinen umfassen die möglichen Größen von Partikeln oder Tropfen mehrere Größenordnungen. Die diskrete Darstellung der Größenverteilungsfunktion erfolgt daher im Allgemeinen nicht durch äquidistante Stützstellen, sondern durch eine geometrische Folge, deren Summanden  $d_k = d_0 \cdot c_w^k$  über einen Wachstumsfaktor mit dem Durchmesser des ersten Elementes  $d_0$  verknüpft sind. Der Wachstumsfaktor wird durch  $c_w = \frac{d_{k+1}}{d_k}$  definiert und gibt das Verhältnis der Größe aufeinander folgender Elemente an. Zur Charakterisierung kann neben dem Durchmesser  $d_k$  z. B. auch die Masse der Partikel oder das Volumen verwendet werden. Bei dieser Darstellung sind die Änderungen einer Sektion aufgrund von Nukleation oder Kondensation numerisch leicht abzubilden. Die Änderungen aufgrund von Agglomeration oder Zerbrechen führen zu erheblichem Rechenaufwand, da alle Kombinationen aus anderen Sektionen berücksichtigt werden müssen, welche die Population der Sektion  $k$  beeinflussen können. In der Literatur finden sich verschiedene Ansätze, um diese Problematik zu behandeln. Batterham et al. (1981) [11] verwendeten den Partikeldurchmesser zur Charakterisierung und einen Wachstumsfaktor von  $c_w = 2^{\frac{1}{3}}$ . Um den numerischen Aufwand zu reduzieren berücksichtigten sie nur Partikel, die aus  $2^i$  Monomeren gebildet wurden. Ähnliche Ansätze wurden von Hounslow et al. [51] und Lister et al. [74] verfolgt. Für Systeme, welche ausschließlich Zerbrechen abbilden, benutzt Vanni [147] Elemente beliebiger Größe. Kumar und Ramkrishna [63] verwendeten einen Algorithmus, welcher beim Zerbrechen und der Agglomeration von Elementen beliebiger Größe die Masse und die Anzahl der Elemente erhielt.

### 2.4.1.4 WDF-Methoden

Um die Effekte kleinskaliger Turbulenz bei der Entwicklung der Größenverteilungsfunktion berücksichtigen zu können, wurden WDF-Methoden entwickelt. Die Information der WDF der Skalare ermöglicht die Berechnung der nichtlinear abhängigen Quellterme ohne Modellierung der Effekte kleinskaliger Turbulenz. Aufgrund der begrenzten räumlichen und zeitlichen Information der WDF (ein-Punkt-ein-Zeitpunkt WDF) sind jedoch nicht alle Terme geschlossen und



das turbulente Mischen muss modelliert werden. Abhängig von der transportierten Information werden WDF-Methoden in zwei Klassen eingeteilt. Die „presumed PDF“-Methoden transportieren einige Momente der Größenverteilungsfunktion und rekonstruieren selbige mit einer angenommenen Form (z. B. Gauss oder  $\beta$ -PDF) aus den Momenten. Eine Reihe von Arbeiten zu Partikelwachstum mit einer angenommenen WDF-Methode wurde von Baldyga et al. [9, 10, 8] durchgeführt. Moss et al. [141, 96, 95] verwendeten diese Technik in Kombination mit einem flamelet Ansatz, um Rußbildung zu simulieren. Eine angenommene WDF-Methode wurde von Kronenburg et al. [61] in Kombination mit „Conditional Moment Closure“ (CMC) zur Berechnung von Rußbildung angewendet. Die zweite Klasse sind die transportierten-WDF-Methoden (engl. „transported PDF-methods“). Bei dieser Methode wird eine Transportgleichung für die PDF aller Zufallsvariablen gelöst. Es muss daher keine Annahme bezüglich der Form der WDF getroffen werden, der numerische Aufwand ist jedoch deutlich größer als bei „presumed PDF“-Methoden. Die Methode geht auf Arbeiten von Lundgren [78] zurück. Dopazo und O’Brien [29] wendeten diese Technik auf Verbrennungsprobleme an. Pope führte Monte Carlo Methoden (MC-Methoden) ins Feld, um durch einen stochastischen Ansatz numerisch effiziente Lösungsmethoden nutzen zu können [110, 113, 115, 117]. MC-Methoden können in einem Lagrange oder Eulerschen Rahmen umgesetzt werden.

Die Eulersche Umsetzung mit der stochastischen Feld-Methode (engl. „Stochastic Fields Method“ oder „Field Monte Carlo“-Methode) wurde von Garmory und Mastorakos [41] zu Berechnung von Nukleation und Kondensation von DBP-Tropfen in einem turbulenten Jet verwendet. Akroyd nutzte diese Methode zur Berechnung von Titan-Nanopartikel-Wachstum in reagierenden, turbulenten Strömungen [2]. Die Methode geht auf Arbeiten von Valino [145] und Sabel’nikov und Souldard [133] zurück. Bei dieser Methode wird die stochastische Komponente über einen Wiener-Prozess bei der Evolution des Eulerfeldes eingebracht.

Eine Lagrange Umsetzung mit stochastischen Partikeln (Monte Carlo Partikel) wurde von Lindstedt und Louloudi [73] zur Berechnung der Bildung von Rußpartikeln verwendet. Sie transportierten die WDF aller reaktiven Skalare und die Momente der Rußverteilung. Der Transport der reaktiven Skalare und der diskretisierten WDF wurde von Veroli und Rigopoulos [150] 2009 zur Berechnung der Ausscheidung von Bariumsulfat in einer turbulenten Rohrströmung verwendet. Das Strömungsfeld wurde in beiden Fällen mit einer RANS-Simulation berechnet. Weitere Arbeiten mit dieser Technik wurden z. B. von Kuan und Lindstedt [62] durchgeführt. Wesentliche Charakteristiken der Methode, welche auch den Kern dieser Arbeit bildet, werden in den Abschnitten 2.3 und 3.2 erörtert.



# 3 Modellierung

In diesem Abschnitt wird ein Überblick über die wichtigsten Modellierungsansätze gegeben. Hierbei werden die verwendeten Schließungsmodelle für die Berechnung turbulenter Strömungen vorgestellt. Im Anschluss wird die Umsetzung der Populationsbilanzgleichung mit MC-Partikeln diskutiert, gefolgt von der Modellierung der homogenen Nukleation von DBP-Tropfen, deren Wachstum durch Kondensation sowie die Modellierung der Phasenübergangswärme und die Einführung der verwendeten Mischungsmodelle.

## 3.1 Modellierung turbulenter Strömungen

Die Lösung der strömungsmechanischen Gleichungen, die in Abschnitt 2.1 dargelegt wurde, kann analytisch nur für sehr einfache Problemstellungen erreicht werden. Turbulente Strömungen sind ein Mehrskalenproblem in Raum und Zeit. Die kinetische Energie der Strömung wird von großen, energiereichen Strukturen zu energieärmeren, kleineren Strukturen umverteilt und schließlich dissipiert. Die größten Strukturen dieser Energiekaskade sind durch die Abmessung des umströmten oder durchströmten Objektes gegeben. Die kleinsten Skalen, Kolmogorov-Mikroskalen  $\eta$ , hängen von der Reynolds-Zahl ab. Es gilt  $\eta \propto \frac{1}{Re^{\frac{3}{4}}}$  [142]. Weitere Eigenschaften turbulenter Strömungen und Konzepte zur Beschreibung finden sich in Klassikern der Strömungsmechanik (siehe z. B. [132, 159]). Mit steigender Reynolds-Zahl werden die Anforderungen an die Auflösung und an die damit verbundenen Computerressourcen immer höher. Trotz der Verdoppelung der Rechnerleistung alle zwei Jahre (Moore's Law [94]) ist auch in absehbarer Zeit die voll aufgelöste Berechnung industriell relevanter Strömungsprobleme nicht möglich. Abhilfe schafft eine Trennung in aufgelöste, große Strukturen und nicht aufgelöste, kleine Strukturen. Hierbei wird mindestens 80% der Energie der Strömung aufgelöst und die Effekte der kleinskaligen Strukturen können modelliert werden, aufgrund der mit abnehmender Größe zunehmenden Isotropie. Die Trennung kann mit einer räumlichen Filterung erreicht werden [43, 67]. Die Filterung führt zum Informationsverlust bezüglich der Strukturen mit Abmessungen kleiner der Filterweite und die Effekte der Feinstruktur müssen modelliert werden. Mit Hilfe der Grobstruktursimulation können industriell relevante turbulente Strömungen zeitaufgelöst simuliert und neue Anwendungsgebiete der Forschung zugänglich gemacht werden [116, 76].

### 3.1.1 Filterung

Die Filterung durch ein Faltungsintegral

$$\bar{f}(x) = \int_V G(x, y, \Delta(x)) f(y) dy \quad (3.1)$$

führt zu einer Trennung in bekannte, gefilterte Terme ( $\bar{\Phi}$ ) und unbekannte Feinstrukturterme  $\Phi'$  ( $\Phi = \bar{\Phi} + \Phi'$ ). Für Strömungen mit variabler Dichte wird eine Dichte gemittelte Filterung (Favre-Filterung)

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (3.2)$$

angewendet. Wendet man diese Operation auf die Navier-Stokes-Gleichung an, so erhält man für die i-te Komponente die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{fs}}{\partial x_j}. \quad (3.3)$$

Die Feinstrukturanteile des Stress-Tensors  $\tau_{ij}^{fs}$  müssen modelliert werden [68], [58].

### 3.1.2 Smagorinsky-Modell

Da die turbulenten Strukturen mit abnehmender Größe zunehmend isotrop werden, kann die Modellierung der Feinstrukturanteile des Stress-Tensors  $\tau_{ij}^{fs}$  mit der Boussinesq-Annahme mittels der aufgelösten Strömungsanteile nach

$$\tau_{ij}^{fs} = -2\mu_t \tilde{S}_{ij} = -2\bar{\rho}(C_s \Delta)^2 \|\tilde{S}\| \tilde{S}_{ij} \quad (3.4)$$

erfolgen. Durch die Einführung der turbulenten Viskosität  $\mu_t = \bar{\rho}(C_s \Delta)^2 \|\tilde{S}\|$  werden die Effekte der turbulenten Schwankungen mit denen der molekularen Viskosität verknüpft und eine Schließung erreicht [135]. Bei anisotropen Gittern kann für die Längenskala  $\Delta$  z. B. eine gemittelte Kantenlänge aus dem LES-Zell-Volumen verwendet werden [25]. Der Stresstensor definiert sich durch

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.5)$$

Für die Smagorinsky-Konstante  $C_s$  finden sich in der Literatur Werte im Bereich  $0,05 < C_s < 0,5$ . Um die Abhängigkeit der Modellierung von der Wahl des Wertes der Smagorinsky-Konstante zu lösen, entwickelten Germano et al. [44] eine dynamische Prozedur zur Berechnung von  $C_s$ . Hierzu wird ein größerer Testfilter verwendet. Der Testfilter wird meist mit doppelter Breite gewählt,  $\hat{\Delta} = 2 \cdot \Delta$ . Die Konstante wird unter Verwendung der Germano-Identität  $L_{ij} = -\widehat{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \widehat{\bar{u}_i} \widehat{\bar{u}_j}$  und  $M_{ij} = \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \hat{S}_{ij} - \Delta^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij}$  gebildet [37]. Eine Lösung für das überbestimmte Glei-

chungssystem von Lilly [72] führt zu

$$C_s^2 = \frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \quad (3.6)$$

für die Bestimmung des Koeffizienten.

## 3.2 Modellierung der Populationsbilanzgleichung

Im Rahmen dieser Arbeit werden die homogene Nukleation von Tropfen und das Wachstum durch Kondensation betrachtet. Die Behandlung von Zerbrennen und Agglomeration sind nicht Gegenstand der Betrachtungen. Die Populationsbilanzgleichung (Gleichung 2.25) kann somit durch

$$\begin{aligned} \frac{\partial N(d_p, \vec{x}, t)}{\partial t} + \nabla[\vec{u} \cdot N(d_p, \vec{x}, t)] + \frac{\partial}{\partial d_p} [G(d_p, \vec{Y}) \cdot N(d_p, \vec{x}, t)] \\ = D_p \nabla^2 N(d_p, \vec{x}, t) + \dot{\omega}_N(\vec{Y}, N) \end{aligned} \quad (3.7)$$

dargestellt werden [53, 131]. Neben der lokalen, zeitlichen Änderung und der konvektiven Änderung der Populationsdichte, links des Gleichheitszeichens, beschreibt der Drift im Phasenraum den Prozess des Tropfenwachstums. Die Terme der rechten Seite beschreiben die Diffusion und den Quellterm der homogenen Nukleation. Gleichung 3.7 stellt eine Fokker-Planck-Gleichung dar. Eine äquivalente Beschreibung der räumlichen und zeitlichen Änderung der Größenverteilungsfunktion erhält man nach dem Satz von Feynman-Kac durch ein System von Langevin-Gleichungen für ein Ensemble stochastischer Einheiten [40, 146, 137]. Das Feynman-Kac Theorem findet sich in Appendix 11.1. Ein solches System stellen die Gleichungen

$$d\vec{x} = \vec{u}(\vec{x}, t) \cdot dt + (2 \cdot \Gamma(\vec{x}, t))^{\frac{1}{2}} \cdot d\vec{\omega} \quad (3.8)$$

und

$$d\Phi_i = [M(\vec{x}, \Phi_i) + W_i(\Phi)] dt \quad (3.9)$$

dar und werden in jedem Zeitschritt für jedes MC-Partikel gelöst. Gleichung 3.8 beschreibt die räumliche Änderung eines MC-Partikels. Zu der Änderung aufgrund der aus der LES-Simulation erhaltenen Geschwindigkeit kommt noch eine stochastische Komponente hinzu. Hierbei ist  $\Gamma(\vec{x}, t)$  die effektive Diffusivität.  $\vec{\omega}$  ein vektorielles, diskretes Äquivalent eines unabhängigen Wiener-Prozesses. Für jeden Zeitschritt werden die Komponenten des Vektors  $\omega_i = \sqrt{\Delta t} \xi_i$  berechnet, wobei  $\xi_i$  Zufallszahlen nach einer Gaussverteilung mit Mittel Null und Varianz Eins darstellen. Die Änderung der Skalarwerte (Gleichung 3.9), die auf dem MC-Partikel transportiert werden, wird durch den Mischungsoperator  $M(\vec{x}, \Phi_i)$  und den Quellterm  $W_i(\Phi)$  beschrieben. Die Modellierung des Mischungsoperators wird in Abschnitt 3.6 und die der Quellterme in den Abschnitten 3.3 und 3.4 erörtert. Zu

den Skalaren, die die MC-Partikel transportieren, gehören auch die diskreten Sektionen  $N_k$  der Größenverteilungsfunktion  $N(d_p, \vec{x}, t)$ . Für die diskrete Darstellung der Größenverteilungsfunktion werden Tropfendurchmesser als Stützstellen definiert. Die Tropfendichte  $N_k$  gibt an, wie viele Tropfen mit dem Durchmesser  $d_k$  pro Volumen existieren. Die Anzahl der Sektionen wird im Allgemeinen durch die Rechenleistung limitiert und da die möglichen Tropfengrößen mehrere Größenordnungen umfassen, werden aufeinander folgende Sektionen mit einem Wachstumsfaktor versehen. Die mathematische Formulierung mit einem Wachstumsfaktor  $c_w > 1$  führt zu  $\frac{d_{k+1}}{d_k} = c_w$ . Der Wachstumsfaktor sollte moderat gewählt werden  $1 < c_w \ll 2$  (siehe [74]).

### 3.3 Modellierung der Oberflächenspannung und homogenen Nukleation

Bevor in diesem Abschnitt die Modellierung der Oberflächenspannung und der Nukleationsrate erörtert wird, werden noch die wichtigsten zugrunde liegenden Größen eingeführt. Die Summe der Partialdrücke in einem Gasmisch ergeben den Gesamtdruck. Der Partialdruck einer Spezies kann nach  $p_i = X_i \cdot p$  berechnet werden [144]. Der Molenbruch einer Spezies  $X_i$  kann in den Massenbruch  $Y_i$  mit  $X_i = \frac{M}{M_i} \cdot Y_i$  umgerechnet werden, wobei  $M$  die molare Masse des Gemisches ist und  $M_i$  die molare Masse der  $i$ -ten Spezies [108]. In der Literatur finden sich verschiedene Formulierungen für den Sättigungsdruck von DBP  $p_s$ . Eine Formulierung nach [128] ist

$$\log(p_s) = 133,32 \cdot \left( 7,065 - \frac{1666}{T} - \frac{547700}{T^2} \right) \quad [pa] \quad (3.10)$$

welche mit  $p_{sat,1}$  bezeichnet werden wird. Die Formulierung aus [118]

$$\log(p_s) = \frac{-4501}{T} + 12,88 \quad [pa] \quad (3.11)$$

wird mit  $p_{sat,2}$  referenziert werden. Eine weitere Formulierung aus [28]

$$\log(p_s) = 160,25 - \frac{16941}{T} - 19,254 \ln T + \frac{6,6324 \cdot 10^{-6}}{T^2} \quad [pa] \quad (3.12)$$

wird mit  $p_{sat,3}$  referenziert werden. In Abbildung 3.1 sind die Sättigungsdrücke im für diese Arbeit relevanten Temperaturbereich graphisch dargestellt. Der Temperaturbereich erstreckt sich auf  $299K < T < 413K$ . Details können Abschnitt 5 entnommen werden. Die exponentielle Abhängigkeit des Sättigungsdruckes von der Temperatur ist augenscheinlich. Die Werte im Temperaturbereich  $340K < T < 400K$  unterscheiden sich stark. Die Kurven von  $p_{sat,1}$  und  $p_{sat,2}$  schneiden sich bei Temperaturen knapp über 400K. Für die durchgeführten Simulationen wurde die Formulierung des Sättigungsdruckes  $p_{sat,1}$  (Gleichung 3.10) verwendet. Der Ausdruck für  $p_{sat,1}$  wird im Folgenden durch  $p_s$  referenziert werden.

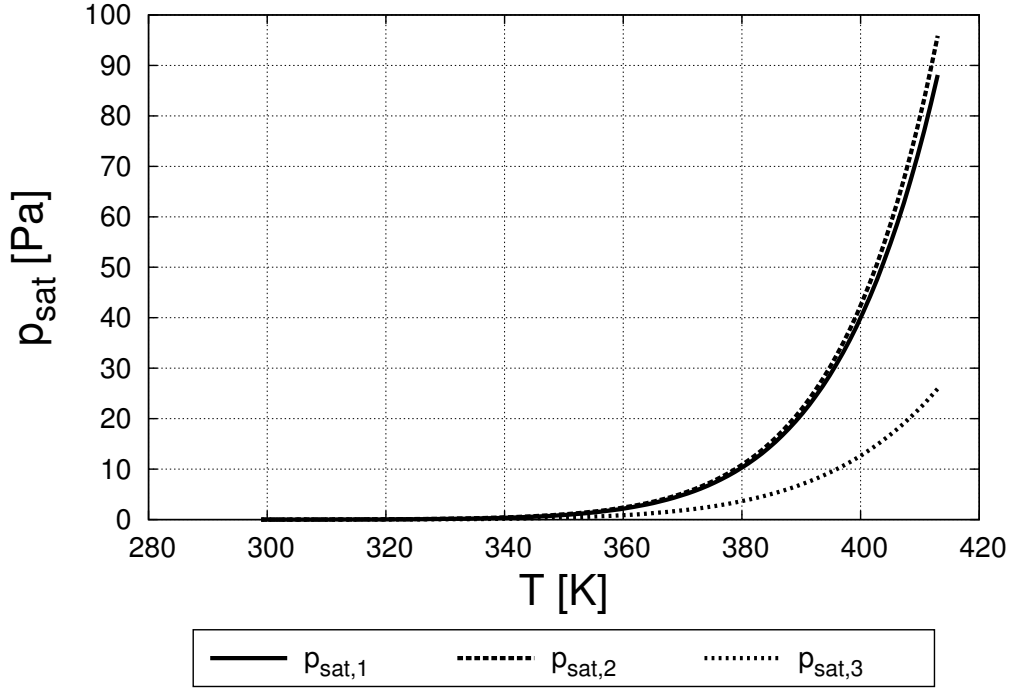


Abbildung 3.1: Sättigungsdrücke in Pascal über der Temperatur

Der Sättigungsdruck wird zur Formulierung der Sättigung  $S = p_{DBP}/p_s$  genutzt [153]. Wie bereits beschrieben, ist die Oberflächenspannung eine entscheidende Größe für den Phasenübergang. Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete Formulierung nach [13] ist

$$\sigma = (33,93 - 0,0894 \cdot (T - 293,15)) \cdot 10^{-3} \left[ \frac{N}{m} \right]. \quad (3.13)$$

Die Simulationsergebnisse von Mastorakos [41] zeigten im Vergleich zu experimentellen Daten zu niedrige Nukleationsraten. Um die Nukleationsrate anzuheben und das Maximum stromauf zu verschieben, modifizierte er die Oberflächenspannung. Er verwendete hierbei drei modifizierte Versionen von Gleichung 3.13. Die modifizierten Oberflächenspannungen seien mit  $\sigma_{M1}$ ,  $\sigma_{M2}$  und  $\sigma_{M3}$  bezeichnet. Der Effekt der unterschiedlichen Oberflächenspannung wird in Abschnitt 7.5 untersucht. Eine leichte Änderung zur Formulierung aus Gleichung 3.13 ist durch

$$\sigma_{M1} = 0,86 \cdot (35,3 - 0,0863 \cdot (T - 273)) \cdot 10^{-3} \left[ \frac{N}{m} \right] \quad (3.14)$$

gegeben. Die zweite modifizierte Oberflächenspannung wird nach

$$\sigma_{M2} = 1,04 \cdot (35,3 - 0,2 \cdot (T - 273)) \cdot 10^{-3} \left[ \frac{N}{m} \right] \quad (3.15)$$

berechnet. Die dritte modifizierte Formulierung der Oberflächenspannung ist

$$\sigma_{M3} = 1,10 \cdot (35,3 - 0,22 \cdot (T - 273)) \cdot 10^{-3} \left[ \frac{N}{m} \right]. \quad (3.16)$$

In Abbildung 3.2 sind die Oberflächenspannungen über der Temperatur, im für diese Arbeit relevanten Bereich, aufgetragen. Die Oberflächenspannungen  $\sigma_{Mi}$  liegen unter dem Verlauf von  $\sigma$ . Die erste Modifikation  $\sigma_{M1}$  läuft nahezu parallel zu  $\sigma$ . Alle modifizierten Oberflächenspannungen haben unterschiedliche Steigungen und schneiden sich im Bereich  $320 < T < 340$ .

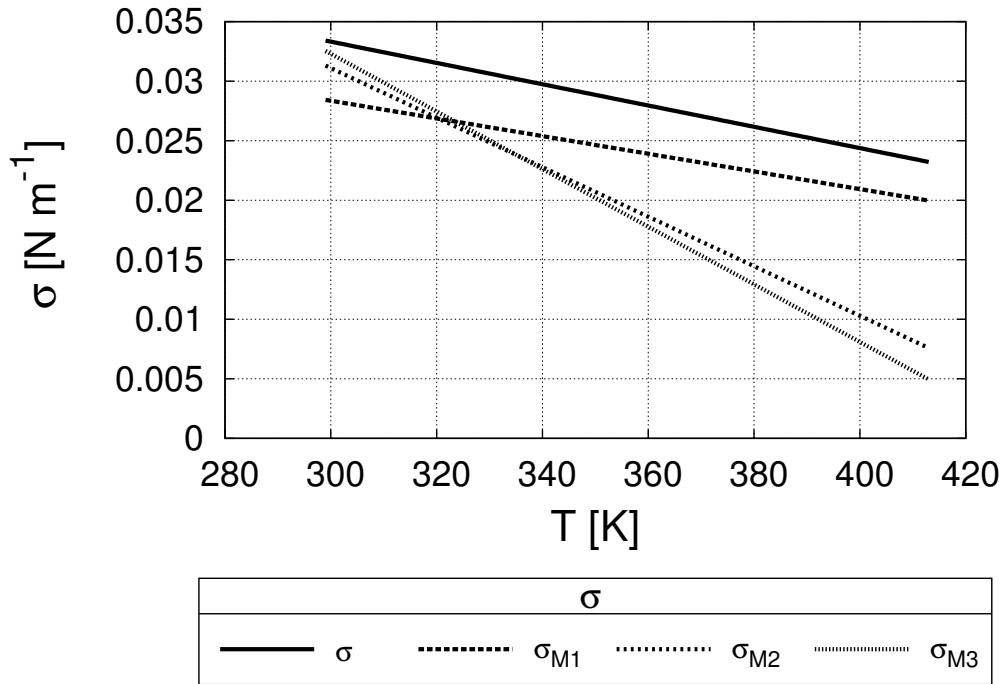


Abbildung 3.2: Oberflächenspannungen über dem Mischungsbruch

Die Rate der homogenen Nukleation  $B[\frac{\#}{m^3s}]$  kann durch

$$B(S, \sigma, T) = \frac{N_a^2 v_m}{S} \left( \frac{2\sigma}{\pi m_{m,DBP}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( -\frac{16\pi\sigma^3 m_{m,DBP}^2}{3(k_b T)^3 \rho_l^2 (\ln(S))^2} \right) \exp \left( \frac{s_{mon}\sigma}{k_b T} \right) \quad (3.17)$$

berechnet werden [45]. Man beachte die Nichtlinearität der Abhängigkeiten. Die Größen  $v_m$  und  $s_{mon}$  stehen für das molare Volumen und die molare Oberfläche von DBP. Die molare Oberfläche wird aus dem molaren Volumen berechnet. Hierzu wird eine Kugelform angenommen. Die Flüssigkeitsdichte kann nach  $\rho_{fl} = 1049,2 - 0,67 \cdot (T - 293,15) [\frac{kg}{m^3}]$  berechnet werden [13] und verknüpft das molekulare Volumen über  $v_m = m/\rho_{fl}$  mit der molekularen Masse  $m_{m,DBP}$  des DBP, welche aus  $m_{m,DBP} = M_{DBP}/N_a$  berechnet werden kann.  $M_{DBP}$  ist die molare Masse von DBP und  $N_a$  die Avogadro-Konstante. Die Rate der homogenen Nukleation wurde im Rahmen



der „self consistent theory“ durch den Term  $\exp\left(\frac{s_{mon}\sigma}{kT}\right)$  erweitert. Die klassische Nukleationstheorie ( $B_k$ ) führt zu

$$B_k(S, \sigma, T) = N_a^2 v_m \left( \frac{2\sigma}{\pi m_{m,DBP}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left( -\frac{16\pi\sigma^3 m_{m,DBP}^2}{3(k_b T)^3 \rho_l^2 (\ln(S))^2} \right) \quad (3.18)$$

als Ausdruck für die Nukleationsrate [36]. In der Fachliteratur finden sich Berichte für sechs bis neun Größenordnungen zu niedrige Nukleationsraten durch die Verwendung von Gleichung 3.18 für DBP [48]. Bei Vernachlässigung der Phasenübergangswärme und des Massenverlustes des kondensierten DBP aus der Gasphase sind die Temperatur und der Massenbruch des DBP linear vom Mischungsbruch abhängig. Der Mischungsbruch ist ein passiver Skalar, der im Jet zu Eins und im Hüllstrom zu Null gesetzt wird. Es gilt  $Z = \frac{\Phi - \Phi_{min}}{\Phi_{max} - \Phi_{min}}$  im Falle eines erhaltenen Skalares  $\Phi$  mit Maximalwert im Jet und Minimalwert im Hüllstrom. In Abbildung 3.3 ist die Nukleationsrate (nach Gleichung 3.17 und 3.18) über dem Mischungsbruch zu betrachten. Die verwendeten Randbedingungen sind  $X_{dbp,max} = 3,6 \cdot 10^{-4}$ ,  $X_{dbp,min} = 0$ ,  $T_{max} = 413K$  und  $T_{min} = 299K$ . Der Maximalwert der Nukleationsrate beträgt  $B_{max} = 8,94 \cdot 10^{12}$  bei  $Z \approx 0,12$ . Die Abbildung verdeutlicht die Abhängigkeit von den zugrunde liegenden Skalaren und zeigt die begrenzte Region mit signifikanten Nukleationsraten ( $B(Z) > 0,5B_{max}$  für  $0,1 < Z < 0,17$ ). Die unterschiedlichen Formulierungen der Nukleationsrate führen zu Werten mit mehreren Größenordnungen Unterschied. Die modifizierte Nukleationsrate nach Gleichung 3.17 führt zudem zu einer Verschiebung der Kurve zu niedrigeren Mischungsbrüchen. Um die leicht unterschiedliche Sensitivität der Sättigung vom Mischungsbruch zu zeigen, wurde zusätzlich zur Nukleationsrate die Sättigung über dem Mischungsbruch eingetragen und mit dem Maximalwert  $S_{max} = 292,35$  normalisiert.

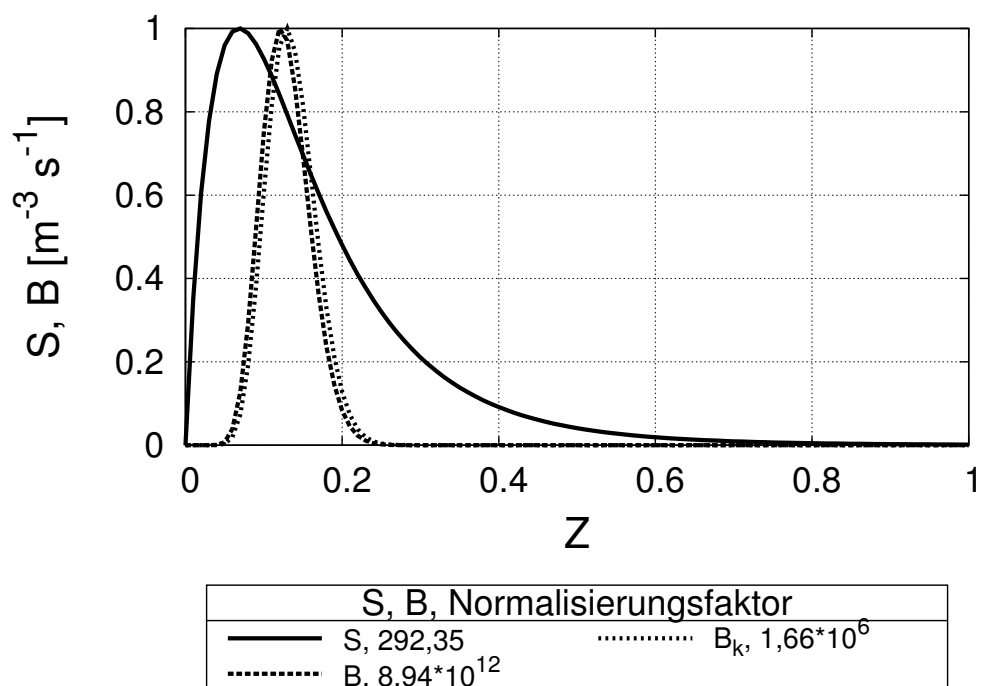


Abbildung 3.3: Normierte Sättigung und Nukleationsraten über dem Mischungsbruch für  $X_{dbp} = 3,6 \cdot 10^{-4} (\equiv Z = 1)$

Die Größe der gebildeten Tropfen hängt von den Umgebungsbedingungen ab. Der kritische Durchmesser  $d_{krit}$  wird für  $S > 1$  mit

$$d_{krit} = \frac{4\sigma v_m}{kT \ln(S)} \quad (3.19)$$

berechnet [45]. In Abbildung 3.4 ist  $d_{krit}$  über dem Mischungsbruch im für die Nukleationsrate relevanten Bereich aufgetragen. (Es wurden die für die Nukleationsrate spezifizierten Randbedingungen für  $X_{dbp}$  und T verwendet.) Die gebildeten Tropfen liegen im Bereich  $2,3 \cdot 10^{-9} < d_{krit} < 3 \cdot 10^{-9}$  [m].

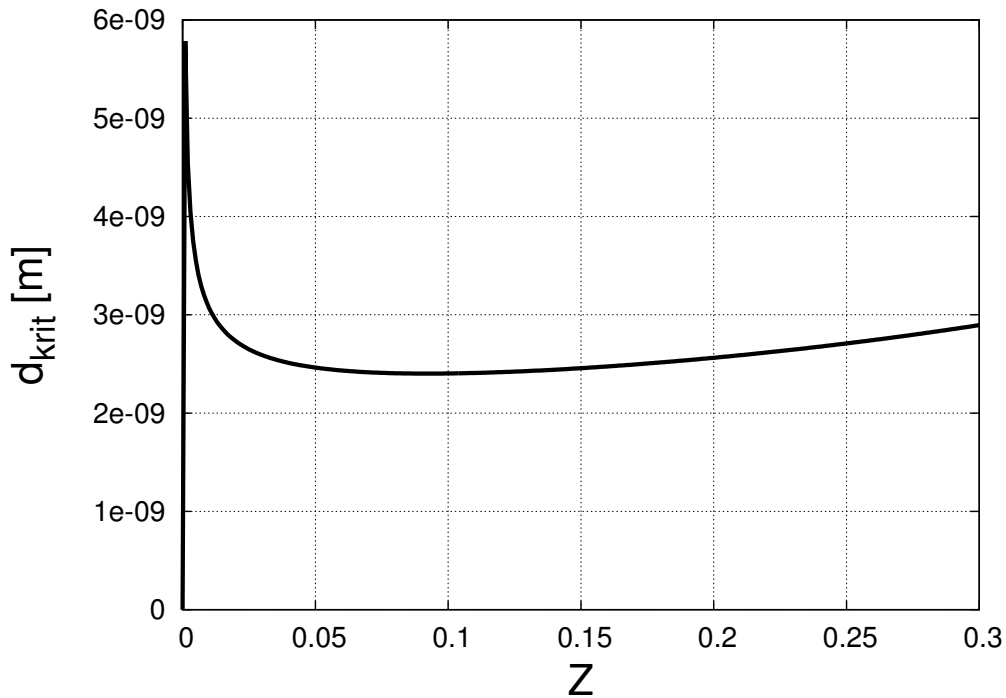


Abbildung 3.4: Kritischer Durchmesser  $d_{krit}$  über dem Mischungsbruch für  $X_{dbp} = 3,6 \cdot 10^{-4} (\equiv Z = 1)$

In Abbildung 3.5 sind die Nukleationsraten bei Verwendung der unterschiedlichen Formulierungen für die Oberflächenspannung über dem Mischungsbruch aufgetragen. Mit sinkender Oberflächenspannung verschiebt sich der Peak der Nukleationsrate zu höheren Massenbrüchen. Für einen Jet entspricht dies einer Verschiebung hin zur Düse. Der Peak der Nukleationsrate bei Verwendung von  $\sigma_{M1}$  ist um sieben Größenordnungen höher als die maximale Nukleationsrate unter Verwendung von  $\sigma$ . Die Ausdrücke  $\sigma_{M2}$  und  $\sigma_{M3}$  führen zu Nukleationsraten, die um sechs Größenordnungen im Maximum über der Nukleationsrate unter Verwendung von  $\sigma$  liegen.

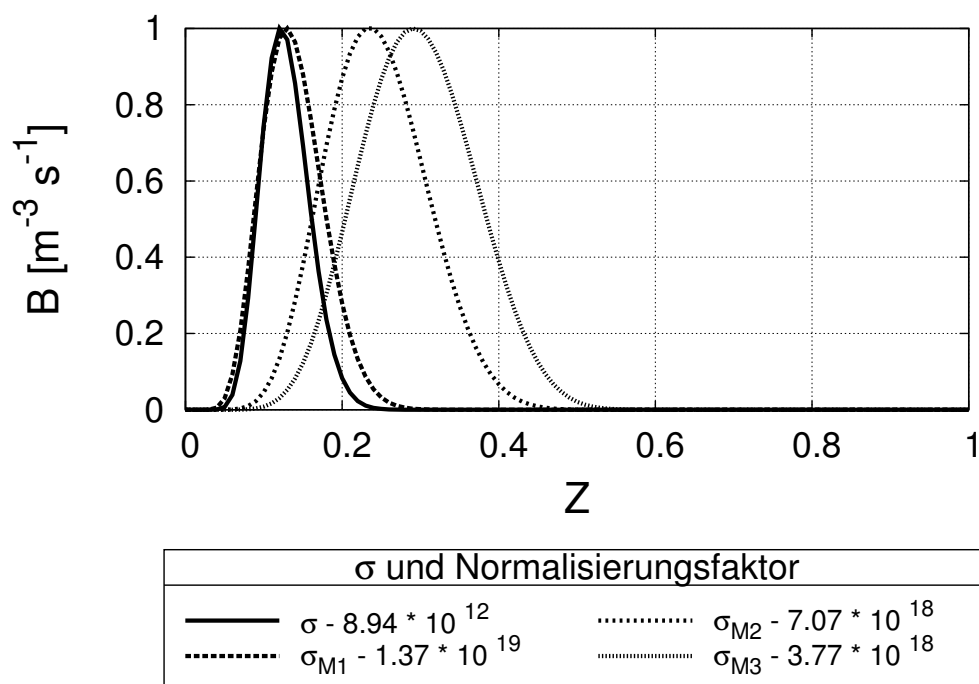


Abbildung 3.5: Nukleationsraten für verschiedene Oberflächenspannungen über dem Mischungsbruch für  $X_{dbp,max} = 3,6 \cdot 10^{-4} (\equiv Z = 1)$

In Abbildung 3.6 sind die Nukleationsraten bei Verwendung von  $\sigma$  und den unterschiedlichen Formulierungen für den Sättigungsdruck aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass sich das Maximum der Nukleationsrate bei Verwendung von  $p_{s,1}$ ,  $p_{s,2}$  und  $p_{s,3}$  mit steigendem Index des Sättigungsdruckes kontinuierlich zu höheren  $Z$  (stromauf) verschiebt. Der Maximalwert steigt jeweils um zwei Größenordnungen an. Dies ist durch den jeweils niedrigeren Verlauf des Sättigungsdruckes zu erklären, da dies zu jeweils höheren Werten der Sättigung führt (siehe Abbildung 3.1).

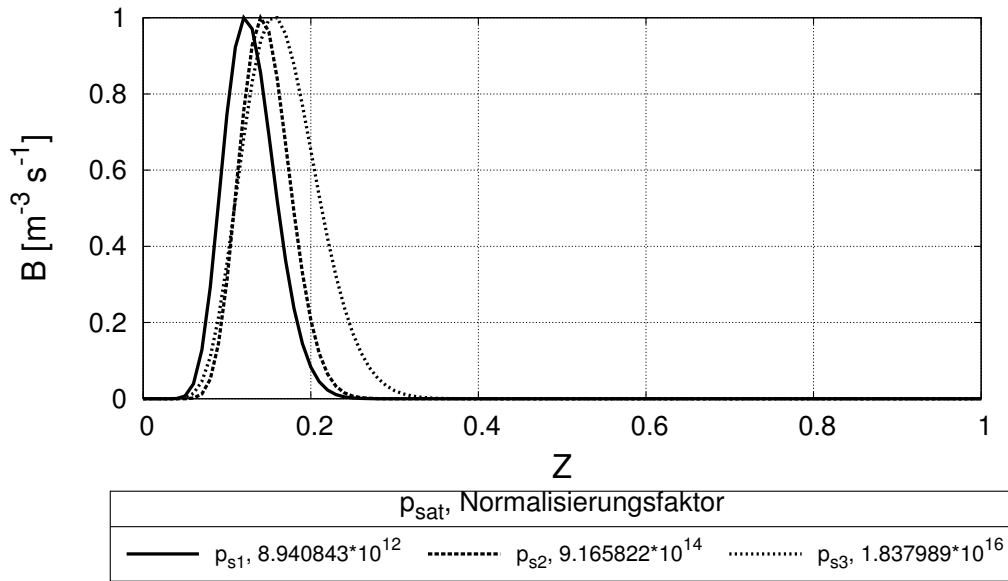


Abbildung 3.6: Normierte Nukleationsraten für verschiedene Sättigungsdrücke über dem Mischungsbruch für  $X_{dbp,max} = 3,6 \cdot 10^{-4} (\equiv Z = 1)$

### 3.4 Modellierung der Kondensation

Die Kondensation beschreibt das Wachstum von Tropfen durch Anlagerung von Molekülen aus der Gasphase. Die Beschreibung dieses diffusiven Prozesses hängt von der Dichte des Gases ab. Die Charakterisierung kann mittels der Knudsenzahl  $Kn$  geschehen, welche sich aus der mittleren, freien Weglänge  $\lambda$  und dem Tropfendurchmesser  $d_p$  nach  $Kn = \frac{2 \cdot \lambda}{d_p}$  berechnet [117]. Für  $Kn \gg 1$  gilt der Bereich der Molekularströmungen, für  $Kn \ll 1$  gilt der Bereich der Kontinuumsmechanik. Hierbei ist das Verhältnis von Tropfengröße zu freier Weglänge der Gasmoleküle des kondensierenden Stoffes relevant. Die Knudsenzahl wird daher mit dem Tropfendurchmesser gebildet. Die Kondensationsrate  $G_{d_p}$  in [m/s] wird für  $S > 1$  mit der Formel

$$G_{d_p} = \alpha(Kn) \cdot \frac{4 \cdot D \cdot v_m \cdot p_s}{k \cdot T \cdot d_p} (S - 1) \quad (3.20)$$

berechnet. Die Kondensationsrate ist mit einer Funktion

$$\alpha(Kn) = \frac{1 + Kn}{1 + 1,71 \cdot Kn + 1,333 \cdot Kn^2} \quad (3.21)$$

versehen, welche die Gültigkeit in allen Strömungsbereichen gewährleistet und eine Mischung aus der Formulierung der Kondensationsrate für den gaskinetischen und kontinuumsmechanischen Bereich herstellt [56]. Die Diffusivität für DBP in Luft

wird mittels

$$D = 0,25 \cdot \frac{T^{1,75}}{p} \quad (3.22)$$

berechnet [38]. In Abbildung 3.7 ist die Kondensationsrate über dem Mischungsbruch für  $X_{DBP} = 3,6 \cdot 10^{-4}$  und  $d_p = 2,66 \cdot 10^{-9}[m]$  aufgetragen. Die Sensitivität bezüglich des Mischungsbruches ist gänzlich anderer Natur als die der homogenen Nukleation. Über den Bereich von  $0 < Z < 0,85$  sind signifikante Kondensationsraten zu beobachten. Das Maximum der Kondensationsrate beträgt  $G_{d_p,max} = 1,5 \cdot 10^{-4}$  und liegt bei  $Z \approx 0,6$ .

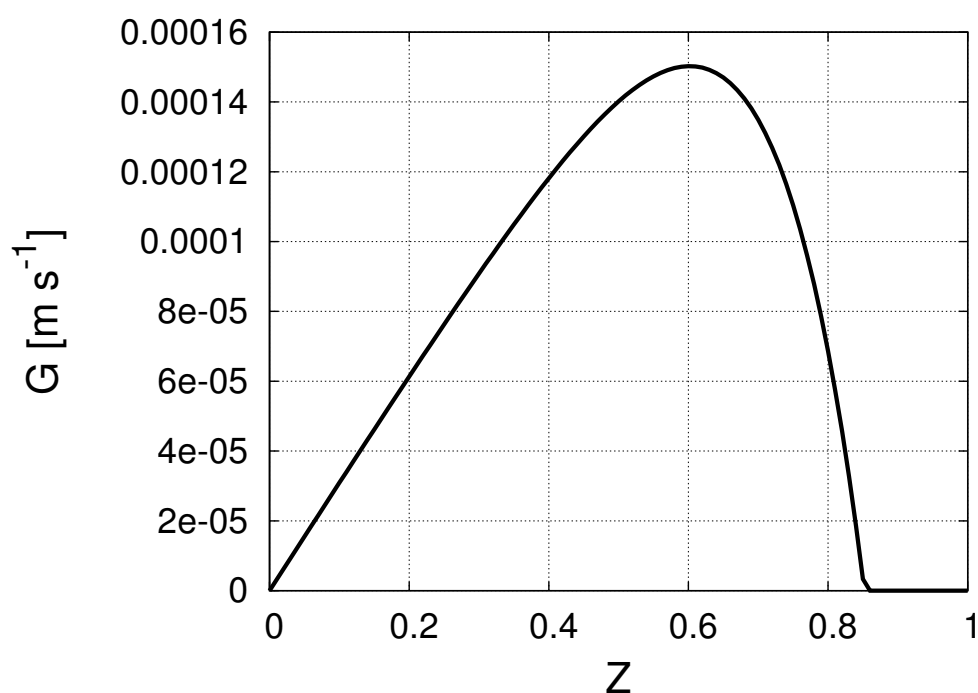


Abbildung 3.7: Kondensationsrate der ersten Sektion über dem Mischungsbruch für  $X_{dbp} = 3,6 \cdot 10^{-4}$

### 3.5 Modellierung der Phasenübergangswärme

Die Berechnung der durch den Phasenübergang frei gewordenen Bindungsenergie für DBP [J/g] kann nach

$$\Delta E_b = 284,3 \cdot \frac{1 - \frac{T}{T_{krit}}}{1 - \frac{T_b}{T_{krit}}} \quad (3.23)$$

erfolgen [127]. In der Literatur finden sich für DBP mehrere Referenzwerte für die kritische Temperatur  $T_{krit}$  und die Siedetemperatur  $T_s$ . Eine Übersicht ist in Ta-

belle 3.1 gegeben. Der aktuellste Wert ( $T_{krit,1}$ ) für die kritische Temperatur ist der DIPPR-Datenbank [28] entnommen und wird zur Berechnung von  $\Delta E_b$  bei den durchgeführten Simulationen verwendet. In Abbildung 3.8 ist die abgegebene Ener-

Größe	Wert	Quelle
$T_{krit,1}$	781	[28]
$T_{krit,2}$	782	[126]
$T_{krit,3}$	823	[55]
$T_s$	608	[126]

Tabelle 3.1:  $T_{krit}$  und  $T_b$  aus versch. Quellen

gie pro Gramm kondensierter Masse für unterschiedliche  $T_{krit}$  aus Tabelle 3.1 über der Temperatur aufgetragen. Die Kurven verlaufen nahezu parallel, die Energieabgabe unterscheidet sich jedoch um bis zu 25 J/g beim Vergleich von  $T_{krit,1}$  und  $T_{krit,3}$ . Eine Übersicht über weitere Stoffeigenschaften und Kenngrößen von DBP kann in [160] gefunden werden.

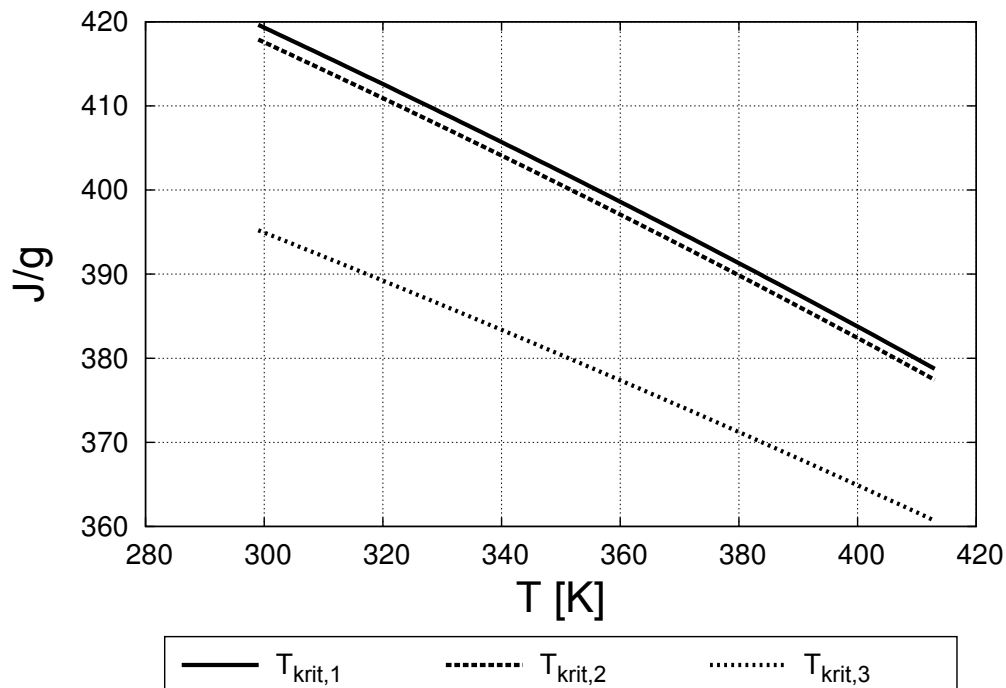


Abbildung 3.8: Phasenübergangswärme in J/g über der Temperatur für versch. Parameter

### 3.6 Modellierung des turbulenten Mischens

Das turbulente Mischen beschreibt Diffusionsvorgänge, welche auf kleinskaliger Ebene stattfinden. Im Allgemeinen können diese Skalen nicht aufgelöst werden. Zudem

stellt die Ein-Punkt-WDF keine Längenskalen bereit, daher muss die molekulare und turbulente Diffusion modelliert werden [106, 113]. In Strömungen mit hohen Reynolds-Zahlen wird die Mischungsrate durch skalare Gradienten aufgrund turbulenter, kleinskaliger Fluktuationen bestimmt und die molekulare Mischung tritt in den Hintergrund [87], [90]. Im Rahmen der Forschung von Verbrennungsvorgängen betonen Cao et al. [18] die Wichtigkeit des Mischungsmodells für die akkurate Berechnung der Verbrennungsvorgänge unter Verwendung von PDF-Modellen. Die nichtlineare Abhängigkeit der Reaktionsraten führt zu einer hohen Sensitivität des Verbrennungsvorgangs von der zugrunde liegenden Skalarverteilung. Die Nukleationsrate weist ebenfalls eine solch hohe Sensitivität auf. Die Charakteristika der molekularen und turbulenten Diffusion führen zu Kriterien für die Eigenschaften der zur Schließung verwendeten Mischungsmodelle [86]. Hierzu gehören unter anderem die Massenerhaltung, die Lokalisierung und das Verhalten des Varianzzerfalls [140]. Im Rahmen dieser Arbeit wurden das „Interaction by Exchange with the Mean“-Mischungsmodell von Villermaux et al. [151] und eine modifizierte Variante des „Coalescence and Dispersion“-Mischungsmodell von Janicka et al. [57] verwendet. Fortan werden die Mischungsmodelle mit IEM-Mischungsmodell und MCD-Mischungsmodell referenziert. Die verwendeten Mischungsmodelle, die in Abschnitt 3.2 durch den Mischungsoperator  $M(\vec{x}, \Phi_i)$  symbolisiert wurden, stellen den turbulenten Mischvorgang dar und werden auf alle Skalare  $\Phi$  angewendet, die von den MC-Partikeln transportiert werden. Da der Mischvorgang immer für die MC-Partikel in einer LES-Zelle durchgeführt wird, stellt diese räumliche Begrenzung eine Lokalisierung des Mischvorgangs dar.

In der Literatur finden sich weitere Mischungsmodelle, welche nicht Gegenstand dieser Arbeit sind, aber an dieser Stelle noch erwähnt werden sollen. Pope entwickelte mit Gao das „Mapping Closure“-Modell (MC), hierbei wird das Mischungsverhalten eines Referenzfeldes auf das betrachtete Problem abgebildet [114, 112]. Pope entwickelte mit Subramaniam das MC-Modell weiter. Die Lokalisierung im Referenzraum wurde von einer Referenzdimension auf einen „Euclidean-Minimum-Spanning-Tree“ für mehrere Dimensionen erweitert und daher „Euclidean-Minimum-Spanning-Tree“-Modell (EMST) genannt [139]. Meyer und Jenny entwickelten das „Parameterized-Scala-Profile“-Modell (PSP). Bei diesem Modell wird der Mischvorgang entsprechend dem eines eindimensionalen, parametrisierten Skalarprofils („Parameterized-Scalar-Profile“) durchgeführt [89, 91, 92, 88]. Das „Lagrangian-Fokker-Planck“-Modell wurde 2003 von Fox entwickelt und basiert auf einer statistischen Behandlung des Mischvorgangs [120].

### 3.6.0.1 IEM-Mischungsmodell

Das IEM-Mischungsmodell relaxiert die Skalarwerte aller MC-Partikel in einer LES-Zelle zum jeweiligen gewichteten Mittelwert. Das IEM-Mischungsmodell ist auch bekannt als „Linear Mean-Square Estimate“-Modell von Dopazo und O’Brien [29]. Die Berechnung des gewichteten Mittelwertes  $\bar{\Phi}$  des Skalars  $\Phi$  ist in Abschnitt 4.1.1



beschrieben. Der neue Wert eines Skalars  $\Phi^*$  wird nach

$$\Phi_i^* = \bar{\Phi} + (\Phi_i - \bar{\Phi}) \cdot \exp\left(-\frac{C_\phi \cdot \Delta t}{\tau_{mix}}\right) \quad (3.24)$$

berechnet. Die Mischungszeit kann nach  $\tau_m = \frac{2\Delta^2}{D_{eff}}$  berechnet werden [121].  $\Delta$  ist eine charakteristische LES-Zell-Länge und  $D_{eff} = \frac{D}{Sc} + \frac{D_t}{Sc_t}$  die effektive Diffusivität [117]. Die Diffusivität  $D$  wird nach  $D = \frac{\nu}{Pr}$  berechnet, die turbulente Diffusivität nach  $D_t = \frac{\nu_t}{Pr_t}$ . Die kinematische Viskosität  $\nu$  steht mit der dynamischen Viskosität  $\mu$  in folgendem Zusammenhang  $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ . Für die Prandtl-Zahl wurde  $Pr = 0,7$  und für die turbulente Prandtl-Zahl  $Pr_t = 1$  gewählt. Für die Konstante  $C_\phi$  wurde der Wert zwei verwendet. Der Effekt unterschiedlicher Werte von  $C_\phi$  kann in [18] betrachtet werden.

### 3.6.0.2 MCD-Mischungsmodell

Für die Umsetzung des MCD-Mischungsmodells wurde das „Coalescence and Dispersion“ (CD)-Mischungsmodell von Janicka et al. [57] für gewichtete Partikel angepasst. Die Gewichte der Partikel werden bei der Injektion zugewiesen, so dass die Masse aller Partikel in der Rechendomain der LES-Masse entspricht (siehe Abschnitt 4.1.2). Für die zufällig ausgewählten Partikel  $p$  und  $q$  in einer LES-Zelle mit den Gewichten  $w_p$  und  $w_q$  wird der neue Skalarwert des Partikels  $p$   $\Phi_p^*$  nach

$$\Phi_{pq}^* = \frac{1}{w_p + w_q} \cdot (w_p \cdot \Phi_q + w_q \cdot \Phi_p) \quad (3.25)$$

berechnet. Der Vorgang wird auf alle MC-Partikel in einer LES-Zelle in jedem Zeitschritt angewendet. Die Mischungswahrscheinlichkeit wird mittels

$$P_{mix} = \frac{w_p + w_q}{2 \cdot W} \cdot N_{Zelle} \cdot \Delta t \cdot \omega_\phi \quad (3.26)$$

berechnet (nach [100]).  $W$  stellt die Summe der Gewichte aller  $N_{Zelle}$  Partikel in einer LES-Zelle dar. Für die skalare Varianz-Zerfall-Rate  $\omega_\phi$  wurde das Inverse der Mischungszeit  $\tau$  verwendet.



## 4 Numerische Umsetzung

Die numerische Umsetzung basiert auf dem Softwarepaket OpenFOAM 2.1.x. Der LES-Löser entspricht „reactingFoam“ und kann somit aufgrund der unterschiedlichen Temperaturen im Jet und Hüllstrom die Dichteunterschiede bei der Berechnung des Strömungsfeldes berücksichtigen. Details können der Internetpräsenz von OpenFOAM entnommen werden ([www.openfoam.org](http://www.openfoam.org)). Es wurden bestehende „cloud-“ und „particle-“Klassen erweitert, um die gewünschte Funktionalität bereitstellen zu können. Die in c++ bestehende Funktionalität der Vererbung mittels Template-Klassen ermöglicht es, die grundlegenden Funktionen, z. B. des IO, zu übernehmen [3], [39]. Die projektspezifische Funktionalität wurde ergänzt. Hierzu gehören die Funktionen für das MC-Partikel-Management, die homogene Nukleation, die Kondensation, die räumliche und zeitliche gewichtete Mittelung sowie das turbulente Mischen. In diesem Kapitel werden die wichtigsten Aspekte der numerischen Umsetzung dargelegt. Die LES stellt das Geschwindigkeitsfeld und die turbulente Viskosität für die Bewegung der MC-Partikel bereit. Zunächst werden daher in jedem Zeitschritt die hierfür erforderlichen Erhaltungsgleichungen (siehe Abschnitt 3) gelöst. Anschließend werden die Routinen der MC-Partikel abgearbeitet. Diese sind im Flussdiagramm 4.1 aufgeführt. Um zeitliche und räumliche Mittelwerte zu erhalten, werden aus den MC-Partikel-Daten gefilterte, instantane LES-Zellwerte berechnet. Die anschließende, zeitliche Mittelung, unter Berücksichtigung der Gewichte, führt zu den Datensätzen, die für die Auswertung benötigt werden (siehe Abschnitt 4.1.1).

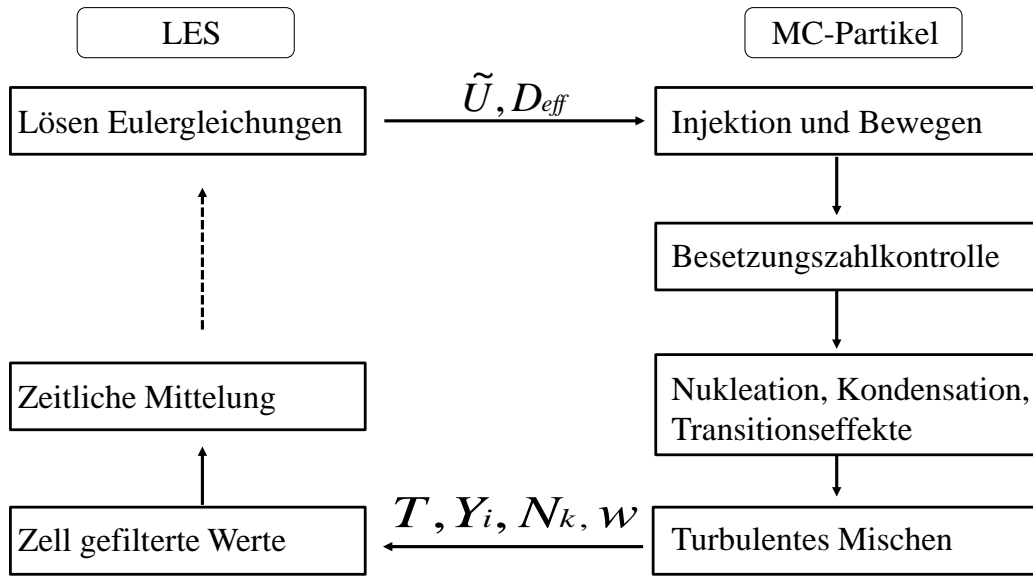


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Programmablaufes und der Datenübergabe

Die Stokes-Zahl  $St = \frac{\tau_p}{\tau_s}$  beschreibt das Verhalten von Partikeln in Strömungen und setzt sich aus dem Verhältnis einer charakteristischen Zeit für das Partikel  $\tau_p$  und dem Strömungsfeld  $\tau_s$  zusammen [24]. Für  $St \ll 1$  folgen die Partikel dem Strömungsfeld. Die charakteristische Zeit für das Strömungsfeld kann mittels des Düsendurchmessers  $D$  und der Jetgeschwindigkeit  $u_{jet}$  gebildet werden. Es ergibt sich  $\tau_s = \frac{D}{u_{jet}} = \frac{0,00235}{51,55} = 4,5587 \cdot 10^{-5} s$ . Die charakteristische Zeit für die Partikel im Strömungsfeld lässt sich nach  $\tau_p = \rho \left(1 + \frac{C_m}{\alpha_d}\right) \frac{d^2}{18} \mu_{eff} f_t [s]$  berechnen [77]. Das Dichteverhältnis von Flüssigkeit zu Gas wird mit  $\alpha_d = \frac{\rho_l}{\rho}$  beschrieben. Der Verdrängungskoeffizient  $C_m = V_p \rho$  steht für die vom Tropfen verdrängte Masse, welche sich aus dem Partikelvolumen  $V_p$  und der Fluidichte  $\rho$  berechnen lässt. Die maximale Tropfengeschwindigkeit wird durch  $f_t = \frac{C_d Re}{24}$  beschrieben. In Tabelle 4.1 sind die Maximal- und Minimalwerte aller zur Berechnung nötigen Größen aufgeführt. Für den Widerstandskoeffizienten  $C_d$  wurden die Werte eines stromlinienförmigen Körpers und einer perfekten Kugel als Extremwerte verwendet [65]. Die weiteren Werte oberhalb des ersten Doppelstriches der Tabelle wurden der Simulation entnommen. Die Abschätzung mit minimal und maximal möglichen Werten ergibt eine Maximale Stokes-Zahl von  $St_{max} = 7,18 \cdot 10^{-8}$ , daher wurde keine Koppelung der gebildeten Tropfen an das Strömungsfeld der LES vorgenommen.

Tabelle 4.1: Größen zur Bestimmung der Stokes-Zahl

Größe	Wert
$d_p$	$2 \cdot 10^{-9} < d_p < 7,82 \cdot 10^{-6}$
$V_p$	$4,19 \cdot 10^{-27} < V_p < 2,50 \cdot 10^{-16}$
$\rho$	$0,82 < \rho < 1,18$
$\mu_{eff}$	$1,84 \cdot 10^{-5} < \mu_{eff} < 1,66 \cdot 10^{-4}$
$\nu_{eff}$	$1,57 \cdot 10^{-5} < \nu_{eff} < 1,66 \cdot 10^{-4}$
$\rho_l$	$980,2 < \rho_l < 1045,27$
$ \vec{u} $	$0,0047 <  \vec{u}  < 56,82$
$C_d$	$0,04 < C_d < 0,47$
$Re$	$5,66 \cdot 10^{-8} < Re < 283$
$C_m$	$3,44 \cdot 10^{-27} < C_m < 2,95 \cdot 10^{-16}$
$\alpha_d$	$830,68 < \alpha_d < 1274,72$
$\tau_p$	$3,78 \cdot 10^{-34} < \tau_p < 3,27 \cdot 10^{-12}$
$St$	$8,32 \cdot 10^{-27} < St < 7,18 \cdot 10^{-8}$

Im Softwarepaket OpenFOAM 2.1.x ist das dynamische Smagorinsky-Modell nach Lilly [72] nicht enthalten, daher wurde dieses nachträglich hinzugefügt. Die verwendete Implementierung wurde von Passalacqua erstellt und steht auf seiner Internetpräsenz (<http://www.albertopassalacqua.com>) zum Download zur Verfügung. Zudem wurde „reactingFoam“ nach der „low mach“-Annahme modifiziert [65]. Für eine numerisch effiziente Umsetzung des Konzeptes wurde zudem ein neuer Datentyp kreiert, welcher 30 oder mehr „doubles“ speichern kann und mit Hilfe des Templatekonzepts mit den von OpenFOAM bereit gestellten IO-Kapazitäten verknüpft werden kann. Details können dem Anhang 11.2 entnommen werden.

## 4.1 Montecarlo-Partikel

Die MC-Partikel haben eine stochastische Natur und sind als einzelne Realisierung ohne physikalische Bedeutung. Die MC-Partikel dienen als Informationsträger und Stützstellen des Lagrangen Rechengitters und transportieren die Informationen einer Realisierung des Systems. Um die Anforderungen dieser Arbeit erfüllen zu können, werden auf dem MC-Partikel eine Vielzahl von Informationen mit Hilfe des Datentyps „double“, 8 Byte Datenmenge und einem Wertebereich von  $\pm 1,7 \cdot 10^{308}$  [15], gespeichert. Diese repräsentieren die Werte intensiver und extensiver physikalisch relevanter Größen. Der Datentyp „double“ wurde verwendet um auch kleinste Änderungen, z. B. der Tropfendichte, möglichst genau erfassen zu können. In Tabelle 4.2 ist ein Überblick über die wichtigsten Skalare für die in diesem Kapitel beschriebenen Operationen und die Datenanalyse gegeben.

Tabelle 4.2: Skalare der MC-Partikel

	Symbol	Beschreibung	Einheit
	T	Temperatur	[K]
intensiv	Z	Mischungsbruch	[-]
	$Y_{DBP}$	Massenbruch	[kg/kg]
	$Y_{N_2}$	Massenbruch	[kg/kg]
	$Y_{O_2}$	Massenbruch	[kg/kg]
	$N_k$	Besetzungszahl	[Anzahl/m <sup>3</sup> ]
extensiv	w	Gewicht	[kg]

### 4.1.1 Räumliche und zeitliche Mittelung

Um physikalisch relevante Ergebnisse zu erhalten, müssen die einzelnen Realisierungen der MC-Partikel zeitlich und räumlich gemittelt werden. Hierfür wird das LES-Rechengitter zur Hilfe genommen. Es sei nun  $\sum_l$  die Summe über alle l MC-Partikel einer Zelle und  $\sum_m$  die Summe aller Zeitschritte  $\Delta t$  mit  $t_m = \sum_m \Delta t$ . Der gewichtete, instantane Mittelwert aller MC-Partikel in einer LES-Zelle berechnet sich für den Skalar  $\Phi$  nach  $\tilde{\Phi} = \frac{\sum_l (\Phi_l \cdot w_l)}{\sum_l (w_l)}$  [16]. Die zeitliche Mittelung aller instantanen, räumlichen Mittelwerte auf dem LES-Rechengitter erfolgt mittels der Formel  $\langle \tilde{\Phi} \rangle^{t+\Delta t} = (1 - \alpha) \cdot \langle \tilde{\Phi} \rangle^t + \alpha \cdot \tilde{\Phi}^{t+\Delta t}$  mit  $\alpha = \frac{\sum_l w_l^{t_m+\Delta t}}{\sum_m \sum_l w_l^{t_m}}$  [37].

### 4.1.2 Injektion, Bewegung und Randbedingungen

Um immer ausreichend, aber dennoch nicht unnötig viele MC-Partikel zur Verfügung zu haben, wird die MC-Partikel-Injektion über die Co-Zahl oder durch Abfrage der MC-Partikel-Anzahl in den zur Einströmung gehörenden Zellen gesteuert. Da im noch nicht aufgebrochenen Jet die Courant-Zahl am höchsten ist ( $Co \approx 1$ ), werden in der ersten Zelle über der Einlassdüse in jedem Zeitschritt  $N_{MC,z}$  Instanzen der MC-Partikel-Klasse mit Zufallspositionen in der Zelle über der Einlassdüse erstellt. Die MC-Partikel-Zahl pro LES-Zelle kann zur Laufzeit festgelegt werden und muss  $N_{MC,min} < N_{MC,z} < N_{MC,max}$  genügen. Die Werte für die Temperatur und Massenbrüche werden entsprechend den Spezifizierungen in Abschnitt 6.1 zugewiesen. Die Masse jedes MC-Partikels wird nach  $w = \frac{\rho \cdot u \cdot A \cdot \Delta t}{N_{MC,in}}$  berechnet und stellt die Konsistenz zwischen LES-Masse und MC-Partikel-Masse her. A ist die Fläche der Zelle normal zur Geschwindigkeit. Für den Hüllstrom und die Seiten wird die eingeflossene LES-Masse für jede Zellfläche aufgesammelt, bis die zur Zellfläche gehörende Zelle mit der MC-Partikel-Anzahl auf die voreingestellte Untergrenze gefallen ist. Da die Anzahl der MC-Partikel pro LES-Zelle vorgegeben ist und der Hüllstrom mit deutlich größeren LES-Zellen vernetzt ist, bekommt ein MC-Partikel, welches dem Hüllstrom entstammt eine deutlich höhere Masse als die aus dem Jet stammenden MC-Partikel. Das Verhältniss der maximalen und minimalen MC-Partikel Masse bei der Injektion

ist  $\approx 10^5$  für das Netz mit 1 Million LES-Zellen. Für den Staukörper wurde eine reflektierende Randbedingung gewählt. Die Normalkomponente der Geschwindigkeit, inklusive des Random Walks, wird beim Kontakt invertiert. Verlässt ein MC-Partikel das Rechengebiet durch den Auslass, so wird das MC-Partikel gelöscht.

### 4.1.3 Partikelmanagement

Für die Durchführung einer LES mit MC-Partikeln hat sich das MC-Partikel-Management als essentieller Bestandteil erwiesen.

Die Gründe hierfür sind begrenzte Computerressourcen und die räumliche Lokalisierung des Mischungsprozesses durch LES-Zellen. Die Struktur des aufbrechenden Jets, sowie die Vergrößerung der LES-Zellen mit zunehmendem Abstand von der Düse führen, ohne Verwendung eines Partikelmanagements, zu stark inhomogenen MC-Partikel Zahlen pro LES-Zelle. Die Restriktion durch die Computerressourcen alleine kann durch Löschoperationen, deren Details im weiteren Verlauf dieses Abschnittes erläutert werden, zufällig aus der gesamten Rechendomäne ausgewählter MC-Partikel (MC-Partikel-Ensemble) erfüllt werden. Die Lokalisierung des Mischvorgangs durch die verwendeten Mischungsmodelle in einer LES-Zelle führt jedoch zu der Notwendigkeit eine Mindestanzahl von MC-Partikeln pro LES-Zelle nicht zu unterschreiten, um den Prozess des turbulenten Mischens kontinuierlich im Raum zu ermöglichen. Dies führt zu der Notwendigkeit einen LES-Zell-basierten Kontrollalgorithmus zu verwenden und verhindert erfolgreiche Simulationen mit Löschoperationen auf dem gesamten Ensemble oder ohne Kontrollalgorithmus.

Wie die Eigenschaften einer LES-Simulation, welche dreidimensionale Wirbelstrukturen zeitlich auflöst, in Kombination mit inhomogenen Rechengittern zu der Notwendigkeit führen, die MC-Partikel-Anzahl zu kontrollieren, um eine untere Grenze von MC-Partikeln pro LES-Zelle sowie eine obere Grenze einzuhalten, soll im Folgenden an einem Beispiel erläutert werden. In den in Abschnitt 5.3 gezeigten Schnitten durch das Netz ist ersichtlich, dass nicht alle Zellen das gleiche Volumen umfassen. Die Volumen der kleinsten LES-Zelle, welche sich über der Düse befindet, und der größten LES-Zelle, welche sich am äußersten Rand des Rechengebietes befindet, unterscheiden sich um einen Faktor von  $10^5$  bei einem Netz mit  $10^6$  Zellen. Das angewandte Mesh-Stretching trägt hierzu bei sowie die Eigenschaft aufeinanderfolgender Kreisschalen, mit zunehmendem Radius in der Fläche anzuwachsen. Da die MC-Partikel der Strömung folgen und der Jet nach dem Aufbrechen Gebiete mit unterschiedlichen Zellvolumen durchstreicht und zudem MC-Partikel-Zahlen pro LES-Zelle vorgegeben werden, muss eine Kontrolle vorgenommen werden. Insbesondere in der fein aufgelösten Region entlang der Achse und beim Übergang zu größeren Zellen über dem Staukörper muss die MC-Partikel-Zahl pro Zelle häufig korrigiert werden. Dies wird in der Abbildung 4.2 schematisch dargestellt. Es sei an dieser Stelle nochmals angemerkt, dass große Sorgfalt auf die Vernetzung der Geometrie gelegt wurde und diese extreme Darstellung der Illustration dient. Bewegt sich das Fluid um  $\Delta x$  nach rechts, durch die Striche ober- und unterhalb der Zellen angedeutet, also von der größeren in die kleinere Zelle, so verlassen mehr MC-Partikel die kleinere Zelle, als nachkommen. Es muss in der kleineren Zelle geklont werden,

um die vorgegebene untere Grenze  $N_{MC,min}$  erreichen zu können. Bewegt sich das Fluid nach links, so werden mehr MC-Partikel in die größere Zelle geschoben, als diese verlassen. Es muss in der größeren Zelle gelöscht werden.

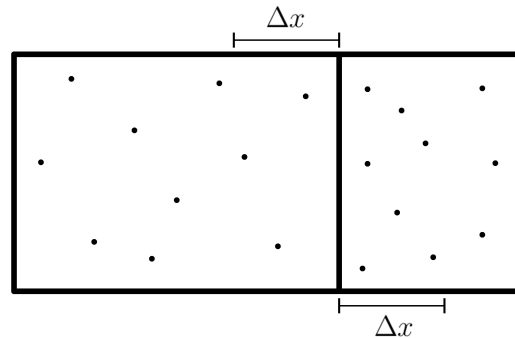


Abbildung 4.2: Skizze mit je 10 MC-Partikeln in unterschiedlich großen Zellen. Gleich große Teile der Zellen sind durch die Striche ober- und unterhalb angedeutet

#### 4.1.3.1 Klonen

Im Fall zu niedriger MC-Partikel-Zahlen werden MC-Partikel dupliziert. Hierbei werden alle extensiven Größen, siehe Tabelle 4.2, halbiert, bevor ein Duplikat des Partikels erstellt wird. Um die räumliche Varianz der skalaren Werte nicht zu ändern, wird der Klon mit identischer Position erzeugt. Aufgrund des Random Walks werden der Klon und die Vorlage nicht der gleichen Stromlinie folgen.

#### 4.1.3.2 Löschen

Wird ein MC-Partikel (Informationsträger, Realisierung des Ensembles) gelöscht, so sollte die Information des Ensembles erhalten bleiben. Hierzu kann entweder mit den einzelnen Realisierungen gearbeitet werden oder statistisch auf Ensembleebene. Bei einem Ansatz mit den einzelnen Realisierungen wird die Information des zu löschenden MC-Partikels auf ein oder mehrere MC-Partikel übertragen. Bei einem Ansatz auf Ensembleebene gehen die Informationen des gelöschten MC-Partikels verloren, die gemittelten Eigenschaften des Ensembles bleiben durch statistische Operationen jedoch erhalten.

Ansätze welche statistisch auf Ensemble-Ebene operieren wurden z. B. von Veroli [149], Subramaniam und Haworth [138] und Pope [109] verwendet. Eine einfache Variante hiervon ist bei  $N_l$  überschüssigen MC-Partikeln  $2 \cdot N_l$  zufällig ausgewählte MC-Partikel in einer LES-Zelle mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% zu löschen, oder deren Gewicht zu verdoppeln. Hierbei geht die Information der einzelnen Realisierung verloren, der Mittelwert bleibt jedoch unverändert. Notwendige Voraussetzung hierfür sind jedoch eine hohe Anzahl von Realisierungen im Verhältnis zur Anzahl möglicher Realisierungen oder eine lange zeitliche Mittelung. Aufgrund der großen Unterschiede vorhandener MC-Partikel-Massen ( $w_{max} > 1000 \cdot w_{min}$ ) und



einer geringen Anzahl von MC-Partikeln pro LES-Zelle führte diese Variante in den durchgeführten Simulationen jedoch zu starken Fluktuationen der gemittelten Skalarwerte und daher nicht zu verwertbaren Datensätzen. Eine weitere Variante ist die Wahrscheinlichkeit des Löschens mit dem MC-Partikel-Gewicht zu modifizieren. Die zufällig ermittelte Löschwahrscheinlichkeit  $P_{zu}$  wird mit dem Gewicht des betrachteten MC-Partikels ( $w_i$ ) dividiert durch das Gewicht aller MC-Partikel in der LES-Zelle modifiziert nach  $P_l = P_{zu} \cdot \frac{w_i}{\sum_j w_j}$ . Hierbei werden bevorzugt schwere MC-Partikel gelöscht. Ist das Gewicht mit einer Information korreliert (in den durchgeführten Simulationen sind MC-Partikel aus dem Hüllstrom deutlich schwerer) so wird diese Information bevorzugt verloren gehen und den Mittelwert verfälschen. Abhilfe schafft die gewichtete Neuverteilung der Gewichte aller gelöschten MC-Partikel  $W_l$ . Das Gewicht der verbleibenden MC-Partikel wird nach  $w_j^* = w_j + W_l \cdot \frac{w_j}{\sum_j w_j}$  neu zugewiesen. Schwerere MC-Partikel erhalten einen höheren Anteil der gelöschten MC-Partikel-Masse und der Effekt des selektiven Informationsverlustes wird hierdurch abgeschwächt. Diese Variante wird fortan als alternative MC-Partikel-Zahl-Kontrolle referenziert werden.

Soll die Information der einzelnen Realisierung erhalten bleiben, kann diese auf ein verbleibendes MC-Partikel übertragen werden. Hierzu kann der gewichtete Mittelwert der jeweiligen Skalare, welcher aus dem zu löschenden MC-Partikel und einem verbleibenden MC-Partikel gebildet wird, dem verbleibenden MC-Partikel zugewiesen werden. Dies führt jedoch zu exzessivem Mischen.

Um einen Mischvorgang bei unterschiedlichen Skalarwerten zu vermeiden, wurde ein Algorithmus mit einem oberen und unteren Partner im Mischungsbruchraum des zu löschenden MC-Partikels entwickelt. Dieser Algorithmus wird in den durchgeführten Simulationen standardmäßig verwendet und als MC-Partikel-Zahl-Kontrolle referenziert. Die Indizes u, l, o stehen für den unteren nächsten Nachbarn u im Mischungsbruchraum, des zu löschenden MC-Partikels l und den oberen nächsten Nachbarn im Mischungsbruchraum o, mit  $Z_u < Z_l < Z_o$ . Die Berücksichtigung dieser drei MC-Partikel wird mit p angezeigt und die des oberen und unteren Partikels mit neu zugewiesenen Werten mit  $p^*$ , dies gilt auch für die verwendeten Summenzeichen. Die neu zugewiesenen Werte für die MC-Partikel u und o tragen das hochgestellte Symbol \*. Die intensiven Skalare Z, T und  $Y_i$  der oberen und unteren Partner bleiben bei diesem Vorgang unverändert. Die zu erhaltenden Größen werden im Folgenden beschrieben. Erhalten werden die Summe der MC-Partikel-Gewichte der MC-Partikel u, l, o, was durch

$$\sum_{p^*} w_{p^*} = const = \sum_p w_p = W_p \quad (4.1)$$

ausgedrückt wird. Dies erhält gleichermaßen die Summe der Gewichte in der LES-Zelle. Ebenso wird der gewichtete Mittelwert der intensiven Skalare

$$\frac{\sum_{p^*} w_{p^*} \cdot \Phi_{p^*}}{\sum_{p^*} w_{p^*}} = const = \frac{\sum_p w_p \cdot \Phi_p}{\sum_p w_p} = \bar{\Phi}_p \quad (4.2)$$

erhalten. Die Erhaltung des gewichteten Mittelwertes der Besetzungszahlen der diskretisierten Größenverteilungsfunktion pro Dichte (Tropfen pro Kilogramm Fluid) ist mittels

$$\sum_{p^*} \frac{w_{p^*} \cdot N_{p^*}}{\rho_{p^*}} = const = W_p \cdot \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)}_p \quad (4.3)$$

formuliert. Die Erhaltung der Varianz von  $\frac{N}{\rho}$  ist durch

$$\sum w_{p^*} \cdot \left[ \frac{N_{p^*}}{\rho_{p^*}} - \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)} \right]^2 = const = W_p \cdot \sigma_p \quad (4.4)$$

gegeben. Die Varianz  $\sigma_p$  der Besetzungszahlen der diskretisierten Größenverteilungsfunktion pro Dichte der Tropfen u, l, o werden mit dem gefilterten Mittelwert  $\overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)}$  aller MC-Partikel in einer LES-Zelle gebildet. Neu zugewiesen werden die Gewichte des unteren und oberen Mischungspartners  $w_l^*$ ,  $w_u^*$  und die Besetzungszahlen der k-Sektionen der diskretisierten Größenverteilungsfunktion  $N_{k,u}^*$ ,  $N_{k,o}^*$ . Das neue Gewicht des oberen Partners ergibt sich unter Berücksichtigung von Gleichungen 4.1 und 4.2 zu

$$w_o^* = w_o + w_l \cdot \frac{\Phi_l - \Phi_u}{\Phi_o - \Phi_u}. \quad (4.5)$$

Das neue Gewicht des unteren Partners ist

$$w_u^* = W_p - w_o^*. \quad (4.6)$$

Die neuen Besetzungszahlen der Sektionen der diskretisierten Größenverteilungsfunktion  $N_{k,u}^*$  und  $N_{k,o}^*$  lassen sich aus den Gleichungen 4.3 und 4.4 mit Hilfe der pq-Formel gewinnen. Für den oberen Partner ergibt sich der neu zuzuweisende Wert

$$N_{k,o}^* = -\frac{p}{2} + \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}. \quad (4.7)$$

Für den unteren Partner ergibt sich der neue Wert

$$N_{k,u}^* = \rho_u^* \cdot \left[ \frac{W_p}{w_u^*} \cdot \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)}_p - \frac{w_o^*}{w_u^*} \cdot \frac{N_o^*}{\rho_o^*} \right]. \quad (4.8)$$

Die Elemente p und q der Lösung von Gleichung 4.8 sind im Folgenden aufgeführt.

Die Berechnung von  $p$  erfolgt durch

$$p = -2 \cdot \rho_o^* \cdot \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)}_p. \quad (4.9)$$

Die Berechnung von  $q$  ist durch

$$q = \rho_o^{*2} \cdot \frac{w_u^*}{w_o^*} \cdot \left[ \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)}^2 + \frac{W_p}{w_u^*} \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)}_p^2 - 2 \cdot \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)}_p \cdot \overline{\left(\frac{N}{\rho}\right)} - \sigma_p \right] \quad (4.10)$$

gegeben. Der Vorgang wird im Falle negativer, neuer Populationen der Sektionen der Größenverteilungsfunktion abgebrochen, welche aus der Lösung der quadratischen Gleichung resultieren können. Im Falle nichtlinear vom Mischungsbruch  $Z$  abhängender Massenbrüche von Dybuthyphtalat  $Y_{DBP}$ , oder der Temperatur  $T$ , welche durch die Berücksichtigung der kondensierten Masse und der Phasenübergangswärme entstehen, wird ein Mischvorgang durch diesen Kontrollalgorithmus eingeführt.

Die Evaluierung der Methoden ist in Abschnitt 6.4.2 gegeben.

#### 4.1.4 Nukleation

Wie in Abschnitt 3.3 beschrieben, kann eine Nukleationsrate ( $B$ , nach Gleichung 3.17) für einen bestimmten, kritischen Durchmesser ( $d_{krit}$  nach Gleichung 3.19) berechnet werden. Die resultierenden Tropfen müssen anschließend in die Sektionen  $N_k$  der diskreten Größenverteilungsfunktion einsortiert werden. Hierbei soll die kondensierte Masse erhalten werden, die mathematische Formulierung dieser Forderung ist

$$\Delta m_{nukl} = B \cdot V_{krit} \cdot \rho_{fl} \cdot \Delta t, \quad (4.11)$$

wobei  $V_{krit}$  das Kugelvolumen zum kritischen Durchmesser  $d_{krit}$  darstellt. Zudem soll auch die Anzahl der gebildeten Tropfen pro Volumen

$$\Delta N_{nukl} = B \cdot \Delta t \quad (4.12)$$

erhalten werden. Die entstanden Tropfen werden hierzu in eine Sektion mit größerem und eine Sektion mit kleinerem Durchmesser als der kritische Durchmesser eingefügt. Die unteren und oberen Sektionen  $N_k$  zum kritischen Durchmesser  $d_{krit}$  sind mit den tiefgestellten Buchstaben  $u$  und  $o$  gekennzeichnet. Die mathematische Formulierung der Erhaltung der verteilten Tropfendichte ist

$$\Delta N_u + \Delta N_o = \Delta N_{nukl}. \quad (4.13)$$

Die Forderung nach Massenerhaltung entspricht

$$\Delta m_u + \Delta m_o = \Delta m_{nukl}. \quad (4.14)$$

Um diese Forderungen erfüllen zu können, muss es stets eine Sektion in der diskreten Größenverteilungsfunktion geben, die kleiner als der kritische Durchmesser ist ( $d_0 < d_{krit}$ ). Sind die benachbarten Sektionen zum kritischen Durchmesser gefunden  $d_u < d_{krit} < d_o$ , so kann unter Zuhilfenahme von Gleichungen 4.13, 4.14 und der Tropfenmasse der benachbarten Sektionen ( $m_i = N_i \cdot V_i \cdot \rho_{fl}$ ) die zu beaufschlagende Tropfenzahldichte berechnet werden. Die Änderungen für die untere Sektion ist

$$\Delta N_u = \Delta N_{nukl} \cdot \frac{V_o - V_{d_{krit}}}{V_o - V_u}. \quad (4.15)$$

Die Änderung für die obere Sektion ist

$$\Delta N_o = \Delta N_{nukl} \cdot \frac{V_{d_{krit}} - V_u}{V_o - V_u}. \quad (4.16)$$

### 4.1.5 Kondensation

Die Wachstumsgeschwindigkeit der Tropfen durch Kondensation aus der Gasphase an bereits gebildeten Tropfen ist durch Gleichung 3.20 gegeben. Die Tropfen wachsen um ein Kugelschalenstück  $\delta V$  und an den Tropfen in der k-ten Sektion kondensiert die kondensierte Masse

$$\Delta m_{kond,k} = \frac{4 \cdot \pi}{3} \cdot ((r_k + G_k \cdot \Delta t)^3 - r_k^3) \cdot \rho_{fl} \cdot N_k. \quad (4.17)$$

Die Anzahl der Tropfen, die aufgrund von angelagertem Fluid die i-te Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion verlassen, kann nach

$$dN_{raus,k} = G_k \cdot n(d_k) \cdot \Delta t = \frac{N_k \cdot G_k \cdot \Delta t}{d_{k+1} - d_k} \quad (4.18)$$

berechnet werden (Hounslow et al. [51]).

### 4.1.6 Phasenübergangswärme und kondensierte Masse

Wie zu Beginn dieses Kapitels (siehe Abschnitt 4.1) beschrieben, wird nach der Berechnung der Nukleation und Kondensation der ausgefallenen Masse (die Summe von Gleichung 4.11 und 4.17) Rechnung getragen. Zudem wird die Phasenübergangswärme berücksichtigt. Hierfür wird der Massenbruch  $Y_{DBP}$  entsprechend gesenkt und die Temperatur angehoben. Die Effekte des Massenabzuges und der freigesetzten Bindungsenergie werden in Abschnitt 6.3 untersucht.

# 5 Experiment, frühere Simulationen und numerisches Äquivalent

In diesem Abschnitt wird das von den Simulationen in dieser Arbeit numerisch abgebildete Experiment von Lesniewski [69] vorgestellt. Des Weiteren werden die Simulationen von Garmory und Mastorakos [41] sowie Di Veroli [149] beleuchtet, welche ebenfalls das Experiment von [69] numerisch abbildeten. Das Kapitel wird durch die Vorstellung der in dieser Arbeit verwendeten Geometrie, LES-Netze, Lösungsschemata und Randbedingungen der Eulergleichungen abgeschlossen.

## 5.1 Experiment

Die von Lesniewski im Jahre 1997 im Rahmen einer Dissertation an der Universität Kalifornien durchgeführten Experimente befassten sich mit Nukleation und Partikelwachstum in turbulenten Jets (Lesniewski [69]). Ein warmer, Dibutylphthalat-haltiger (DBP) Jet kühlt beim Mischen mit dem kälteren Hüllstrom ab und Teile des DBP gehen in die flüssige Phase über. Für die Jet-Mischung wurde reiner Stickstoff und für den Hüllstrom Umgebungsluft verwendet. Die thermische Isolierung der Düse ist von erheblicher Dicke und stellt einen Staukörper dar. Eine Kammer von 15 cm Durchmesser trennte den Versuchsraum vom Laboratorium und verhinderte Kontamination in beide Richtungen. Zur Datenerhebung wurden entgegen der Strömungsrichtung Absaugvorrichtungen in die Kammer eingeführt. Die Originalskizze der Versuchsanordnung kann in Abbildung 5.1 betrachtet werden. Bei Messungen zur Größenverteilung der Tropfen wurde das Fluid sofort nach dem Absaugen mit warmem Stickstoff verdünnt, um weitere Nukleation und Kondensation zu verhindern. Trotz der gewissenhaften Arbeit von [69] bestehen einige Unsicherheiten bezüglich der veröffentlichten Datensätze. Di Veroli [149] vermutete eine nicht vollständige Unterdrückung der Nukleation und Kondensation nach der Extraktion des Fluides aus dem Jet. Das größte Manko der Arbeit ist jedoch die fehlende Fehlerabschätzung für die ermittelten Ergebnisse, wodurch eine weitere Evaluierung deutlich erschwert wird. Die Versuchsreihen der Arbeiten von Lesniewski [69] umfassten unterschiedliche Düsendurchmesser und Jetgeschwindigkeiten sowie DBP-Molanteile im Bereich  $1.1 \cdot 10^{-4} < X_{DBP} < 5.2 \cdot 10^{-4}$ . Die veröffentlichten Datensätze umfassen Geschwindigkeitsprofile, Partikelgrößenverteilungen, Partikelformationsraten, Partikelkonzentrationen und massen- und anzahlgemittelte Durchmesser in Abhängigkeit von den DBP-Randbedingungen. Zudem beinhalten sie Daten über die räumliche Verteilung von massen- und anzahlgemittelten Durchmessern, Partikelkonzentrationen und weitere Datensätze, die nicht Gegenstand der Analyse dieser Arbeit sein

sollen.

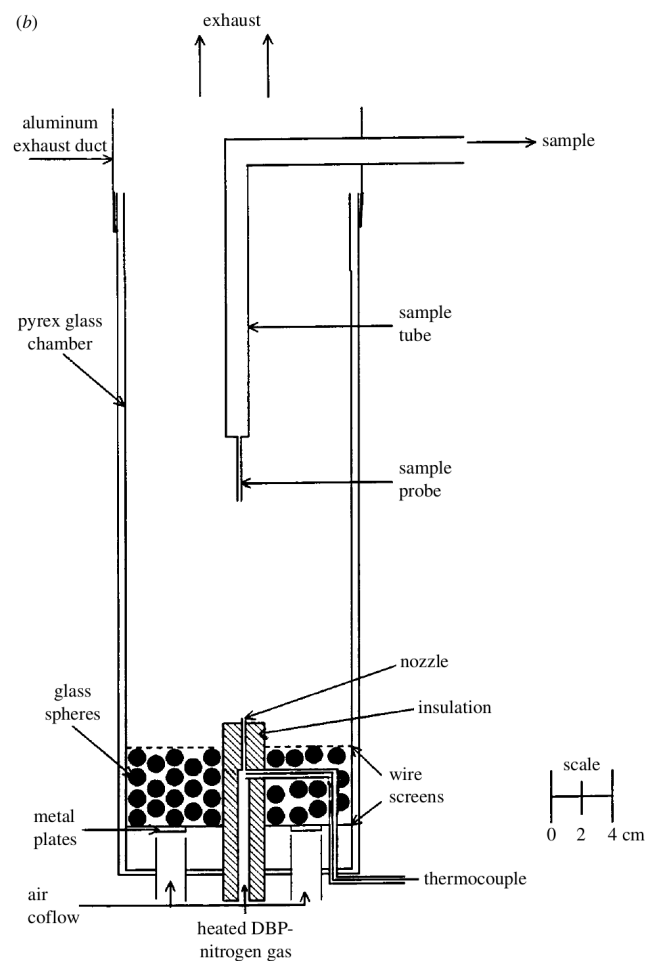


Abbildung 5.1: Originalskizze des Versuchsaufbaus von Lesniewski [69]

## 5.2 Frühere Simulationen

Garmory und Mastorakos [41] benutzen eine transportierte WDF-Methode mit stochastischen Feldern, um das Experiment von Lesniewski [69] numerisch abzubilden. Die Größenverteilung wurde durch eine angenommene Log-Normalverteilung repräsentiert, welche durch ein drei Momenten-System nach [119] modelliert wurde. Die Methode stochastischer Felder, oder auch Feld-Monte-Carlo-Methode, nutzt eine Reihe von Feldern, die in der Rechendomain transportiert werden, um die WDF zu repräsentieren. Die Evolution der Felder wird durch partielle stochastische Differentialgleichungen beschrieben. Zur Schließung wurde das IEM-Mischungsmodell verwendet. Die Felder transportierten die Fremdspezieskonzentration, Temperatur und die ersten drei Momente der Größenverteilungsfunktion. In Tabelle 5.1 ist eine Übersicht über die verwendeten Modellierungen des Sättigungsdruckes, der Oberflächenspannung und der Nukleationsrate gegeben.

Tabelle 5.1: Zur Modellierung verwendete Formulierungen von [41]

GöÙe	$p_s$	$\sigma$	B
Modellierung nach Gleichung	3.10	3.13, 3.14, 3.15, 3.16	3.18

Die „Stochastic Field“-Methode zeigte ein korrektes Mischungsverhalten für die transportierten Skalare. Die Partikelkonzentrationen entlang der Jetachse lagen deutlich unter den experimentellen Werten, daher wurden Simulationen mit niedrigeren Oberflächenspannungen durchgeführt (siehe Abschnitt 3.3) um die experimentellen Ergebnisse wiedergeben zu können. Es wurde ein erwartungsgemäß starker Einfluss der Oberflächenspannung auf die Nukleationsrate beobachtet. Die Effekte der kleinskaligen Turbulenz, welche durch statistische Prozesse abgebildet wurden, verschoben das Maximum der Nukleationsrate stromab und führte zu einem niedrigeren Maximalwert. Die Werte sanken vor dem Maximum, im Vergleich zur numerischen Lösung ohne Berücksichtigung der Turbulenz, leicht ab und blieben nach dem Maximum auf einem höheren Niveau. Die turbulenten Fluktuationen verschmieren die Maxima, welche ohne Berücksichtigung der Turbulenz stärker lokalisiert sind. Die Effekte der Turbulenz auf die Nukleationsrate führten zu niedrigeren Partikelkonzentrationen im düsenahen Strömungsfeld des Jets. Die beobachtete Gesamtzahl der Tropfen erhöhte sich bei Berücksichtigung der Turbulenz im späteren Verlauf des Strömungsfeldes jedoch. Garmory und Mastorakos [41] stellten fest, dass die angenommene Form der Verteilung ungünstig für deren Berechnung gewesen sein könnte und dass ein verbessertes Modell zur numerischen Behandlung der Größenverteilungsfunktion verwendet werden sollte. Sie hielten ebenfalls fest, dass die Berücksichtigung der kleinskaligen Turbulenz einen signifikanten Einfluss auf die homogene Nukleation hat. Die Verwendung einer zweidimensionalen Geometrie und einer RANS-Repräsentation der Felder schränkt zudem die Fähigkeit des Modells, turbulente (dreidimensionale) Strukturen zu berücksichtigen, ein.

Di Veroli [149] führte im Rahmen seiner Dissertation ebenfalls Simulationen durch, welche das experimentelle Setup von Lesniewski [69] numerisch abbildeten. Zunächst wurde das stationäre, zeitlich gemittelte Strömungsfeld mit einer Reynolds-Averaged-Navier-Stokes-Simulation (RANS), unter Zuhilfenahme von Fluent 6.2, berechnet. Zur Schließung wurde das k- $\epsilon$  Modell verwendet. Das stationäre Geschwindigkeitsfeld aus der RANS-Simulation wurde dann verwendet, um die Bewegungsgleichungen der MC-Partikel zu lösen (siehe Abschnitt 3.2). Zudem wurden die Änderungen der Skalare, welche von den MC-Partikeln transportiert werden, entsprechend der Gleichung aus Abschnitt 3.2 gelöst. Es wurden 30000 Zellen, 20 Partikel pro Zelle und 100 Stützstellen für die Diskretisierung der Größenverteilungsfunktion verwendet. Die benötigte CPU-Zeit war  $\approx 50$  CPU-Stunden pro Simulation. In Tabelle 5.2 ist eine Übersicht über die verwendeten Modellierungen des Sättigungsdruckes, der Oberflächenspannung und der Nukleationsrate gegeben. Die Schließung der Quellterme der GDE konnte durch eine Lagrange Darstellung mit Hilfe von MC-Monte Partikeln erreicht werden. Die Modellierung der ungeschlossenen Mischungsterme wurde mit Hilfe des IEM-Mischungsmodells vollzogen. Durch die Verwendung einer RANS-Simulation zur

Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes konnten wichtige Eigenschaften des turbulenten Strömungsfeldes bei der Lösung der GDE berücksichtigt werden. Aufgrund des gewählten RANS-Ansatzes zur Strömungsberechnung konnten die instationären, großskaligen Strukturen der Turbulenz jedoch nicht berücksichtigt werden, welches sich auch in der Wahl einer zweidimensionalen Geometrie ausdrückt. In der Arbeit konnte das charakteristische räumliche Verhalten der Sättigung und der Nukleation wiedergegeben werden. Die Größenverteilungsfunktion aus den Simulationen unterschied sich in der Form jedoch stark von den experimentellen Ergebnissen [69].

Tabelle 5.2: Zur Modellierung verwendete Formulierungen von [149]

GöÙe	$p_s$	$\sigma$	B
Modellierung nach Gleichung	3.11	3.13	3.17

Die Geschwindigkeitsfelder der Simulationen von [69, 149, 41] werden in Abschnitt 6.2 analysiert.

Die aktuelle Studie beseitigt die von den Autoren selbst bemängelten Nachteile der durchgeführten Simulationen durch Berücksichtigung eines detaillierten Strömungsfeldes mittels einer LES und durch die diskrete Darstellung der Größenverteilungsfunktion.

Weitere Simulationen wurden von [105, 164] durchgeführt, welche jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht näher beleuchtet werden.

### 5.3 Simulationsgeometrie und Netze

Für die im Rahmen dieser Studie durchgeführten Simulationen wurde dem experimentellen Aufbau eine Geometrie nachempfunden. Für die durchgeführten Simulationen wurde der Düsendurchmesser ( $D = 0,00235m$ ) verwendet. Der Staukörper ( $D_s = 0,027m$ ) wurde von einem Hüllstrom mit einem Durchmesser von ( $D_h = 0,11m$ ) umschlossen. Die Geometrie hat eine Länge von  $0,1645m$  ( $70D$ ) und einen Öffnungswinkel von  $5,48^\circ$ . Im Folgenden werden die unterschiedlichen verwendeten LES-Rechengitter beschrieben. Um netzunabhängige Ergebnisse gewährleisten zu können, wurde die Auflösung erhöht, bis sich die berechneten Größen nicht mehr signifikant änderten. Dies war bei einer Auflösung von 1 Million Zellen der Fall (siehe Abschnitt 6.5.1). Für die weiteren Sensitivitätsstudien und Variationen des Massenbruchs wurde aus Kostengründen auf das Netz mit 0,5 Million LES-Zellen zurückgegriffen. Dies kann mit der Absicht, lediglich das tendenzielle Verhalten abbilden zu wollen, gerechtfertigt werden.

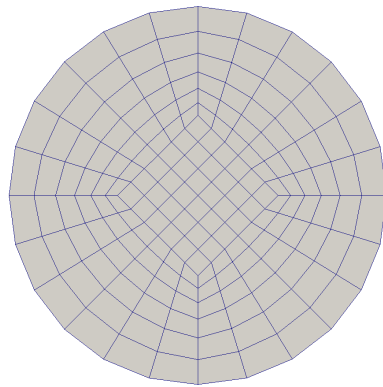
Die Struktur der Netze ist unabhängig von der gewählten Auflösung. Die Düse wurde mit einem quadratischen Netz im Zentrum versehen, welches die Auflösung in Umfangsrichtung der gesamten Geometrie vorgibt. Den Anschluss bildet ein Netz, welches strahlenförmig nach außen in der Fläche zunimmt und die äußere Fläche der Düse ausfüllt (siehe Abbildung 5.2(a)). Der Staukörper und der Hüllstrom sind mit Netzen gleicher Struktur versehen. Es kann jeweils die radiale Auflösung frei gewählt werden. Diese wurde so angepasst, dass sowohl die gewünschte räumliche



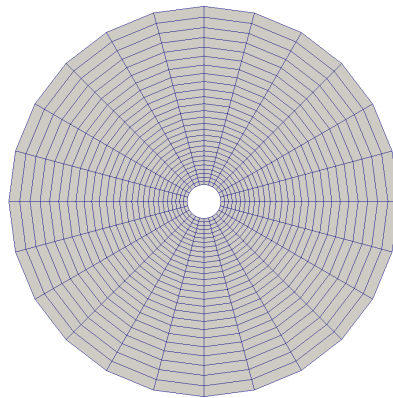
Auflösung erreicht wurde als auch kontinuierliche Übergänge zwischen den einzelnen, vernetzten Geometrieteilen in radialer Richtung gewährleistet werden konnten (siehe Abbildung 5.2(c)). Die axiale Auflösung kann gänzlich frei gewählt werden. Außer beim quadratischen, innersten Netz wurden die Netze mit einem Streckungsfaktor versehen, so dass die Zellgröße mit zunehmendem Abstand von der Düse anwächst. Ein Überblick über die wichtigsten Netzeigenschaften ist in Tabelle 5.3 gegeben. Wie aus der Tabelle hervorgeht, wurde beim Übergang von 0.5 Millionen Zellen auf 1 Million Zellen die Verfeinerung hauptsächlich in axialer Richtung vorgenommen. Eine leichte Verfeinerung der radialen Netzauflösung wurde über der Düse und dem Staukörper vorgenommen. Bei der weiteren Erhöhung der Auflösung auf 1,5 Millionen LES-Zellen wurde die Auflösung in axialer und radialer Richtung verfeinert. Die Auflösung des Hüllstroms wurde bewusst grob gewählt, da hier keine Gradienten vorhanden sind. Dies führt zu großen Unterschieden im Zellvolumen und damit zu großen Unterschieden der MC-Partikel-Gewichte. In Abbildung 5.2 sind exemplarisch die vernetzten Geometrieteile abgebildet. Hierfür wurde das Netz mit 0,5 Millionen Zellen verwendet.

Tabelle 5.3: Eigenschaften der verwendeten Netze

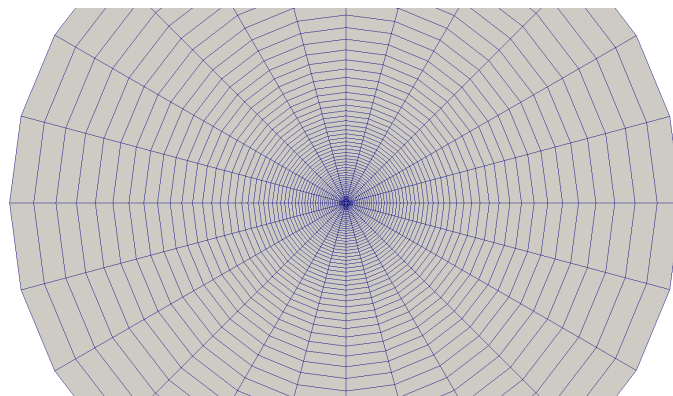
Netzgröße M-Zellen	0.5	1	1.5
Kleinste Zellgröße im Düsenquerschnitt [ $\mu m$ ]	109	75	64
Zellgröße über Düsenquerschnitt [ $\mu m$ ]	200	190	160
Zellen in Umfangsrichtung	24	32	36
Zellen im quadratischen Netz der Düse	6*6	8*8	9*9
Zellen radial Düse	6	9	11
Zellen radial Staukörper	27	46	50
Zellen radial Hüllstrom	21	22	25
Zellen in axialer Richtung	180	400	475
Größtes $\Delta z$ (letzte Zelle) [mm]	0,8	0,75	0,64
$\frac{\Delta z_{max}}{\Delta z_{min}}$	4	4	4
Größtes $\Delta r$ (äußerste Zelle) [mm]	26,0	20,5	18,4



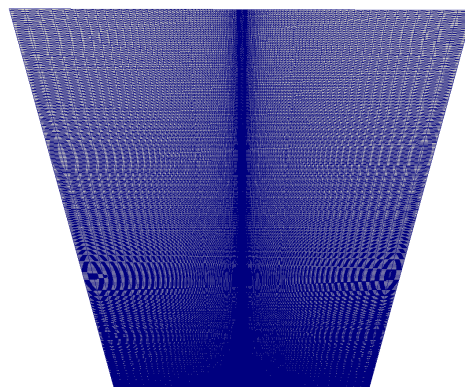
(a) Vernetzte Düse



(b) Vernetzter Staukörper



(c) Vernetzter Hüllstrom, Staukörper, Düse



(d) Netz in axialer Richtung

Abbildung 5.2: Vernetzte Geometrie

Die bei der Lösung der Eulerschen Gleichungen verwendeten Randbedingungen sind in Tabelle 5.4 aufgeführt. Die verwendeten Lösungsalgorithmen können Tabelle 5.5 entnommen werden. Aufgrund der radialen Verbreiterung der Geometrie mit zunehmendem Abstand von der Düse, kann die Geschwindigkeitsrandbedingung des Hüllstroms angewendet werden, ohne die Strömungsbedingungen des Experiments zu verändern. Diese Maßnahme führt zu einer erhöhten numerischen Stabilität bei der Verwendung von Lösungsschemata zweiter Ordnung. Um möglichst physikalische Randbedingungen für die Turbulenz im Jet zu erhalten, wurde „Diffusion von Zufallszahlen“ zur Turbulenzgenerierung nach Kempf et al. [60] verwendet und die resultierenden Geschwindigkeiten  $u_t$  dem Jet überlagert. Die numerische Umsetzung für OpenFOAM ist in [102] dokumentiert. Eine Analyse der Methode und Umsetzung kann in Dietzel et al. [27] betrachtet werden. Die Randbedingungen wurden mit  $\vec{u} = (0 \ 0 \ 51, 55)$ , dem Düsendurchmesser  $D = 0,00235m$  und  $RMS = 18\%$  für die benötigte Simulationszeit von einer Sekunde generiert. Die Größe der kohärenten Strukturen beträgt 20% des Düsendurchmessers.

Tabelle 5.4: Randbedingungen der LES

Größe	Jet	Hüllstrom	Auslass	Seite	Staukörper
$\vec{u}$	$(u_t \ u_t \ u_{jet} + u_t)$	$(0 \ 0 \ u_h)$	$\nabla \vec{u} = 0$	$(0 \ 0 \ u_h)$	$(0 \ 0 \ 0)$
p	$\nabla p = 0$	$\nabla p = 0$	$p_\infty$	$\nabla p = 0$	$\nabla p = 0$
T, $Y_i$ , Z	$\phi_{jet}$	$\phi_h$	$\nabla \phi = 0$	$\nabla \phi = 0$	$\nabla \phi = 0$

Tabelle 5.5: Lösungsschemata der LES

Größe	Lösungsschema	Ordnung
$\frac{d}{dt}$	backward	zweite
Divergenz	Gauss linear	zweite
Gradient	Gauss limited	zweite
Laplace	Gauss limited	zweite



# 6 Ergebnisse – numerische Aspekte

In diesem Abschnitt werden die numerischen Aspekte der durchgeführten Simulationen betrachtet. Zunächst wird eine Übersicht der durchgeführten Simulationen und der verwendeten Kontrollparameter gegeben. Anschließend werden die Geschwindigkeitsfelder der Rechnungen mit unterschiedlicher LES-Netz-Feinheit betrachtet und in den Zusammenhang mit den Ergebnissen früherer Arbeiten gestellt. Die Effekte des Massenverlustes aus der Gasphase auf charakteristische Größen werden analysiert. Gegenstand der Betrachtung ist auch die Populationskontrolle der MC-Partikel, hierbei werden zwei Verfahren gegenübergestellt und die Auswirkungen auf charakteristische Größen analysiert. Der Abschnitt wird durch eine Unabhängigkeitsstudie für die Anzahl der zur Diskretisierung verwendeten Stützstellen in verschiedenen Dimensionen abgeschlossen.

## 6.1 Rechnungen und Ressourcen

Um den Einfluss der Diskretisierung in verschiedenen Dimensionen abschätzen zu können, wurde eine Reihe von Parameterstudien durchgeführt. Diese umfassen die Auflösung des LES-Rechengitters, die Anzahl der MC-Partikel pro LES-Zelle und die Diskretisierung der PSD. Die Rechnungen wurden auf Prozessoren des Typs „AMD Opteron(tm) Processor 6128“ und „AMD Opteron(tm) Processor 6172“ durchgeführt. Die verwendete Anzahl an parallel genutzten CPUs wurde im Bereich von 48 bis 448 den Ressourcenanforderungen angepasst. Ein Überblick über die benötigten CPU-Stunden und die durchgeführten Rechnungen und deren Parameter kann Tabelle 6.1 entnommen werden. Die Eigenschaften der LES-Netze sind in Abschnitt 5.3 gegeben. Die Daten zur MC-Partikel-Kontrolle entsprechen  $N_{MC,min} < N_{MC,z} < N_{MC,max}$ . Das Partikel-Management ist in Abschnitt 4.1.3 beschrieben. Der Zusatz „P“ in der Rubrik „MC-Partikel-Kontrolle“ bei Rechnung F21 symbolisiert die Verwendung der alternativen MC-Partikel-Zahl-Kontrolle. Die Modellierungen der Mischungsmodelle sind in Abschnitt 3.6 zu betrachten. Die Formulierungen der Oberflächenspannungen  $\sigma$  und  $\sigma_{Mi}$  können in Abschnitt 3.3 betrachtet werden. Die Rubrik  $\Delta m$ ,  $\Delta T$  beschreibt die Berücksichtigung der Phasenübergangseffekte. Die Modellierung der durch den Phasenübergang freigesetzten Wärme wird in Abschnitt 3.5 dargelegt.

Alle Rechnungen wurden mit  $T_{jet} = 413K$  und  $T_h = 299K$  durchgeführt. Der Druck beträgt  $p = 101325Pa$ . Die Geschwindigkeit des Hüllstroms beträgt 0,18 m/s, der Düsendurchmesser 0,00235m und die Reynolds-Zahl  $Re \approx 4700$ .

Tabelle 6.1: Übersicht der durchgeführten Rechnungen. Von links nach rechts: Kürzel, LES-Zellen, Anzahl der MC-Partikel, Kontrollparameter für die MC-Partikel-Kontrolle und -Injektion, Anzahl der Stützstellen der diskretisierten Größenverteilungsfunktion, Mischungsmodell, Oberflächenspannung, Kondensationseffekte, Massenbruch DBP, Kosten in CPU Stunden.

Kürzel	$10^6$ LES-Zellen	$10^6$ MC-Partikel	MC-Part.-Kontrolle	$N_k$	Mischungsmodell	$\sigma$	$\Delta m, \Delta T$	$X_{DBP}$	CPUh
F1	1	$\approx 20$	$10 < 20 < 30$	40	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	90000
F2	1	$\approx 8$	$5 < 7 < 10$	30	IEM	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	35000
F3	1	$\approx 8$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	35000
F4	1.5	$\approx 12$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	95000
F5	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	15000
F6	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	40	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	18000
F7	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	50	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	21000
F8	0.5	$\approx 8$	$10 < 15 < 20$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	20000
F9	0.5	$\approx 10$	$10 < 20 < 30$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	25000
F10	0.5	$\approx 12$	$10 < 25 < 40$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	30000
F11	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$2,5 \cdot 10^{-4}$	15000
F12	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$2,7 \cdot 10^{-4}$	15000
F13	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3 \cdot 10^{-4}$	15000
F14	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,8 \cdot 10^{-4}$	15000
F15	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$4,5 \cdot 10^{-4}$	15000
F16	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	ja	$5,1 \cdot 10^{-4}$	15000
F17	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma$	nein	$5,1 \cdot 10^{-4}$	15000
F18	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma_{M1}$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	60000
F19	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma_{M2}$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	60000
F20	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$	30	MCD	$\sigma_{M3}$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	60000
F21	0.5	$\approx 4$	$5 < 7 < 10$ P	30	MCD	$\sigma$	ja	$3,6 \cdot 10^{-4}$	15000

Die für die jeweiligen LES-Netze verwendeten Zeitschrittweiten und resultierenden Courant-Zahlen sind in Tabelle 6.2 aufgeführt. Zunächst wurden das Strömungsfeld

Tabelle 6.2: LES-Netz-Auflösung und verwendete Zeitschrittweite

$10^6$ LES-Zellen	$\Delta t$ [s]	Maximale Courant-Zahl
0,5	$5 \cdot 10^{-6}$	1,02
1	$2,5 \cdot 10^{-6}$	1,05
1,5	$1 \cdot 10^{-6}$	0,95

und die Skalarfelder mit dem modifizierten Löser ohne MC-Partikel berechnet. Aus den vollständig entwickelten Euler-Feldern wurden die Werte für Temperatur und Massenbrüche der MC-Partikel interpoliert, mit welchen das Rechengebiet für weitere Rechnungen initialisiert wurde. Anschließend wurden 0,7 Sekunden Simulationszeit berechnet, bevor die zeitliche Mittelung von 0,7 bis 1 Sekunde durchgeführt wurde. 1 Sekunde Simulationszeit entspricht einer Durchflusszeit des Hüllstroms.

In Tabelle 6.3 sind die untersuchten Aspekte und die dafür herangezogenen Simulationen aufgeführt.

Tabelle 6.3: Verwendungszweck der Simulationen

Zweck	Fall
Referenzfall, Einfluss der Turbulenz	F1
Untersuchung Mischungsmodelle	F2,F3
Effekte der Kondensation	F16,F17
LES-Netz-Auflösung	F2,F4,F5
MC-Partikel-Anzahl	F5,F8,F9,F10
PSD-Diskretisierung	F5,F6,F7
Modellierung der Oberflächenspannung	F5,F18,F19,F20
Effekt $Y_{DBP}$	F5, F11, F12, F13, F14, F15, F16

Bei der Auswertung der Simulationsdaten werden exemplarisch die Wachstumsraten der Sektionen 1 und 25 betrachtet. Die Sektionen wurden ausgewählt, um die Änderung der Wachstumsraten bei Tropfendurchmessern mit mehreren Größenordnungen Unterschied im Tropfendurchmesser in besetzten Sektionen betrachten zu können. Die erste Sektion repräsentiert bei allen Diskretisierungsfeinheiten der Größenverteilungsfunktion den gleichen Tropfendurchmesser und kann daher zu Vergleichen herangezogen werden. Die 25. Sektion repräsentiert einen deutlich höheren Tropfendurchmesser, ist jedoch klein genug gewählt, um unter allen Randbedingungen eine Besetzung mit Tropfen zu gewährleisten. Die Sektionen und die der jeweiligen Diskretisierung zugehörigen Größen können Tabelle 6.4 entnommen werden. Des Weiteren werden Radialprofile an der Stelle  $z/D = 20$  betrachtet, da die Absaugvorrichtung in den Experimenten von Lesniewski [69] an dieser Stelle angebracht war und auch Di Veroli [149] diese Position zur Datenerhebung verwendete. Anzumerken sei aber, dass die Ergebnisse aufgrund unterschiedlicher

Strömungsfelder dennoch mit Bedacht durchgeführt werden müssen. Für die Ermittlung der Größenverteilungsfunktion an verschiedenen Positionen entlang der Jetachse wurde ein Kontrollvolumen verwendet, welches dem Durchmesser der von [69] verwendeten Absaugvorrichtung entspricht. Die axiale Ausdehnung des Kontrollvolumens umfasst eine LES-Zelle. Im Rahmen weiterer Arbeiten an dem entwickelten Softwarepaket wurde eine Korrektur im Modul des Massenabzuges (Berechnung der Dichte mithilfe der spezifischen Gaskonstante) durchgeführt. Die Daten für die Abschnitte des Referenzfalls, Einfluss der Turbulenz, der Analyse der Mischungsmodelle, des Massenverlustes und der Analysen des Verhaltens bei Variation von  $X_{DBP}$  wurden entsprechend angepasst.

Tabelle 6.4: Anzahl der Stützstellen der Größenverteilungsfunktion, Sektion , zugehöriger Durchmesser

Anzahl Stützstellen	Sektion	Durchmesser [m]
30	1	$2 \cdot 10^{-9}$
40	1	$2 \cdot 10^{-9}$
50	1	$2 \cdot 10^{-9}$
30	25	$1,88 \cdot 10^{-6}$
40	25	$4,02 \cdot 10^{-7}$
50	25	$1,36 \cdot 10^{-7}$

## 6.2 Turbulenzrandbedingungen und Geschwindigkeitsfeld

Um möglichst physikalische Randbedingungen nutzen zu können, wurden turbulente Strukturen mit der Methode der „Diffusion von Zufallszahlen“ genutzt (siehe Abschnitt 5.3). Der Aufplatzzpunkt des Jets kann mit Hilfe des Turbulenzgenerators gesteuert werden. Die Abklingrate der Geschwindigkeit bleibt von den turbulenten Randbedingungen jedoch weitgehend unbeeinflusst. Das experimentelle Abklingverhalten der Geschwindigkeit des Jets von Lesniewski [69] konnte nicht wiedergegeben werden. Das Abklingverhalten entspricht weitgehend der theoretischen Lösung des selbstähnlichen Jets von Tieszen et al. [143]. Daher wurde der Aufplatzzpunkt dem theoretischen Verhalten entsprechend gewählt. Da signifikante Verschiebungen des Aufplatzzpunktes nur mit großen Änderungen in der Turbulenzstruktur erreicht werden konnten, wurde darauf verzichtet, den Aufplatzzpunkt des Jets für alle LES-Netz-Auflösungen möglichst identisch zu gestalten. Für alle Rechnungen wurden die identischen Turbulenzdaten verwendet, die mit den in Abschnitt 5.3 spezifizierten Bedingungen generiert wurden. In Abbildung 6.1 kann die normalisierte Geschwindigkeit entlang der Jetachse betrachtet werden. Neben den Kurven für die verwendeten Netze ist auch das experimentelle Profil von Lesniewski [69] eingezeichnet sowie der Verlauf nach Tieszen et al. [143]. Der Jet bricht bei Verwendung des Gitters mit 0,5 Million LES-Zellen bei  $z/D \approx 4$  auf. Der Aufplatzzpunkt für die Netze mit



1 Million und 1,5 Millionen LES-Zellen ist nahezu identisch bei  $z/D \approx 3$ . Die Geschwindigkeitsprofile aus den Simulationen von [149, 41] entsprechen ebenfalls weitgehend dem selbstähnlichen Verlauf. Betrachtet man das Geschwindigkeitsprofil von Garmory und Mastorakos [41], so ist der Aufplatzzpunkt des Jets vergleichbar mit dem aus der Rechnung mit 0,5 Millionen LES-Zellen. Der Geschwindigkeitsverlust ist jedoch höher, so dass sich die Kurve bei  $z/D \approx 6$  den Kurven aus Rechnungen mit 1 und 1,5 Millionen LES-Zellen annähert. Im Bereich  $10 < z/D < 20$  verläuft die Kurve von [41] nahezu identisch mit der Kurve aus der Rechnung mit 0,5 Millionen LES-Zellen. Für  $z/D > 20$  sind die Kurven aller betrachteten Simulationen sowie der selbstähnliche Verlauf nur marginal verschieden. Betrachtet man den Kurvenverlauf der Geschwindigkeit entlang der Jetachse von Di Veroli [149], so ist ersichtlich, dass der Aufplatzzpunkt mit dem aus den Experimenten von [69] übereinstimmt. Die Abnahme der Geschwindigkeit ist jedoch deutlich höher als beim experimentellen Verlauf. Die Kurve schneidet die Kurven aus den durchgeführten Simulationen bei  $z/D = 7$  (0,5 Millionen LES-Zellen) und bei  $z/D = 10$  (1 und 1,5 Millionen LES-Zellen) und verläuft im Bereich  $12 < z/D < 21$  unterhalb der Simulationsergebnisse. Für  $z/D > 25$  stimmt der Verlauf mit denen der durchgeführten Simulationen überein. Die Kurve von [149] ist stets über der von [41]. Der Abfall der Kurve ist jedoch steiler als bei allen anderen betrachteten Kurven, so dass bei  $z/D = 12$  die Werte unter die der anderen Kurven gefallen sind. Für  $z/D > 20$  entspricht auch die Kurve von [149] den Simulationsergebnissen aus anderen Quellen.

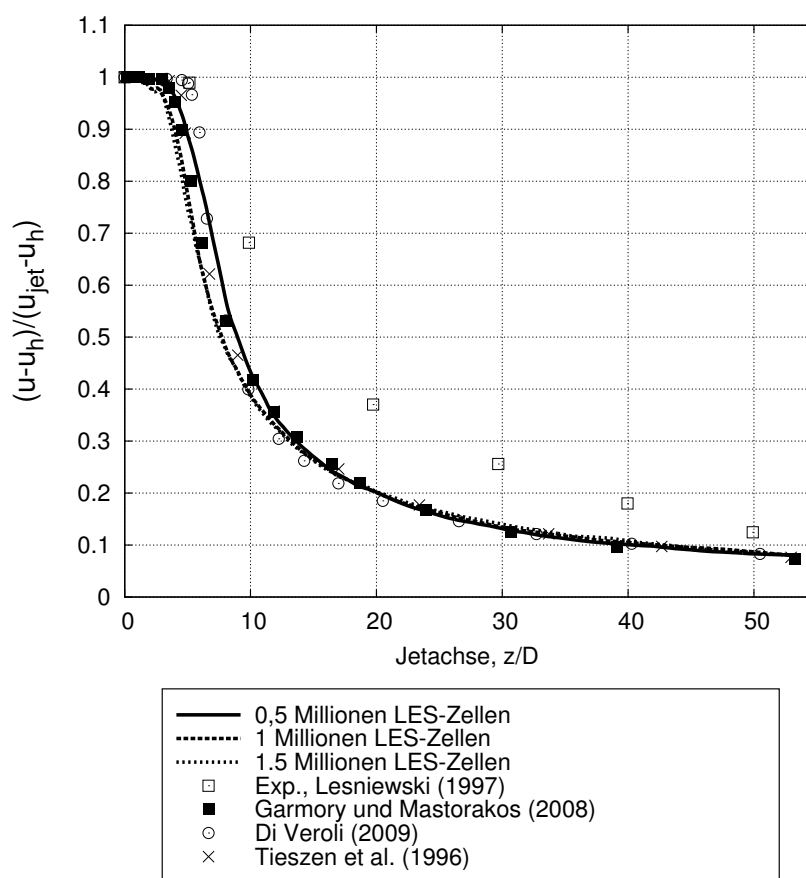


Abbildung 6.1: Normalisierte Geschwindigkeit entlang der Jetachse für die verwendeten Netze, zudem der Verlauf von Lesniewski [69], Garmory und Mastorakos [41], Di Veroli [149] und Tieszen et al. [143].

In Abbildung 6.2 sind Stromlinien in einer Ebene, welche die Jetachse enthält, eingefärbt mit dem Geschwindigkeitsbetrag zu sehen. Es ist zu erkennen, wie von Hüllstrom angesaugtes Fluid bereits knapp über dem Staukörper von der Jetströmung mitgerissen wird. Bis zum ersten Drittel ( $z/D \approx 26$ ) des Rechengebietes wird Masse aus dem Hüllstrom vom Jet angesaugt. Weiter stromab wird Masse von der Seite des Rechengebietes angesaugt. Die dreidimensionalen Strukturen, die aus der LES-Rechnung mit 1 Million LES-Zellen hervorgegangen sind, werden durch die Stromlinien gut visualisiert. Besonders deutlich machen dies die Wirbelstrukturen, welche sich in Umfangsrichtung bewegen. Es ist kein Rezirkulationsgebiet über dem Staukörper erkennbar.

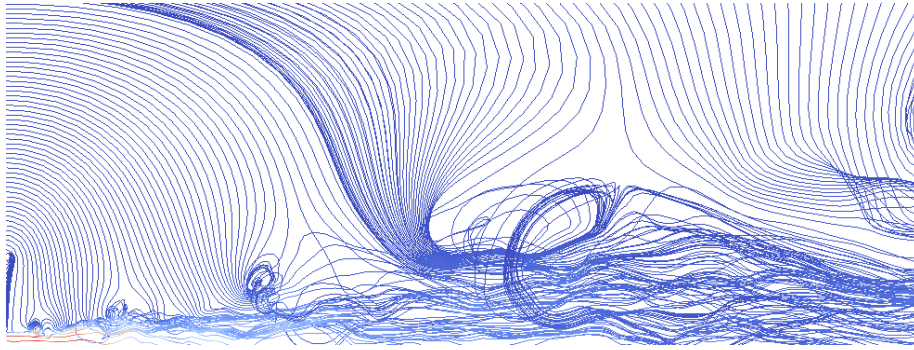


Abbildung 6.2: Stromlinien in einer Ebene, welche die Jetachse enthält, eingefärbt mit dem Geschwindigkeitsbetrag. Die Strömung verläuft von links nach rechts. Der Seitenrand des Rechengebietes befindet sich oberhalb der Schnittlinie der Graphik.

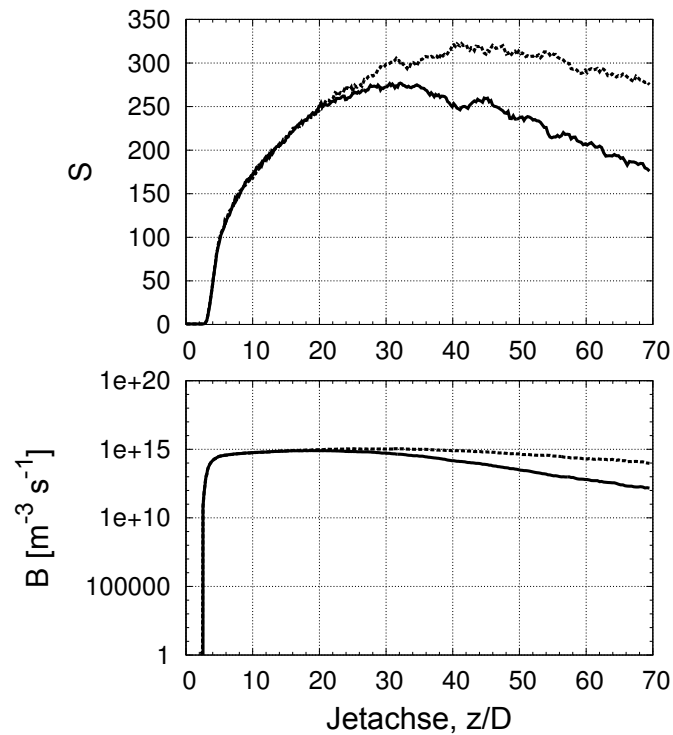
### 6.3 Effekt der Kondensation und Phasenübergangswärme

In diesem Abschnitt soll der Einfluss des Phasenübergangs, welcher den Massenverlust der Gasphase durch den Phasenübergang und die Temperaturerhöhung durch die abgegebene Bindungsenergie berücksichtigt, untersucht werden. Hierfür wurden Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung der kondensierten Masse und der Kondensationswärme durchgeführt. Es wurde das Netz mit 0,5 Millionen LES-Zellen (siehe Abschnitt 5.3),  $N_{MC,min} = 5$  und  $N_{MC,max} = 10$  verwendet. Es wurde der Fall mit dem höchsten Molenbruch DBP ( $X_{DBP} = 5,1 \cdot 10^{-4}$ ) gewählt, da hierbei die Effekte am deutlichsten zu Tage treten. Dies entspricht den Fällen F16 und F17 aus Tabelle 6.1. Wie aus den Ergebnissen in Abschnitt 7.3 hervorgeht, ist zu erwarten, dass diese Effekte mit steigender DBP-Konzentration deutlich zunehmen.

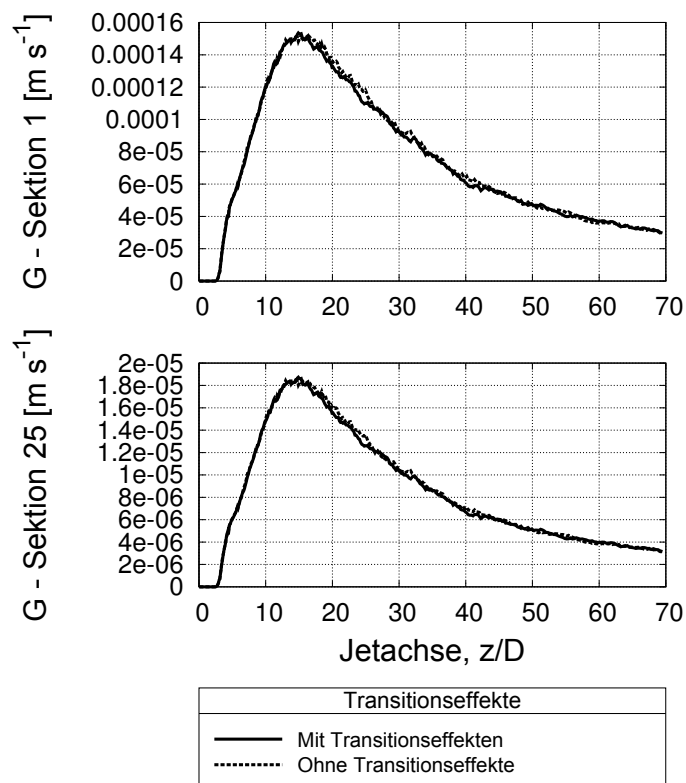
In Abbildung 6.3(a) sind die Sättigung und Nukleationsrate entlang der Jetachse aufgetragen. Der Verlauf der Sättigung entlang der Jetachse ist für beide Rechnungen bis  $z/D \approx 20$  nahezu identisch. Für  $z/D > 20$  sind die Verläufe signifikant unterschiedlich. Während die Sättigung ohne Massenabzug und Berücksichtigung der freigesetzten Bindungsenergie ein Maximum bei  $z/D \approx 42$  mit  $S \approx 320$  bildet, so zeigt der Verlauf der Sättigung unter Berücksichtigung des Massenabzuges ein früheres Maximum bei  $z/D \approx 30$  mit  $S \approx 274$ . Der Abfall des Sättigungswertes nach dem Maximum ist unter Berücksichtigung der Transitionseffekte stärker. Am Ende des Rechengebietes liegt der Sättigungswert aus der Rechnung ohne Berücksichtigung der Transitionseffekte 60% über dem Wert aus der Rechnung mit Berücksichtigung der Transitionseffekte bezogen auf selbigen Wert.

Für die Nukleationsrate ist ebenfalls zu beobachten, dass unter Berücksichtigung der Transitionseffekte die Nukleationsrate deutlich stärker absinkt. Der Vergleich mit der Abweichung der normalisierten Temperatur  $T_{norm} = \frac{T - T_{jet}}{T_{jet} - T_h}$  (siehe Abbildung 6.4(a)) und dem normalisierten Massenbruch des DBP  $Y_{dbp,norm} = \frac{Y_{dbp} - Y_{dbp,jet}}{Y_{dbp,jet} - Y_{dbp,h}}$  (siehe Abbildung 6.4(b)) vom Mischungsbruch  $Z$  in Prozent liefert die Erklärung für dieses

Verhalten. Bei  $z/D \approx 20$  haben die prozentualen Abweichungen des normierten Massenbruchs des DBP erstmals signifikante Werte erreicht. Die Abweichung nimmt im weiteren Verlauf zu. Bis zum Ende der Domain sind 35% der DBP-Masse aus der Gasphase ausgefallen. Der Referenzfall F1 ( $X_{DBP} = 3,6 \cdot 10^{-4}$ ) weist bei  $z/D = 70$  einen Wert von  $\approx 2\%$  auf. Die Temperatur wurde lediglich um 0,6%, im Vergleich zu einer rein diffusiven und konvektiven Änderung angehoben. Dies ist durch den geringen Anteil des DBP an der Gesamtmasse des Fluides zu erklären. Aus dem Vergleich der Beträge wird auch ersichtlich, dass der Massenverlust durch die Phasenumwandlung der Grund für die unterschiedlichen Verläufe der Sättigung, Nukleationsrate und Kondensationsrate aus Rechnungen mit und ohne Phasenumwandlungseffekten ist und die freigesetzte Bindungsenergie eher eine vernachlässigbare Rolle spielt. Die leichten Unterschiede der Kondensationsraten entlang der Jetachse der 1. und 25. Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion der Tropfen (siehe Abbildung 6.3(b)) sind ebenfalls durch die beschriebenen Effekte zu erklären. In den Bereichen  $z/D < 15$  und  $z/D > 45$  ist die Kondensationsrate, unabhängig von den Transitionseffekten, nahezu identisch. Die unterschiedliche räumliche Verteilung der Abweichungen der Kurven aus Rechnungen mit und ohne Berücksichtigung der Transitionseffekte spiegelt erneut die unterschiedliche Sensitivität der Nukleationsrate und der Kondensationsrate von den zugrunde liegenden Größen wider.

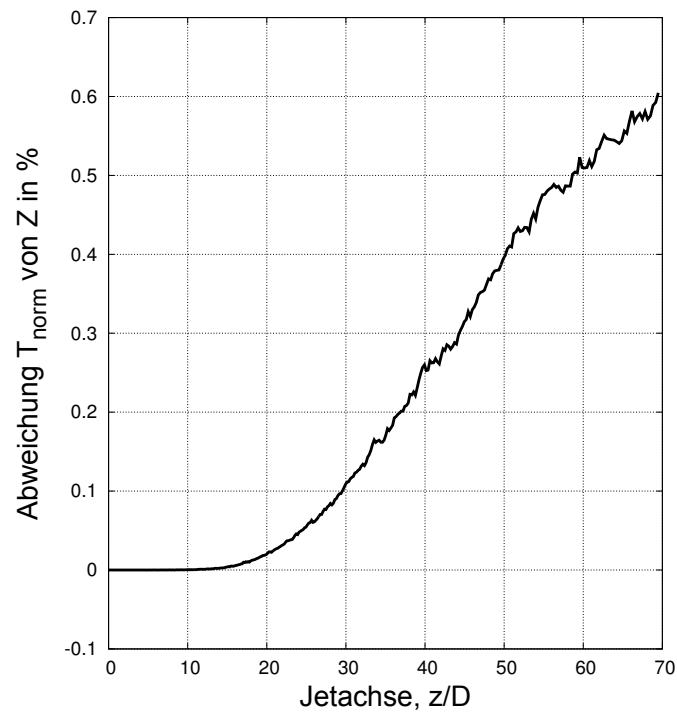


(a) Sättigung und Nukleation entlang der Jetachse

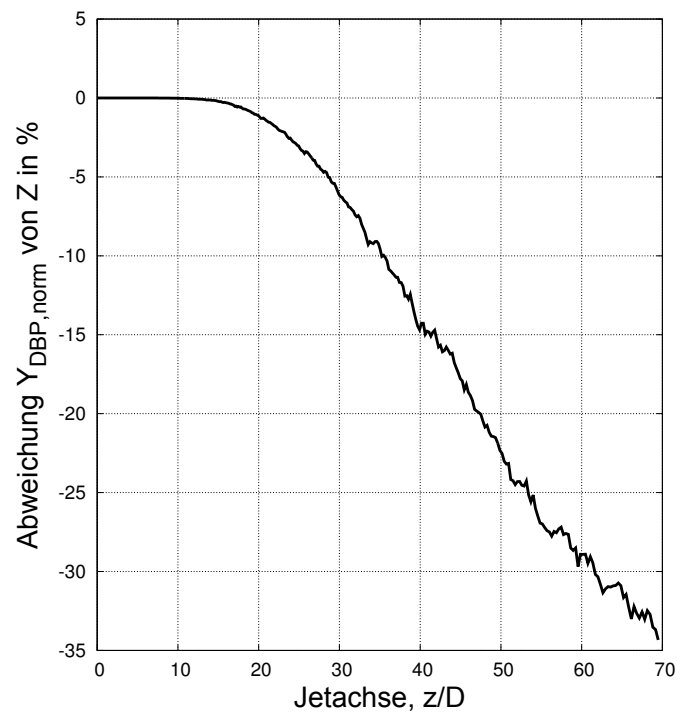


(b) Kondensation der 1. und 25. Sektion entlang der Jetachse

Abbildung 6.3: Sättigung und Nukleationsrate entlang der Jetachse mit und ohne Berücksichtigung der Transitionseffekte



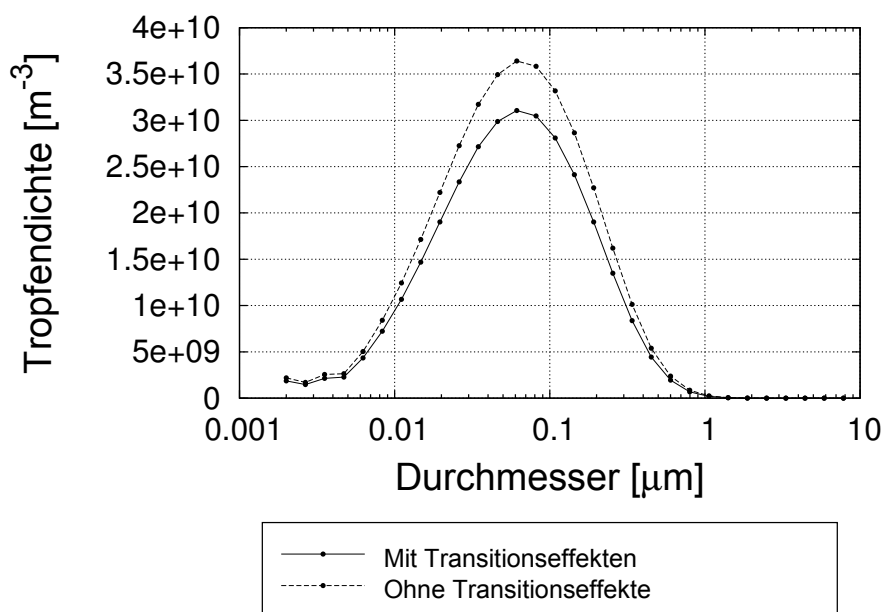
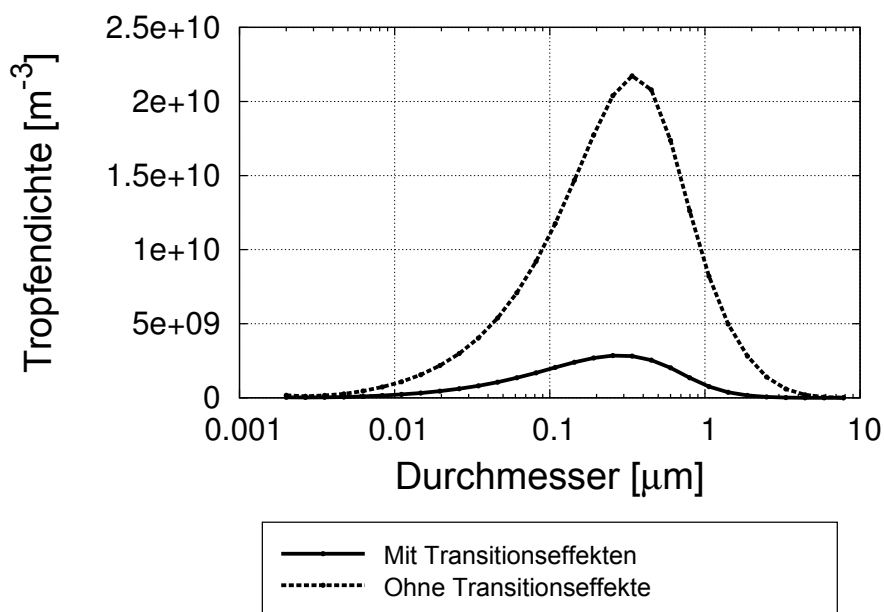
(a) Prozentuale Abweichung der normierten Temperatur vom Mischungsbruch  $Z$  entlang der Jetachse



(b) Prozentuale Abweichung des normierten Massenbruchs  $Y_{DBP}$  vom Mischungsbruch  $Z$  entlang der Jetachse

Abbildung 6.4: Prozentuale Abweichung des normierten Massenbruchs  $Y_{DBP}$  und der normierten Temperatur vom Mischungsbruch  $Z$  entlang der Jetachse unter Berücksichtigung der Transitionseffekte

In den Abbildungen 6.5 ist die Größenverteilungsfunktion über dem Durchmesser an der Stelle  $z/D = 20$  (siehe Abbildung 6.5(a)) und der gesamten Domain (siehe Abbildung 6.5(b)) dargestellt. Es ist ersichtlich, dass ohne Berücksichtigung der Transitionseffekte deutlich mehr und größere Tropfen gebildet werden. Der Vergleich der gezeigten Größenverteilungsfunktionen verdeutlicht nochmals den räumlichen Verlauf des Massenverlustes von DBP aus der Gasphase. Während die Unterschiede der Partikel-Anzahl bei  $z/D = 20$  einige Prozent betragen, sind die Unterschiede für die Größenverteilungsfunktion aus dem gesamten Rechengebiet mehr als eine Größenordnung. Das Maximum der Verteilungsfunktion ist jeweils bei sehr ähnlichem Partikeldurchmesser gelegen und spiegelt die relativ geringe Auswirkung der kondensierten Masse auf die Kondensationsrate wider.

(a) Größenverteilungsfunktion über dem Durchmesser bei  $z/D = 20$ 

(b) Größenverteilungsfunktion über dem Durchmesser der gesamten Rechendomains

Abbildung 6.5: Größenverteilungsfunktion über dem Durchmesser bei  $z/D = 20$  und der gesamten Rechendomains mit und ohne Berücksichtigung der Transitionseffekte

In Abbildung 6.6 ist das nullte Moment der Größenverteilungsfunktion entlang der Achse mit und ohne Berücksichtigung der Transitionseffekte dargestellt. Das Verhalten entspricht dem der Nukleationsrate. Der Effekt des Massenverlustes wird



bei  $z/D = 20$  deutlich sichtbar (man beachte die logarithmische Auftragung) und übersteigt am Ende des Rechengebietes mehr als eine Größenordnung.

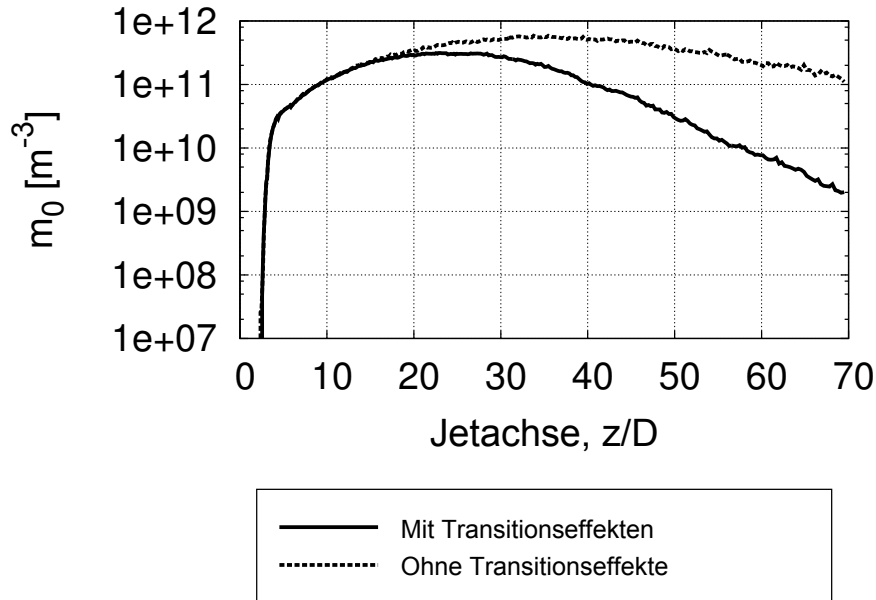


Abbildung 6.6:  $m_0$  entlang der Jetachse mit und ohne Berücksichtigung der Transitionseffekte

Die Effekte der freigesetzten Bindungsenergie sind bei den durchgeführten Rechnungen vernachlässigbar. Die Effekte des Massenverlustes des DBP aus der Gasphase führen zu erheblichen Unterschieden in der Nukleationsrate, der Größenverteilungsfunktion und deren nulltem Moment. Die Unterschiede übersteigen eine Größenordnung und es ist anzunehmen, dass diese für höhere DBP-Konzentrationen erheblich stärker ausfallen. Durch den Abzug der kondensierten Masse aus der Gasphase findet eine Kopplung aller relevanten Größen statt. Wird z. B. die DBP-Konzentration erhöht (siehe Abschnitt 7.3), so führt dies zu einer höheren Nukleationsrate. Durch eine erhöhte Nukleationsrate bilden sich mehr Tropfen, wodurch mehr DBP ausfällt. Die kondensierte Masse ist proportional zur Anzahl der Tropfen, daher kondensiert mehr Masse. Beide Effekte führen zu einer starken Abnahme von DBP in der Gasphase, was die Nukleationsrate sogar unter die Rate deutlich niedrigerer Anfangskonzentrationen von DBP senken kann (s. Abschnitt 7.3). Die Transitionseffekte beeinflussen daher die Größenverteilungsfunktion und deren Momente stark.

## 6.4 Evaluierung der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle

Wie in Abschnitt 4.1.3 beschrieben, stehen mehrere Varianten, basierend auf zwei verschiedenen Ansätzen, zur Kontrolle der MC-Partikel-Zahl zur Verfügung. Aufgrund der Eigenschaften der verwendeten Mischungsmodelle wurden LES-Zell-

basierte Mechanismen verwendet. In diesem Abschnitt werden die für die durchgeführten Simulationen am besten geeigneten Methoden untersucht. Hierfür wurden die Fälle F5 und F21 aus Tabelle 6.1 verwendet. Für beide Fälle wurden zusätzlich Rechnungen ohne Mischungsmodell durchgeführt, um die Eigenschaften der verwendeten Populationskontrollen unverfälscht betrachten zu können.

Auf Ensemble-Ebene lieferte die Methode mit gewichteter Löschwahrscheinlichkeit in Kombination mit einer gewichteten Neuverteilung der gelöschten Gewichte die besten Ergebnisse (alternative MC-Partikel-Zahl-Kontrolle, Rechnung F21). Die MC-Partikel-Zahl-Kontrolle mit Informationserhalt der einzelnen MC-Partikel mit Informationsübertrag auf zwei verbleibende Partner liefert die besten Ergebnisse bei Operationen mit den einzelnen Realisierungen. Die Simulation mit dem Kürzel F5 wurde mit diesem Algorithmus durchgeführt.

### 6.4.1 Vergleich der MC-Partikel-Zahl-Kontroll-Algorithmen

In Abbildung 6.7(a) ist der Mischungsbruch entlang der Jetachse der Rechnungen F5 und F21 aufgetragen. Bei beiden Rechnungen wurde das Mischungsmodell abgeschaltet, um die Eigenschaften der Besetzungszahlkontrolle unverfälscht beobachten zu können. Da der gewichtete Mittelwert des Mischungsbruches bei der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle nach Gleichung 4.2 explizit erhalten wird, stammen die Unterschiede des gemittelten Mischungsbruches entlang der Jetachse aus der Umverteilung der Gewichte der gelöschten Partikel entsprechend der alternativen MC-Partikel-Zahl-Kontrolle. Betrachtet man die prozentualen Unterschiede der Mischungsbrüche, bezogen auf den unverfälschten Mittelwert in Abbildung 6.7(b), so ist augenscheinlich, dass die Kontrolle auf Ensemble-Ebene im Bereich  $5 < z/D < 20$  einen bis zu 25% höheren Mischungsbruch liefert. Da durch die Forderung nach einer konstanten MC-Partikel-Zahl pro LES-Zelle und die deutlich größeren LES-Zellen über dem Hüllstrom die MC-Partikel aus dem Hüllstrom schwerer sind als die aus dem Jet, werden durch den alternativen Algorithmus bevorzugt MC-Partikel aus dem Hüllstrom gelöscht. Durch diese Präferenz werden bevorzugt MC-Partikel mit niedrigem Mischungsbruch ( $Z = 0$  im Hüllstrom) gelöscht. Die gewichtete Umverteilung der Gewichte der gelöschten MC-Partikel kann die Änderung des Mittelwertes zwar abschwächen, aber nicht vollständig ausgleichen, wodurch sich der höhere Mischungsbruch erklären lässt.

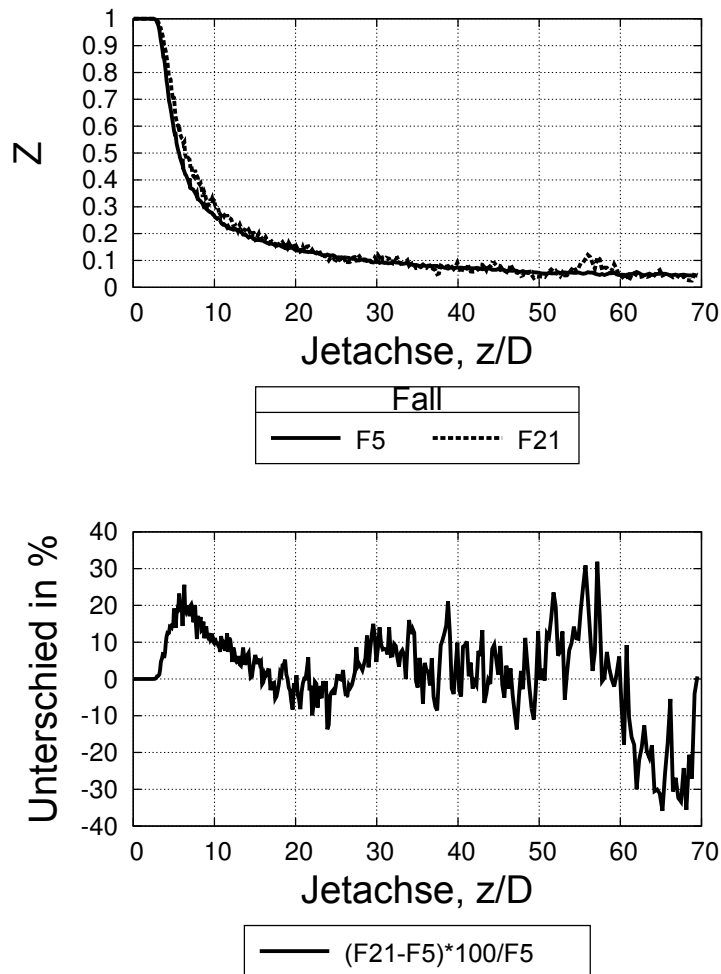


Abbildung 6.7: Mischungsbruch entlang der Jetachse aus Rechnungen mit unterschiedlicher MC-Partikel-Populationskontrolle

In Abbildung 6.8 sind die Sättigung und die Nukleationsrate entlang der Jetachse der Rechnungen F5 und F21 unter Verwendung des MCD-Mischungsmodells dargestellt sowie die prozentualen Unterschiede. Die untersuchten Modelle zur Populationskontrolle liefern vergleichbare Ergebnisse. Es ist augenscheinlich, dass die Fluktuationen der Sättigung durch die alternative MC-Partikel-Zahl-Kontrolle zu höheren Fluktuationen führen, was durch die hoch sensitiven Abhängigkeiten der abhängigen Größen von der zugrunde liegenden Skalarverteilung und die Eigenschaften der alternativen MC-Partikel-Zahl-Kontrolle zu erklären ist. Durch ein leicht unterschiedliches Einsetzen der Nukleation und hoher Sättigungswerte gibt es hohe Abweichungen der Werte im Bereich des aufbrechenden Jets. Die Unterschiede der Sättigung schwanken im weiteren Verlauf mit einer Amplitude von bis zu 18% um den Nullpunkt.

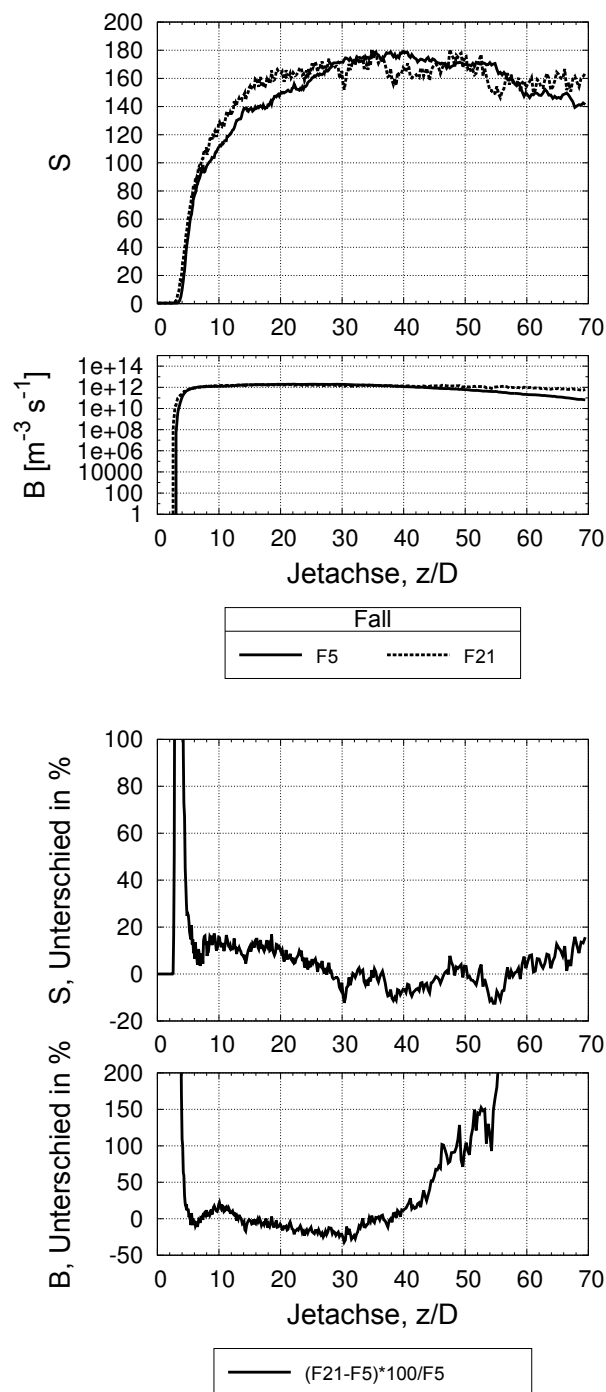


Abbildung 6.8: Sättigung und Nukleationsrate entlang der Jetachse aus Rechnungen mit unterschiedlicher MC-Partikel-Zahl-Kontrolle sowie prozentuale Unterschiede

Betrachtet man die Kurvenverläufe des nullten Moments entlang der Jetachse in Abbildung 6.9, so fällt der unterschiedliche Kurvenverlauf auf. Der Verlauf der Rech-

nung F21 zeigt kein eindeutiges Maximum und liegt um über 50% unter den Werten der Rechnung F5. Der Verlauf der Kurve aus der Rechnung F5 zeigt ein Maximum und die Kurve fällt zum Ende des Rechengebietes deutlich ab. Trotz höherer Nukleationsrate des Falls F21 im Bereich  $6 < z/D < 14$  liegt das nullte Moment deutlich unter dem aus der Rechnung F5. Dies verdeutlicht den Einfluss der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle auf die untersuchten Größen. Die Unterschiede stammen nicht nur von unterschiedlichen Nukleationsraten, sondern auch von der Umverteilung der Gewichte in der Rechnung F21, welche die gemittelten Tropfenzahlen in einer LES-Zelle direkt ändert.

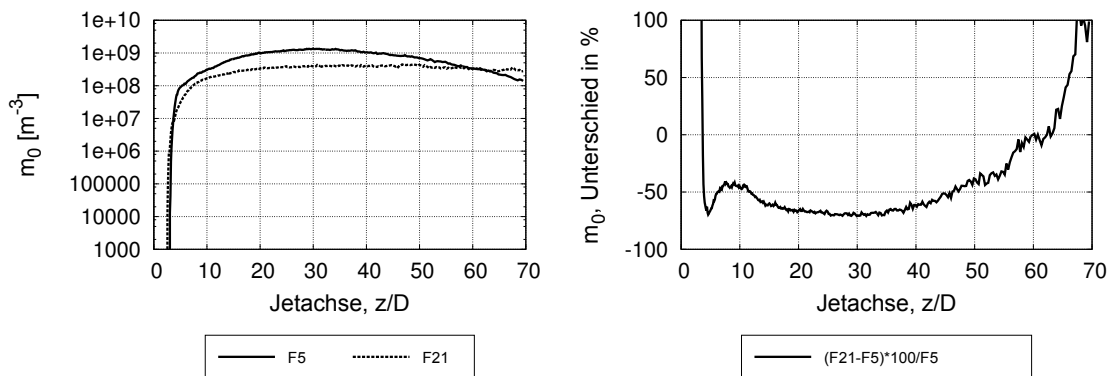


Abbildung 6.9: Nulltes Moment entlang der Jetachse aus Rechnungen mit unterschiedlicher MC-Partikel-Zahl-Kontrolle sowie prozentuale Unterschiede

Es ist zu erwarten, dass die Kontrolle auf Ensemble-Ebene für eine deutlich höhere Anzahl von MC-Partikeln, oder in Fällen in denen das Gewicht nicht mit einer bestimmten Information verknüpft ist, den Mittelwert nahezu unverändert lässt. Da dies in den durchgeführten Simulationen nicht realisierbar ist, wurde die Besetzungszahlkontrolle verwendet, welche im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Im folgenden Abschnitt wird der Einfluss der Besetzungszahlkontrolle abgeschätzt.

### 6.4.2 Einfluss der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle

Wie in Abschnitt 4.1.3 beschrieben, wurde eine Kontrollfunktion zum MC-Partikel-Management implementiert, welche die Information des zu löschenden MC-Partikels auf zwei verbleibende MC-Partikel überträgt. Aufgrund der begrenzten Anzahl von Variablen konnten nur das Gewicht, der Mittelwert des Mischungsbruches, der Mittelwert der Tropfenzahl pro Masse sowie deren Varianz ( $W, \bar{Z}, \frac{\bar{N}}{\rho}, \sigma_{\frac{N}{\rho}}$ ) bei der Informationsübertragung erhalten werden. Da durch die Effekte des Phasenübergangs die Temperatur und der Massenbruch des DBP nicht mehr linear vom Mischungsbruch abhängen (siehe Abschnitt 6.3), findet durch die Umverteilung des Gewichts eine Änderung des Mittelwertes und der Varianz statt. Die Effekte sollen im Folgenden betrachtet werden. Hierfür wurden Daten aus der konvergierten Rechnung mit 1

Million LES-Zellen,  $N_{MC,min} = 5$  und  $N_{MC,max} = 10$  generiert. Dies entspricht dem Fall F3 aus Tabelle 6.1.

In Abbildung 6.10 sind die zeitlich gemittelten Änderungen des LES-Zell-Mittelwertes vom Mischungsbruch, der Temperatur und  $Y_{dbp}$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  aufgetragen. Um die Änderung durch den Eingriff der Populationskontrolle zu ermitteln, wurden die LES-Zell-Mittelwerte (s. Gleichung 4.2) der untersuchten Größen vor und nach dem Eingriff der Kontrolle ermittelt und die resultierende prozentuale Abweichung berechnet. Da die Kontrollfunktion unregelmäßig eingreift und die Varianz des Prozesses hoch ist, weisen die Kurvenverläufe auch nach langer Mittlungszeit noch Unstetigkeiten auf. Die Mittlung wurde über 0,3 Sekunden durchgeführt und die Kurvenverläufe stellen somit charakteristische Eigenschaften der Kontrollfunktion dar. Der gewichtete LES-Zell-Mittelwert vom Mischungsbruch ist im Rahmen der numerischen Genauigkeit erhalten. Da die Temperatur und der Massenbruch des DBP durch die Effekte des Phasenübergangs nicht mehr linear vom Mischungsbruch abhängen und dieser Unterschied mit steigendem Abstand von der Düse zunimmt, zeigen die Änderungen der gemittelten LES-Zell-Werte eine deutlich höhere Änderung durch den MC-Partikel-Zahl-Kontroll-Algorithmus. Die Änderungen des Mittelwertes der Temperatur sind deutlich niedriger als die des Massenbruchs von DBP, was durch die geringe Erwärmung des Fluids durch den Phasenübergang und deutlich größere Änderungen des Massenbruchs von DBP zu erklären ist. Das Verhalten über dem Radius spiegelt die Lokalisierung des Eingreifens der Kontrollfunktion in der Scherschicht wider.

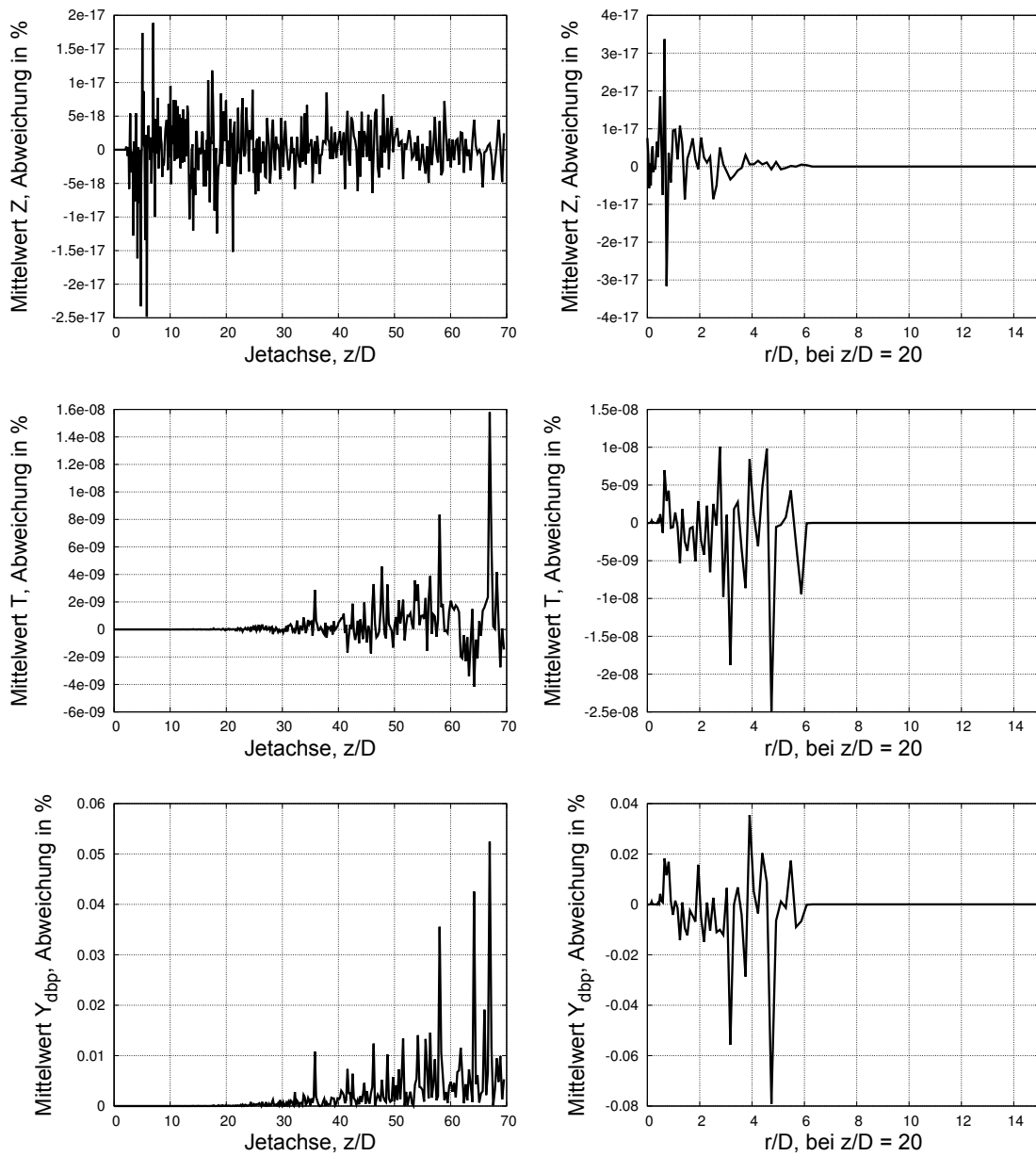


Abbildung 6.10: Zeitlich gemittelte Änderung des LES-Zell-Mittelwertes von Z (Oben), T (Mitte) und  $Y_{dbp}$  (Unten) entlang der Jetachse (links) und über dem Radius bei  $z/D = 20$  (rechts)

In Abbildung 6.11 sind die zeitlich gemittelten Änderungen der Varianz der LES-Zell-Werte vom Mischungsbruch, der Temperatur und  $Y_{dbp}$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  aufgetragen. Da die Varianzen nicht explizit erhalten werden, sind die prozentualen Änderungen deutlich höher als beim Mittelwert des Mischungsbruchs. Durch die Wahl der nächsten Nachbarn im Mischungsbruchraum wird die Varianzänderung des Mischungsbruchs aber minimiert. Erneut spiegelt sich die Abweichung der Temperatur und des Massenbruchs des DBP vom Mischungsbruch in der Höhe der prozentualen Abweichung wider. Die maximale Änderung der Varianz durch die Kontrollfunktion findet sich erneut für  $Y_{dbp}$  und beträgt ca. 2%.



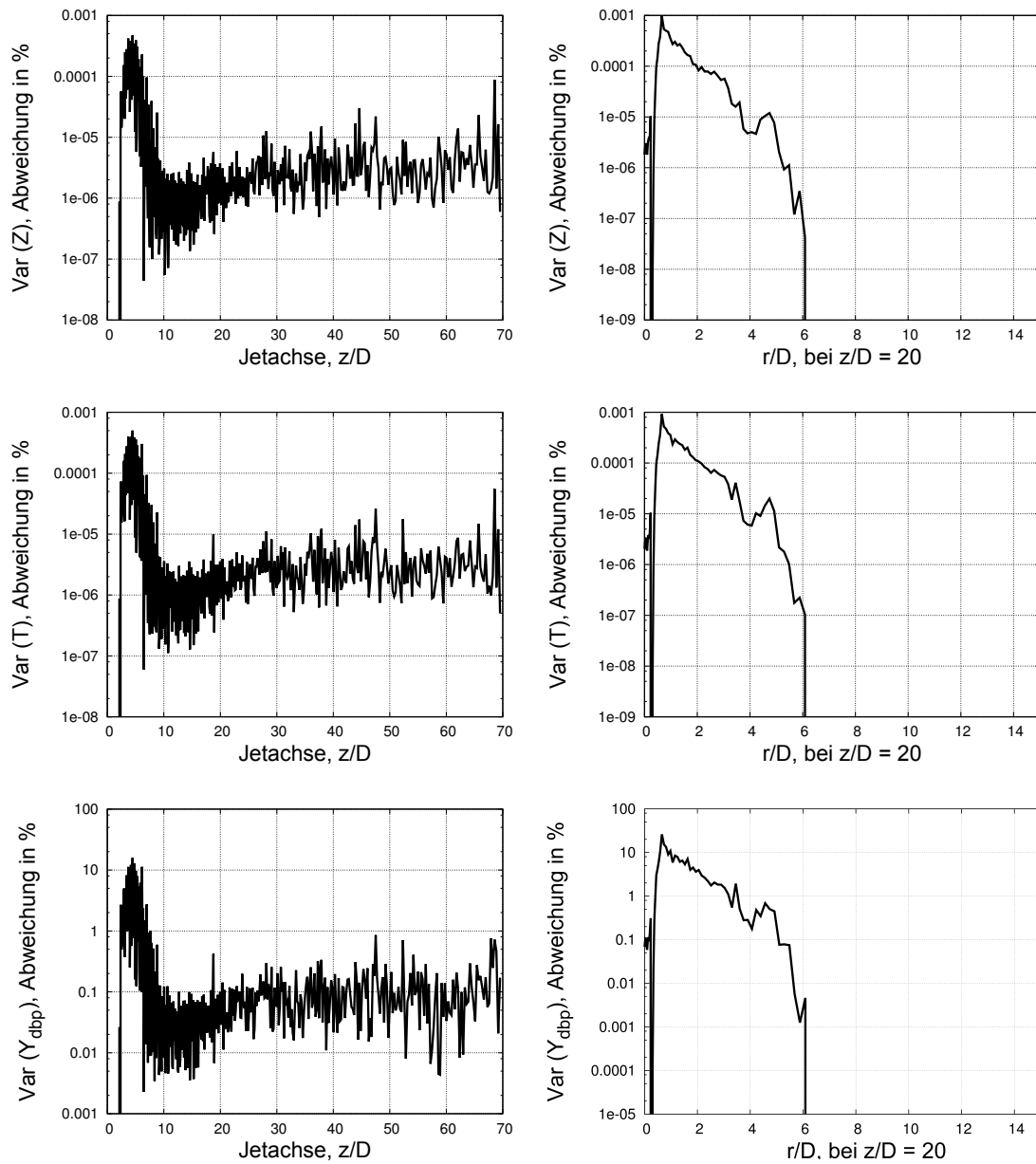


Abbildung 6.11: Zeitlich gemittelte Änderung der Varianz bezogen auf die LES-Zelle von Z (Oben), T (Mitte) und  $Y_{dbp}$  (Unten) entlang der Jetachse (links) und über dem Radius (rechts) bei  $z/D = 20$

In Tabelle 6.5 sind die gemittelten prozentualen Änderungen aus dem gesamten Rechengebiet der betrachteten Größen durch die in Abschnitt 4.1.3 beschriebene Operation des Löschvorgangs aufgelistet. Es wurden mehr als 100000 Vorgänge erfasst und der Mittelwert der prozentualen Änderung gebildet, daher können die Daten als repräsentativ betrachtet werden. Die durchschnittliche Änderung der Varianz des Mischungsbruches  $Z$  beträgt 0,000365%. Die gemittelte prozentuale Änderung der mittleren Temperatur  $\bar{T}$  ist mit  $6.52 \cdot 10^{-17}$  sehr gering und erklärt sich durch die geringe Abweichung der Temperatur vom Mischungsbruch (siehe Abschnitt 6.3). Für den Massenbruch des DBP ist der Wert erwartungsgemäß höher, aber mit 0,05% immer noch gering. Die Varianzänderung von  $Y_{dbp}$  ist mit 0,49% erwartungsgemäß höher als die Varianzänderung von  $T$  mit 0,000367%.

Obwohl die Änderungen durch die Kontrollfunktion gering sind, ist die Auswirkung auf die Nukleationsrate, aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeiten wahrscheinlich deutlich größer. Da ohne die Kontrollfunktion keine Ergebnisse mit LES-PDF-Simulationen erzielt werden konnten, kann der absolute Einfluss jedoch nicht abgeschätzt werden.

Tabelle 6.5: Effekte der Populationskontrolle auf die Mittelwerte der durch die MC-Partikel transportierten Skalare und deren Varianz

Größe	$\Delta$ in %
Var( $Z$ )	0,000365
$\bar{T}$	$6.52 \cdot 10^{-17}$
Var( $T$ )	0,000367
$\bar{Y}_{dbp}$	0,05
Var( $Y_{dbp}$ )	0,49

## 6.5 Unabhängigkeitsstudien

Um die Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Anzahl der Stützstellen beim Lösen der diskretisierten Gleichungen zu gewährleisten, wurden Simulationsreihen mit sukzessiver Verfeinerung der Auflösung in jeweils einer Dimension durchgeführt bis die Ergebnisse sich qualitativ nicht mehr änderten. Hierbei wurden die LES-Netz-Auflösung, die Anzahl der MC-Partikel und die Auflösung der Größenverteilungsfunktion untersucht. Die Ergebnisse dieses Abschnitts begründen die Wahl der verwendeten Auflösungen für die Simulationen, deren Ergebnisse in den Abschnitten 7.1 und 7.2 zu betrachten sind.

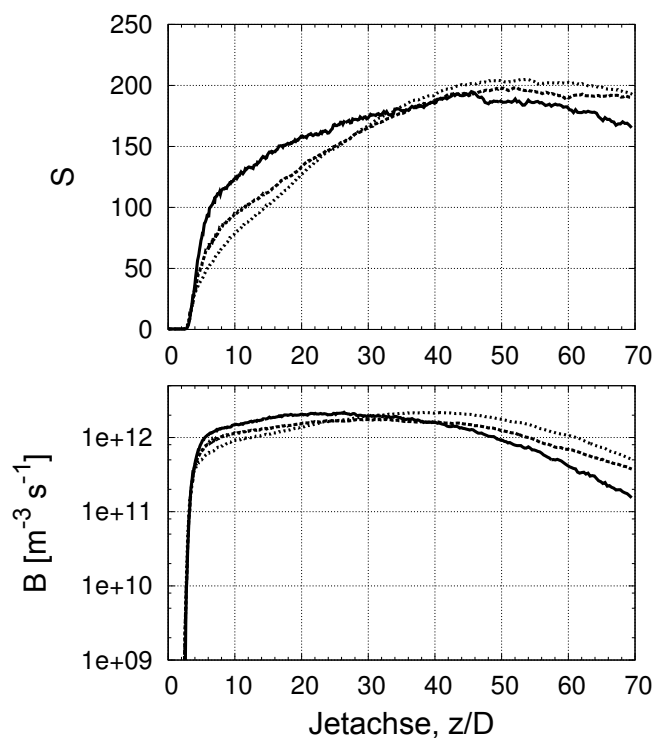
### 6.5.1 LES-Auflösung

Um die Unabhängigkeit der LES-Netz-Auflösung zu untersuchen, wurden Simulationen mit  $X_{dbp} = 3,6 \cdot 10^{-4}$ ,  $N_{MC,min} = 5$  und  $N_{MC,max} = 10$  durchgeführt. Es wurden die LES-Netz-Auflösungen von 0,5 Millionen LES-Zellen, 1 Million LES-Zellen und

1,5 Millionen LES-Zellen untersucht. Dies entspricht den Fällen F2, F4 und F5 aus Tabelle 6.1.

Wie bereits in Abschnitt 6.2 dargelegt, weisen die gemittelten Geschwindigkeiten entlang der Jetachse für die LES-Netze mit 0,5 und 1 Millionen LES-Zellen geringe Unterschiede auf. Die Kurvenverläufe der Netze mit 1 und 1,5 Millionen LES-Zellen sind nahezu identisch und es kann davon ausgegangen werden, dass das Netz mit 1 Million LES-Zellen genügend Stützstellen bereit stellt, um das Geschwindigkeitsfeld adäquat zu berechnen. Im Folgenden wird daher das Verhalten der nichtlinear abhängigen Größen bei Verfeinerung des LES-Netzes betrachtet.

In den Abbildungen 6.12(a) und 6.12(b) sind die Sättigung und Nukleationsrate entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  zu betrachten. Es ist augenscheinlich, dass die Kurvenverläufe aus der Rechnung mit 0,5 Millionen LES-Zellen sich qualitativ von den Verläufen der Kurven aus Rechnungen mit höherer LES-Netz-Auflösung unterscheiden. Die Sättigung steigt für alle untersuchten Fälle nach Aufbrechen des Jets entlang der Achse steil an. Der Anstieg flacht jedoch bei den höheren Auflösungen bei  $S \approx 50$  und  $z/D \approx 5$  ab und erreicht ein Plateau von  $S \approx 200$  bei  $z/D \approx 45$ . Die Sättigung aus der Rechnung mit 0,5 Millionen LES-Zellen behält den sehr steilen Anstieg bis zu einem Wert von  $S \approx 120$  bei  $z/D \approx 8$  bei, um nach einem flacheren Anstieg einen Maximalwert von  $S \approx 190$  bei  $z/D \approx 45$  zu bilden. Das räumliche Verhalten der Sättigungswerte entlang der Jetachse ist für die Fälle mit 1 und 1,5 Millionen LES-Zellen qualitativ ähnlich. Die maximale Differenz der Sättigung aus den Rechnungen mit 1 und 1,5 Millionen LES-Zellen, bezogen auf die Daten des Falls mit 1,5 Millionen LES-Zellen, beträgt 30%. Derart hohe Beiträge der prozentualen Abweichung finden sich unmittelbar nach dem Aufbrechen des Jets. Die gemittelte betragsmäßige Abweichung entlang der Jetachse beträgt 8%. Das ansteigende Verhalten der Nukleationsraten entspricht dem der Sättigung, der Maximalwert der Rechnung mit der geringsten Auflösung tritt jedoch deutlich früher zu Tage und der Wert fällt zum Ende des Rechengebietes deutlich ab. Der initiale Anstieg der Nukleationsrate unmittelbar nach dem Aufbrechen des Jets ist zunächst für alle LES-Auflösungen nahezu identisch. Die Verläufe der Nukleation entlang der Jetachse aus den Rechnungen mit den höheren Auflösungen flachen früher ab als die Kurve aus der Rechnung mit niedrigster Auflösung. Im Bereich  $z/D > 40$  verlaufen die Kurven nahezu parallel mit gering unterschiedlichen Werten. Marginale Unterschiede im Einsetzen des Nukleationsprozesses führen zu hohen maximalen prozentualen Abweichungen (100%) zwischen den feinst aufgelösten Rechnungen. Die gemittelte betragsmäßige Abweichung, bezogen auf die Daten des Falls mit 1,5 Millionen LES-Zellen, entlang der Jetachse beträgt 19%. Die Analyse der radialen Verläufe der Sättigung und Nukleation (siehe Abbildung 6.12(b)) zeigt für die Rechnung mit höchster Auflösung ein qualitativ ähnliches räumliches Verhalten. Der Anstieg der Sättigung und Nukleation in radialer Richtung verläuft nahezu parallel. Die Werte der Sättigung unterscheiden sich auf der Jetachse um 6%, die der Nukleation um 14%. Die Verläufe aus der groben Rechnung zeigen für die Sättigung nur eine schwache Senke auf der Jetachse und die Nukleationsrate bildet auf der Achse ein lokales Maximum und zeigen nicht den qualitativen Verlauf der feineren Rechnungen.



(a) Sättigung und Nukleation entlang der Jetachse

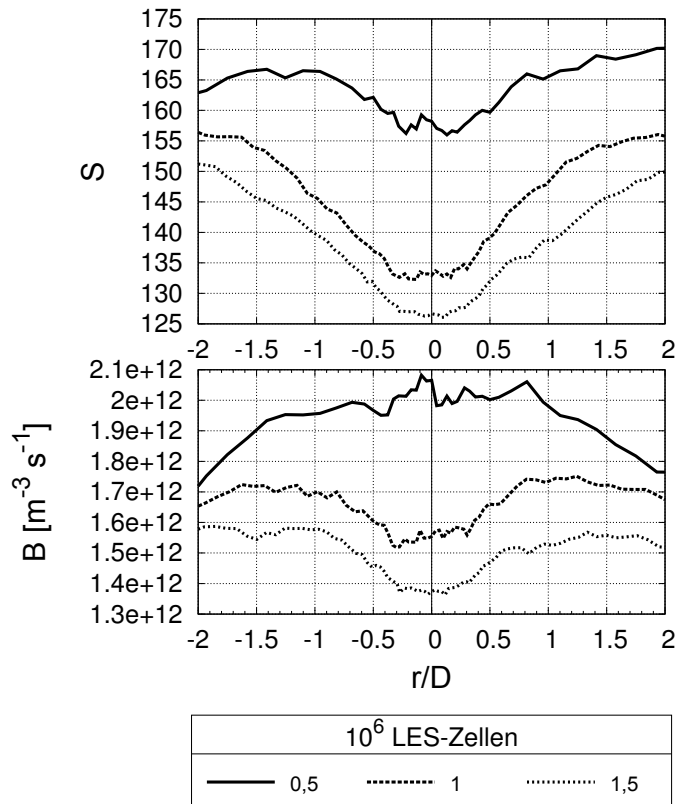
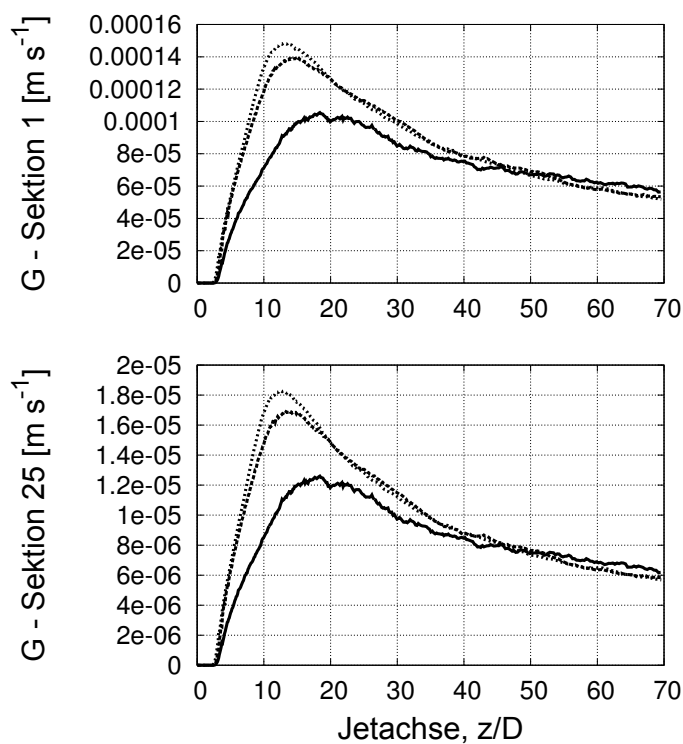
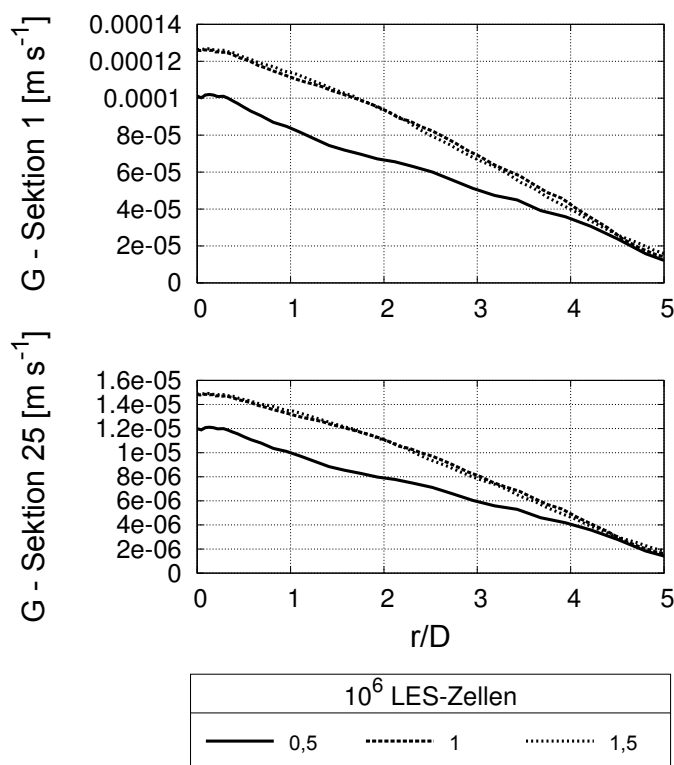
(b) Sättigung und Nukleation über  $r/D$  bei  $z/D = 20$ 

Abbildung 6.12: Sättigung und Nukleationsrate für verschiedene LES-Netze entlang der Jetachse und über dem Radius

Betrachtet man die Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion entlang der Jetachse in Abbildung 6.13(a), so ist abermals das qualitativ ähnliche Verhalten der feinsten Rechnungen offensichtlich. Im Bereich  $8 < z/D < 18$  liefert die Rechnung mit 1,5 Millionen LES-Zellen bis zu 16% höhere Werte als die Rechnung mit 1 Million LES-Zellen. Die gemittelte betragsmäßige Abweichung, bezogen auf die Daten des Falls mit 1,5 Millionen LES-Zellen entlang der Jetachse beträgt 5%. Der Verlauf der Kurve aus der Rechnung mit 0,5 Millionen LES-Zellen unterscheidet sich stark von den Verläufen der Kurven aus den feiner aufgelösten Rechnungen. Ebenso verhält es sich mit der Kondensationsrate entlang des Radius in Abbildung 6.13(b). Die Verläufe aus den feinsten Rechnungen sind nahezu identisch.



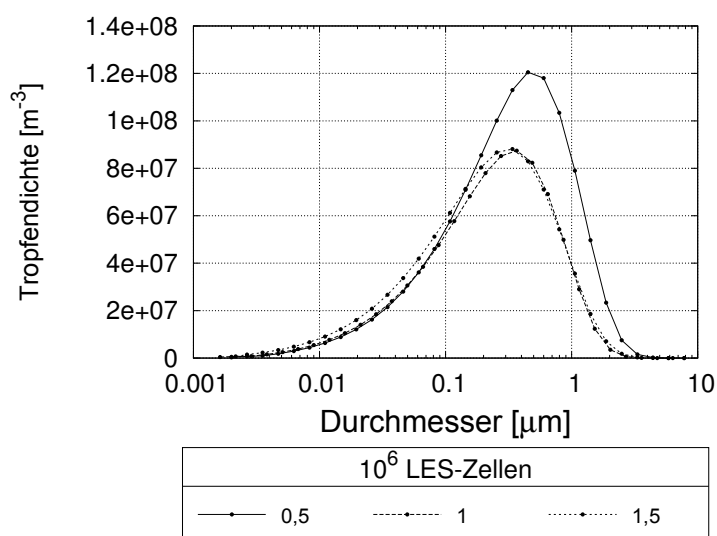
(a) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion entlang der Jetachse



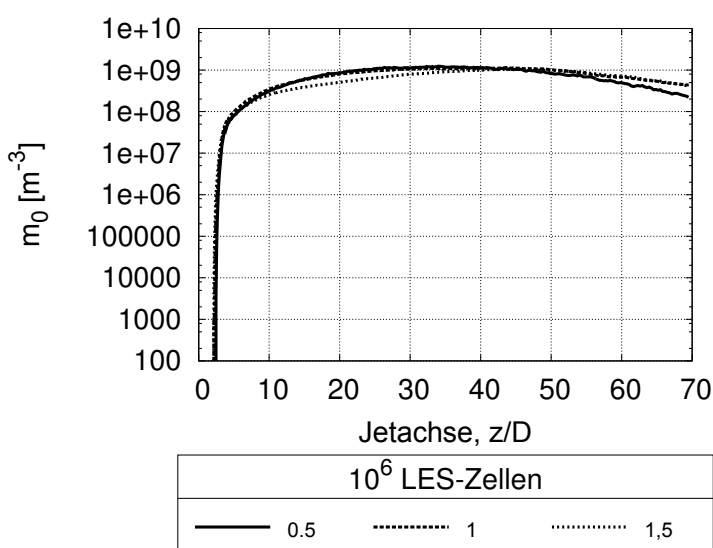
(b) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion über  $r/D$  bei  $z/D = 20$

Abbildung 6.13: Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion für verschiedene LES-Netze entlang der Jetachse und über dem Radius

In Abbildung 6.14(a) ist die Größenverteilungsfunktion für die unterschiedlichen LES-Netz-Auflösungen aus dem gesamten Rechengebiet dargestellt. Der Verlauf aus der größten Rechnung unterscheidet sich in Form, Maximalwert und Stelle des Maximums deutlich von den feineren Rechnungen. Die Rechnungen mit 1 Million und 1,5 Millionen LES-Zellen liefern sehr ähnliche Kurvenformen mit 8% Unterschied im Maximalwert bezogen auf die Daten des Falls mit 1,5 Millionen LES-Zellen und nahezu identischen Tropfendurchmessern des Maximums. Das nullte Moment der verschiedenen Rechnungen zeigt für den Bereich  $10 < z/D < 35$  leichte Unterschiede für die Rechnungen mit den feinsten Auflösungen. Im weiteren Verlauf sind die Kurven parallel und die Differenz beträgt weniger als 10%, bezogen auf die Daten des Falls mit 1,5 Millionen LES-Zellen. Durch das leicht unterschiedliche Einsetzen der Nukleation entstehen maximale Abweichungen von 100%, die gemittelte betragsmäßige Abweichung entlang der Jetachse beträgt 31%.



(a) Größenverteilungsfunktion aus dem gesamten Rechengebiet



(b) Nulltes Moment entlang der Jetachse

Abbildung 6.14: Größenverteilungsfunktion aus dem gesamten Rechengebiet und nulltes Moment entlang der Jetachse für verschiedene LES-Netze

Aufgrund der gewonnenen Erkenntnisse kann davon ausgegangen werden, dass die Rechnung mit 1 Millionen LES-Zellen genügend Stützstellen zur Lösung der Eulergleichungen bereit stellt. Die aus den MC-Partikel-Daten gewonnenen Informationen zeigen qualitativ gleiches Verhalten für die feinsten Rechnungen. Die quantitativen Unterschiede zeigen nicht vernachlässigbare Abweichungen. In Anbetracht der Unsicherheiten der experimentellen Daten und des hohen Rechenaufwandes für die Netze mit 1 Million und mehr LES-Zellen sowie dem Anspruch der Studie die physikalisch korrekte Umsetzung der LES-PDF-MC-Partikel-Methode zu demonstrieren, ohne



Anspruch auf absolute Korrektheit der Ergebnisse, ist das 1 Million LES-Zellen-Netz durch die qualitative Ähnlichkeit der Daten bei weiterer Erhöhung der Zellzahl für weitere Studien von ausreichender Feinheit.

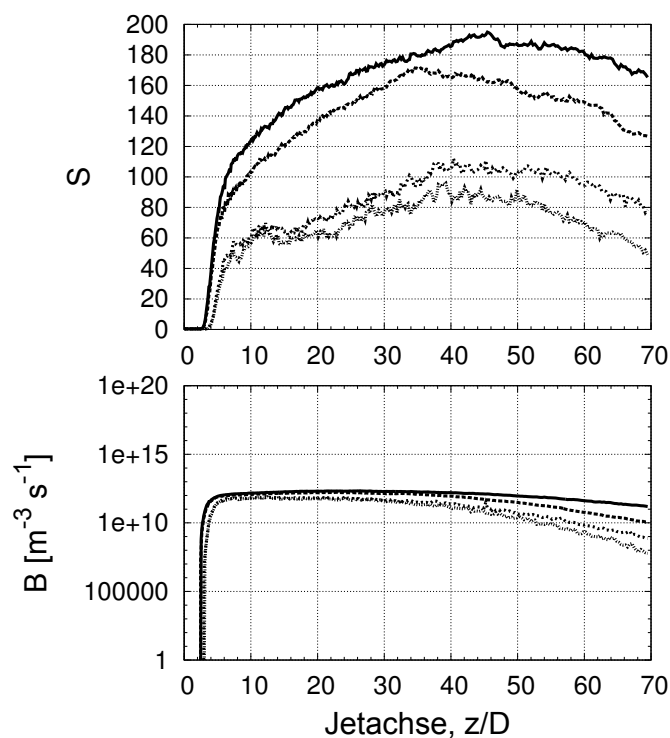
## 6.5.2 Lagrange Auflösung

Um die Unabhängigkeit der Lagrange-Auflösung zu untersuchen, wurden Simulationen mit  $X_{dbp} = 3,6 \cdot 10^{-4}$ , der LES-Netz-Auflösungen mit 0,5 Million LES-Zellen und unterschiedlichen MC-Partikel-Anzahlen durchgeführt. Die Anzahl der MC-Partikel wurde erhöht bis die Ergebnisse qualitativ übereinstimmten und die quantitativen Unterschiede wenige Prozent betragen. Für diese Studie werden die Fälle F5, F8, F9 und F10 aus Tabelle 6.1 herangezogen. Die Kontrollparameter zur MC-Partikel-Zahl-Kontrolle sind nochmals in Tabelle 6.6 aufgeführt.

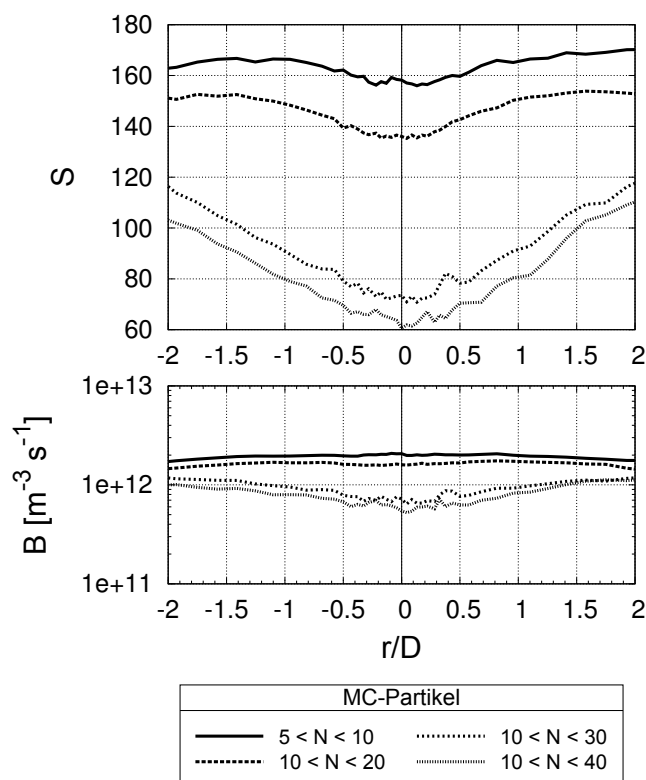
Tabelle 6.6: Kontrollparameter für die MC-Partikel-Injektion und Besetzungszahlkontrolle

Name	$N_{MC,min}$	$N_{MC,in}$	$N_{MC,max}$
F5	5	7	10
F8	10	15	20
F9	10	20	30
F10	10	25	40

In Abbildung 6.15(a) sind die Sättigung und Nukleationsrate entlang der Jetachse zu betrachten. Die Kurvenverläufe aus den Rechnungen F5 und F8 ähneln sich in der Form. Selbiges gilt für die Rechnungen F9 und F10. Bei den Rechnungen F5 und F8 steigen die Sättigung und Nukleation bei  $z/D \approx 2.5$  steil an. Der Anstieg der Sättigung flacht bei der Rechnung F5 bei  $z/D \approx 6$  ab, erreicht einen Maximalwert von  $S \approx 195$  bei  $z/D \approx 45$  und fällt weiter stromab wieder. Der Verlauf der Sättigung der Rechnung F8 verhält sich sehr ähnlich. Der Maximalwert der Sättigung stellt sich jedoch früher, bei  $z/D \approx 35$ , mit einem niedrigeren Wert von  $S \approx 170$  ein. Die Sättigung entlang der Jetachse für die Rechnungen F9 und F10 steigt bei  $z/D \approx 4$  steil an, bis sie bei  $z/D \approx 6$  abflacht und einen Maximalwert bei  $z/D \approx 40$  erreicht. Die Kurven der Fälle F9 und F10 sind für  $z/D < 40$  qualitativ ähnlich. Die prozentuale Abweichung der Sättigung, bezogen auf die Daten des Falls mit höchster MC-Partikel-Zahl (F10), bleibt für  $z/D < 40$  unter 20%, steigt weiter stromab bis zu einer Abweichung von 50% an. Die Nukleationsrate weist für  $z/D < 40$  eine Abweichung kleiner 50% auf, welche mit zunehmendem Abstand von der Düse weiter ansteigt. Der Verlauf der Sättigung und Nukleation und über dem Radius bei  $z/D = 20$  ist in Abbildung 6.15(b) zu sehen. Das räumliche Verhalten von F5 und F8 ist sich sehr ähnlich und zeigt für die Sättigung ein lokales Minimum auf der Achse. Der radiale Verlauf der Sättigung für die Rechnungen F9 und F10 ist nahezu parallel, die Werte unterscheiden sich maximal auf der Jetachse. Die prozentualen Unterschiede, bezogen auf die Daten des Falls mit höchster MC-Partikel-Zahl (F10), betragen für die Sättigung 12% und für die Nukleation 25%.



(a) Sättigung und Nukleation entlang der Jetachse

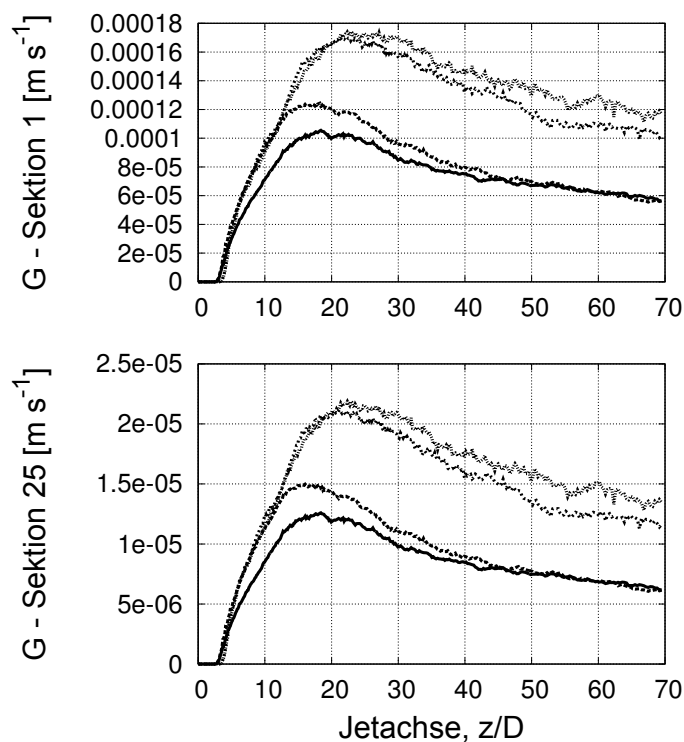
(b) Sättigung und Nukleation über  $r/D$  bei  $z/D = 20$ Abbildung 6.15: Sättigung und Nukleationsrate für verschiedene  $N_{MC,min} < N_{MC} < N_{MC,max}$  entlang der Jetachse und über dem Radius

In Abbildung 6.16 ist die Kondensationsrate der 1. und 25. Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  aufgetragen. Es ist abermals ersichtlich, dass aus den Fällen F5 und F8 sowie F9 und F10 qualitativ sehr ähnliche Ergebnisse hervorgehen. Der axiale Verlauf der Kondensationsraten ist für die Fälle F9 und F10 nahezu identisch und weist einen Unterschied von weniger als 5%, bezogen auf die Daten von F10, für  $z/D < 30$  auf. Die Unterschiede wachsen bis zum Ende des Rechengebietes auf 15% an. Der radiale Verlauf der Kondensationsrate zeigt das gleiche Verhalten der Fälle untereinander. Der Unterschied der Fälle mit höchster MC-Partikel-Zahl beträgt 1% auf der Jetachse und nimmt im radialen Verlauf deutlich höhere Werte an, bis sich die Werte bei  $r/D = 6$  wieder nahezu exakt annähern.

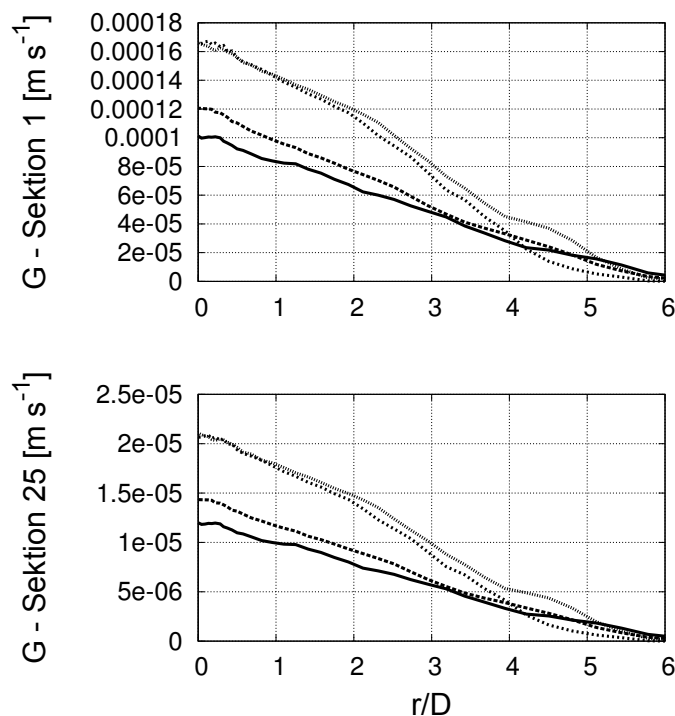
In Abbildung 6.17(a) ist die Größenverteilungsfunktion für die unterschiedlichen Lagrange-Auflösungen aus dem gesamten Rechengebiet dargestellt. Der Verlauf der Kurve von F5 unterscheidet sich deutlich von den anderen. Mit steigender Auflösung verschiebt sich das Maximum der Verteilungsfunktion zu  $1\mu m$ . Die Rechnungen F9 und F10 liefern nahezu identische Kurvenverläufe. Das Maximum der Verteilung liegt bei  $1,06 \cdot 10^{-06}m$  und unterscheidet sich um 5% bezogen auf die Werte von F10.

Das nullte Moment der Verteilungsfunktion entlang der Jetachse kann in Abbildung 6.17(b) betrachtet werden. Es ist ebenfalls ersichtlich, dass sich die Verläufe der Kurve mit steigender MC-Partikel-Zahl ändern bis 30 MC-Partikel als Obergrenze erreicht wurden. Die Abweichung der Werte entlang der Jetachse von F9 zu F10 beträgt maximal 15 %, bezogen auf die Daten von F10.

Aufgrund der gewonnenen Erkenntnisse kann davon ausgegangen werden, dass die Rechnung F9 eine ausreichende Anzahl von MC-Partikeln zur Verfügung stellt, da sich bei weiterer Erhöhung der Anzahl der MC-Partikel die gewonnenen Daten qualitativ nicht mehr ändern.

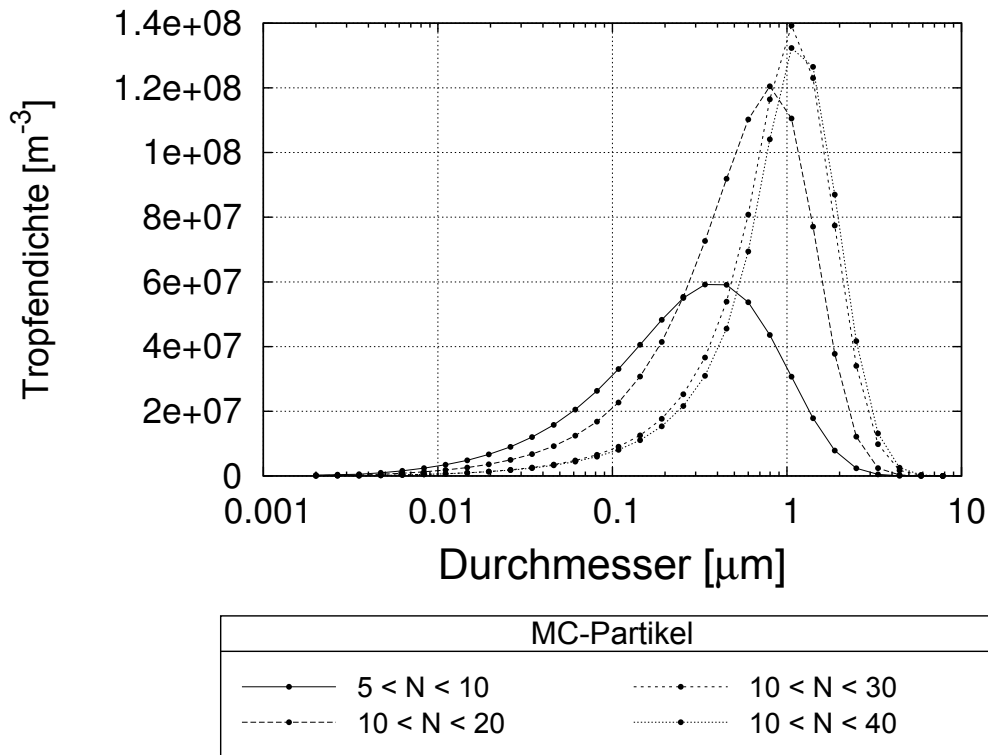


(a) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion entlang der Jetachse

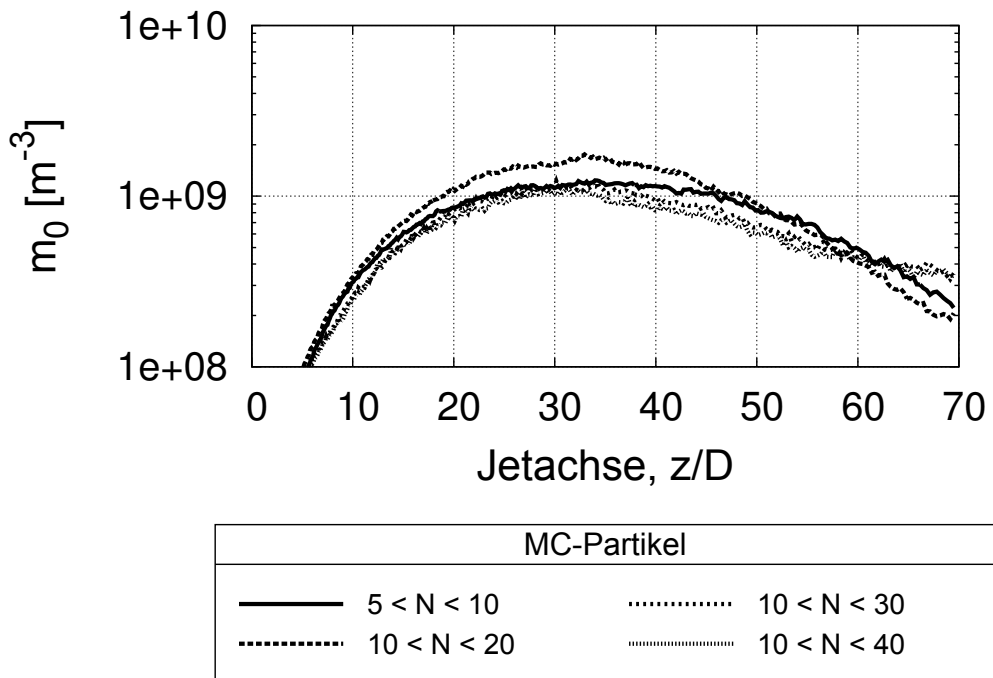


(b) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion über  $r/D$  bei  $z/D = 20$

Abbildung 6.16: Sättigung und Nukleationsrate für verschiedene  $N_{MC,min} < N_{MC} < N_{MC,max}$  entlang der Jetachse und über dem Radius



(a) Größenverteilungsfunktion aus dem gesamten Rechengebiet



(b) Nulltes Moment entlang der Jetachse

Abbildung 6.17: Größenverteilungsfunktion aus dem gesamten Rechengebiet und nulltes Moment entlang der Jetachse für verschiedene  $N_{MC,min} < N_{MC} < N_{MC,max}$

### 6.5.3 Auflösung der Größenverteilungsfunktion

Um den Einfluss der Sektionierung der Größenverteilungsfunktion abschätzen zu können, wurden Rechnungen mit unterschiedlicher Diskretisierungsfineinheit der Größenverteilungsfunktion durchgeführt. Für diese Studie werden die Fälle F5, F6, und F7 aus Tabelle 6.1 herangezogen. Es wurde das LES-Netz mit 0,5 Millionen LES-Zellen und  $N_{MC,min} = 5$ ,  $N_{MC,max} = 10$  verwendet. Die Anzahl der untersuchten Sektionen sind 30, 40 und 50. Unabhängig von der Diskretisierung wird ein Bereich von  $d_0 = 2 \cdot 10^{-9} m$  bis  $d_{max} = 7,9 \cdot 10^{-6} m$  abgedeckt. In Tabelle 6.7 ist eine Übersicht über die Anzahl der Sektionen und die gewählten Wachstumsfaktoren  $c_w = \frac{d_{k+1}}{d_k}$  gegeben. Über die inverse Proportionalität der Kondensationsrate (Gleichung 3.20) zum Tropfendurchmesser ist eine Kopplung des Prozesses an die Diskretisierung der Größenverteilungsfunktion gegeben. Wie in Abschnitt 6.3 beschrieben, findet durch den Massenabzug eine weitreichende Kopplung statt, auf deren Effekte in diesem Abschnitt nicht im Detail eingegangen werden soll.

Tabelle 6.7: Anzahl der Sektionen der diskretisierten Größenverteilungsfunktion und Wachstumsfaktoren

Kürzel	Anzahl Sektionen	$c_w$
F5	30	1.33
F6	40	1.23625
F7	50	1.184

In Abbildung 6.18 ist die Kondensationsrate der ersten Sektion entlang der Jetachse für verschiedene Diskretisierungen der Größenverteilungsfunktion aufgetragen. Nach dem Aufbrechen des Jets bei  $z/D \approx 3$  steigen die Kondensationsraten, unabhängig von der Anzahl der Stützstellen, gleichermaßen an. Bei  $z/D \approx 12$  steigt die Rate für die Diskretisierung mit 40 und 50 Stützstellen weiter simultan an, während die aus Rechnungen mit 30 Stützstellen leicht abflacht. Die Kondensationsrate aus Rechnungen mit 40 und 50 Stützstellen erreicht bei  $z/D \approx 19$  ein Maximum mit einer Amplitude, die sich nur um wenige Prozent unterscheidet. Die Diskretisierung mit 30 Stützstellen erreicht bei  $z/D \approx 20$  ein Maximum niedriger Amplitude. Die Kurven für 40 und 50 Stützstellen verlaufen bis  $z/D \approx 45$  sehr ähnlich, im weiteren Verlauf von bis zu 20% bezogen auf die Daten von F7.

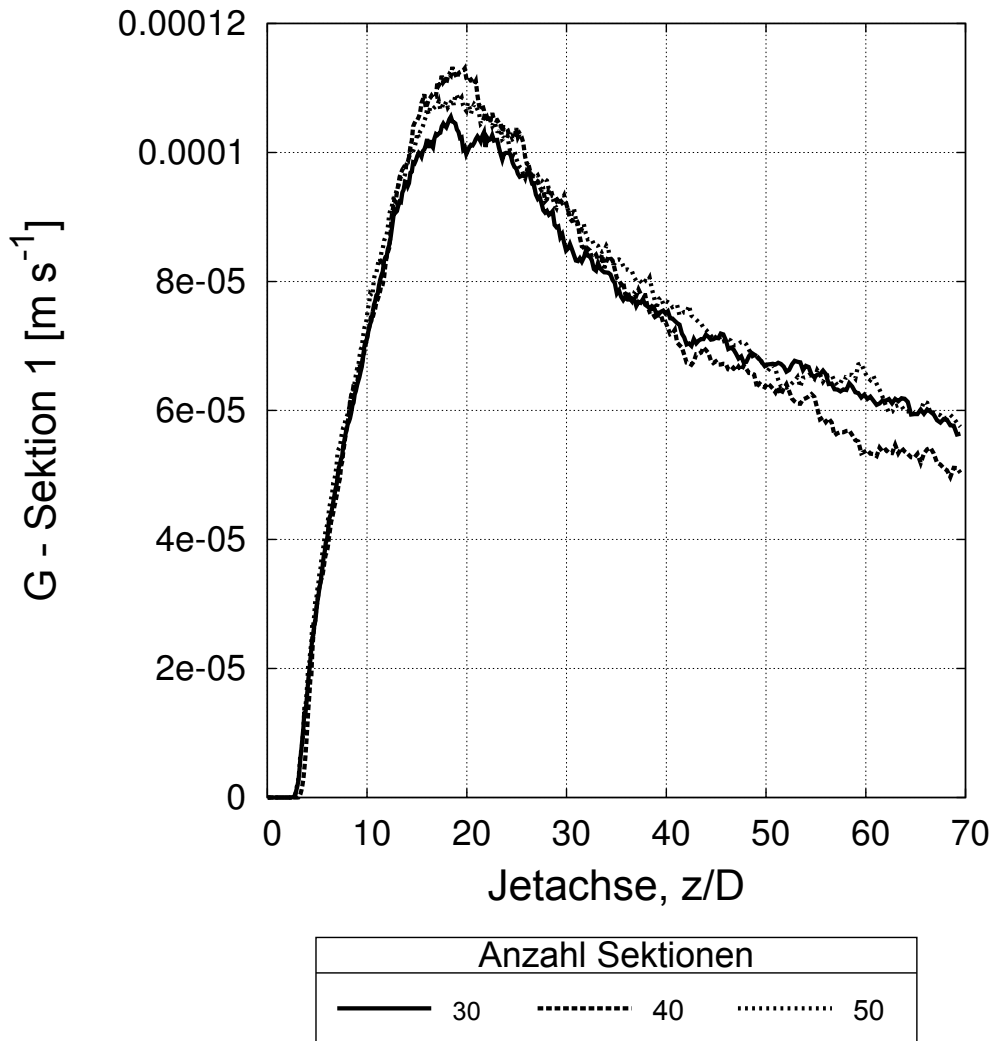


Abbildung 6.18: Kondensationsrate der 1. Sektion für verschiedene Diskretisierungen der Größenverteilungsfunktion entlang der Jetachse

In Abbildung 6.19 ist die Größenverteilungsfunktion aus Rechnungen mit unterschiedlichen Diskretisierungen aus der gesamten Rechendomäne aufgetragen. Der Vergleich der Verteilungsfunktionen mit 30 und 40 Stützstellen zeigt eine deutliche Verschiebung des Maximums von  $\approx 0,5 \mu\text{m}$  zu  $\approx 0,6 \mu\text{m}$ . Die Amplitude des Maximums aus Rechnungen mit 30 und 40 Stützstellen unterscheidet sich um einen Faktor von 2,16. Es ist davon auszugehen, dass in den Bereichen mit hohen Wachstumsraten die großen Abstände der Stützstellen der diskretisierten Größenverteilungsfunktion bei der Verwendung von 30 Stützstellen zu einer ungenauen numerischen Behandlung führen und die Tropfen zu schnell wachsen. Die Kurvenverläufe der Größenverteilungsfunktion aus Rechnungen mit 40 und 50 Stützstellen sind qualitativ gleich. Die Maximalabweichung der Daten aus der Rechnung mit 40 Stützstellen von Daten der Rechnung mit 50 Stützstellen beträgt 2%. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass bei einer Diskretisierung der

Größenverteilungsfunktion mit 40 Stützstellen die Ergebnisse qualitativ unabhängig von der Auflösung in dieser Dimension sind.

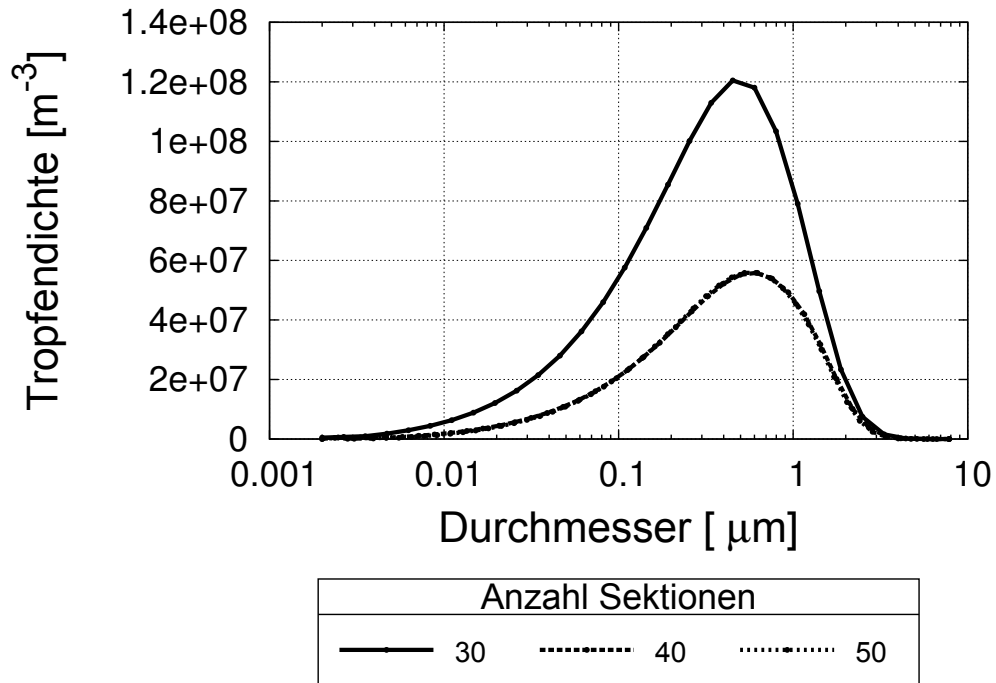


Abbildung 6.19: Größenverteilungsfunktion für verschiedene Diskretisierungen aus der gesamten Rechendomän



# 7 Ergebnisse – Referenzfall und Aspekte der Modellierung

In diesem Abschnitt werden zunächst die Daten des Referenzfalls analysiert und mit Ergebnissen früherer Arbeiten verglichen. Der darauffolgende Abschnitt ist dem Einfluss der großskaligen Turbulenz sowie der Interaktion kleinskaliger turbulenter Fluktuationen auf die Prozesse der Tropfenbildung und des Tropfenwachstums gewidmet. Das Verhalten charakteristischer Größen bei Variation von  $X_{DBP}$  und der Vergleich mit Daten früherer Arbeiten wird in einem weiteren Abschnitt betrachtet. Anschließend werden die Eigenschaften des IEM- und des MCD-Mischungsmodells anhand charakteristischer Größen betrachtet. Die Effekte unterschiedlicher Modellierungen der Oberflächenspannung stehen im abschließenden Kapitel im Fokus.

## 7.1 Analyse des Referenzfalls

Wie in Abschnitt 6.5 untersucht wurde, stellt sich eine qualitative Unabhängigkeit der Ergebnisse von der Anzahl der Stützstellen bei der Diskretisierung der Größenverteilungsfunktion mit 40 Sektionen ein. Für die Lagrange-Auflösung ist die qualitative Unabhängigkeit mit  $N_{MC,min} = 10$ ,  $N_{MC,max} = 30$  erreicht. Die LES-Netz-Auflösung von 1 Million LES-Zellen liefert Ergebnisse, welche sich bei weiterer Netzverfeinerung nicht mehr qualitativ ändern. Daher können die Ergebnisse des Falls F1 als qualitativ unabhängig von der Diskretisierung der untersuchten Dimensionen betrachtet werden.

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse ausgewertet und in Zusammenhang mit den experimentellen Daten von [69] und Simulationsergebnissen von [41, 149] gestellt. Eine Übersicht über die Arbeiten von [69, 41, 149] kann in Abschnitt 5 gefunden werden.

In Abbildung 7.1 ist die zeitlich gemittelte Sättigung entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$  aufgetragen. Betrachtet man die Sättigung entlang der Jetachse, so steigt Selbige im Bereich  $2 < z/D < 7$  steil an. Die Steigung flacht anschließend ab und bildet ein Maximum bei  $z/D \approx 30$ . Die Werte zeigen entlang der Jetachse im weiteren Verlauf eine abfallende Tendenz. Der Verlauf der Sättigung über dem Radius bei  $z/D = 10$  zeigt ein Maximum auf der Jetachse. Im Bereich  $0 < r/D < 4$  fällt der Wert der Sättigung von 124 steil auf Null ab. Das qualitative Verhalten der Sättigung über dem Radius bei  $z/D = 20$  und  $z/D = 30$  entspricht dem bei  $z/D = 10$ . Die Maximalwerte steigen entlang der Jetachse jedoch weiter an und die radiale Ausdehnung der Verteilung nimmt zu. Betrachtet man die Sättigung über dem Radius

bei  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$ , so nehmen die Maximalwerte der Sättigung auf der Jetachse wieder ab. Die radiale Ausdehnung der Verteilung nimmt weiter zu und hat bei  $z/D = 60$  mehr als die dreifache Breite erreicht.

In Abbildung 7.2 ist die Sättigung in einer Ebene gezeigt, welche die Jetachse enthält. Am Düsenrand bilden sich klare Konturen hoher Sättigungswerte direkt nach Austritt des Fluides. Mit zunehmender Durchmischung der Ströme weiten sich die Bereiche hoher Sättigung aus. Die symmetrisch zur Jetachse, in der Scherschicht des Jets, gebildeten höchsten Sättigungswerte beschreiben zunächst eine kegelschalenartige Struktur mit geringem Öffnungswinkel, vereinen sich aber stromab und führen zu maximalen Sättigungswerten auf der Jetachse.

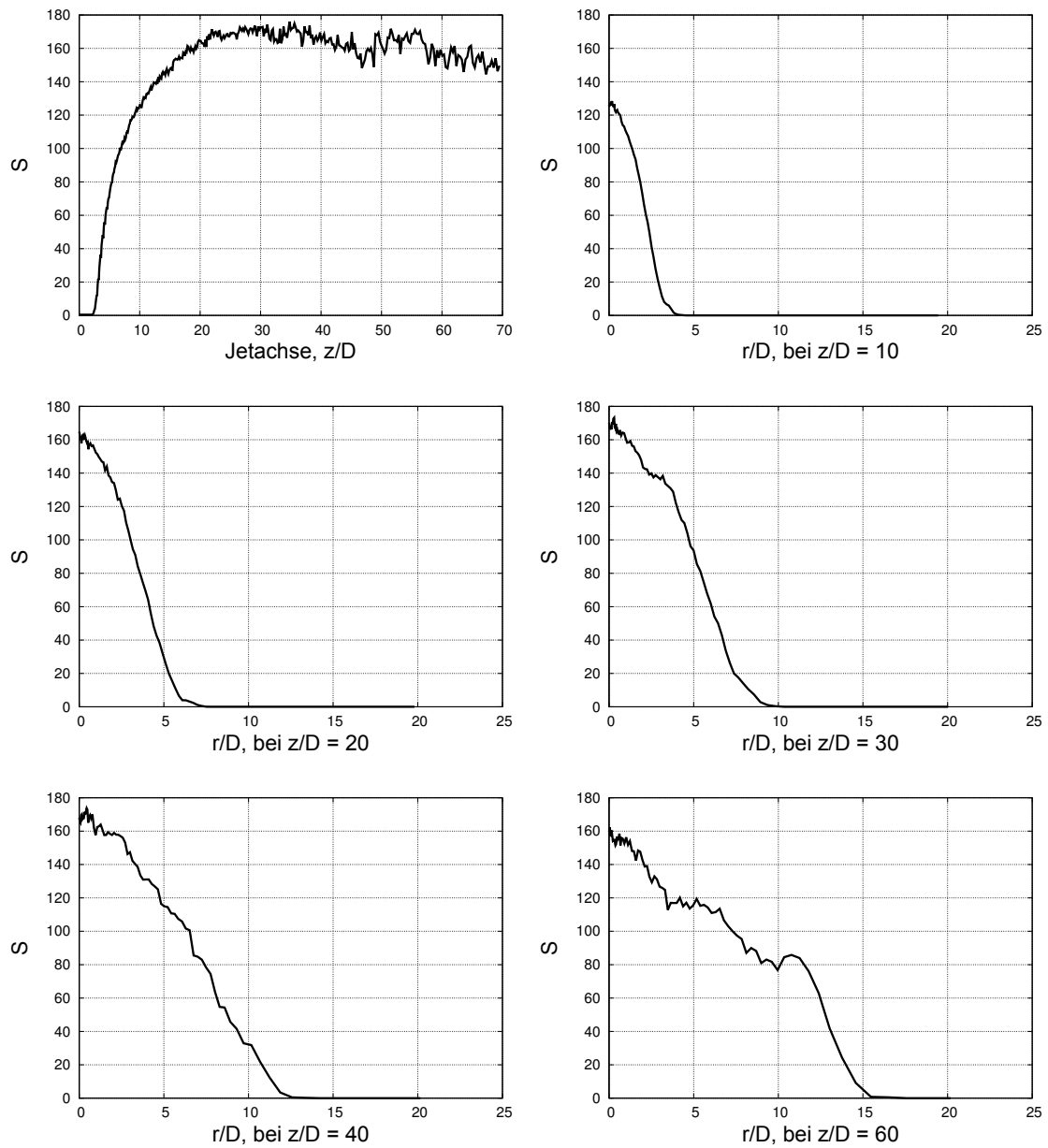


Abbildung 7.1: Sättigung entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$

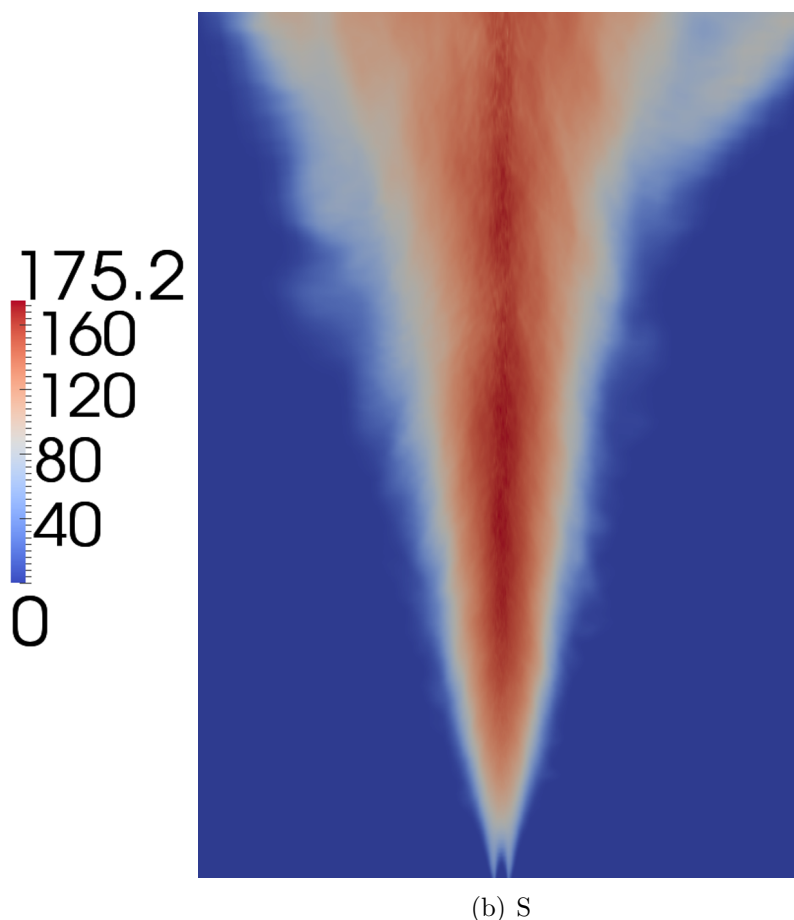


Abbildung 7.2: Sättigung in einer Ebene, welche die Jetachse enthält

In Abbildung 7.3 ist die zeitlich gemittelte, homogene Nukleationsrate entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$  aufgetragen. Zusätzlich zu den Daten aus Rechnungen mit MC-Partikeln sind die digitalisierten Ergebnisse von [41] eingezeichnet.

Die Nukleationsrate entlang der Jetachse steigt bei  $z/D \approx 2$  steil an, bildet einen breiten Bereich hoher Nukleationsrate mit einem plateauartigen Maximum bei  $z/D \approx 20$  und sinkt zum Ende der Rechendomän langsam ab. Dieses Verhalten zeigt auch der Verlauf von [41]. Die Nukleationsrate über dem Radius bei  $z/D = 10$  zeigt ein Maximum auf der Jetachse, fällt im Bereich  $4 < r/D < 4,5$  steil ab und erreicht bei  $r/D = 4,5$  vernachlässigbare Werte. Das qualitative Verhalten über dem Radius bei  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$  entspricht dem bei  $z/D = 10$ . Die Bereiche mit hoher Nukleationsrate dehnen sich mit zunehmendem Abstand von der Düse radial aus und überspannen bei  $z/D = 60$  einen Bereich bis  $r/D = 17,5$ .

Der Vergleich mit den Daten aus Rechnungen von [41] in Abbildung 7.3 zeigt ein ähnliches räumliches Verhalten der Nukleationsrate. Das Einsetzen der Nukleation ist bei den Daten von [41] jedoch erst bei  $z/D = 10$  zu beobachten. Die Daten zei-

gen einen Maximalwert bei  $z/D \approx 18$  und mit größer werdendem Abstand zur Düse wieder absinkende Werte. Die Nukleationsraten aus Rechnungen von [41] sind ca. 2 Größenordnungen unter den Werten aus den durchgeführten Simulationen dieser Arbeit. Der radiale Verlauf der Nukleationsrate aus [41] konnte leider nicht zufriedenstellend digitalisiert werden und entzieht sich daher dem direkten Vergleich. Zudem sei anzumerken, dass der unterschiedliche Verlauf der Geschwindigkeitsfelder, insbesondere das spätere Aufbrechen des Jets in den Simulationen von [41] (siehe Abschnitt 6.2) und die nichtlineare Abhängigkeit der Nukleationsrate von den zugrundeliegenden Skalarverteilungen, einen direkten Vergleich erschweren. In der Fachliteratur finden sich Berichte für sechs bis neun Größenordnungen zu niedrige Nukleationsraten durch die von [41] verwendete Nukleationsrate für DBP [48] (s. Gleichung 3.18, Abschnitt 5.2) im Vergleich zur verwendeten Formulierung (s. Gleichung 3.17).

Die Darstellung der Nukleationsraten in einer Ebene, welche die Jetachse enthält, in Abbildung 7.4 zeigt höchste Nukleationswerte auf der Jetachse. Die Verteilung ist symmetrisch zur Jetachse mit Maximalwerten im ersten Drittel des Rechengebietes.

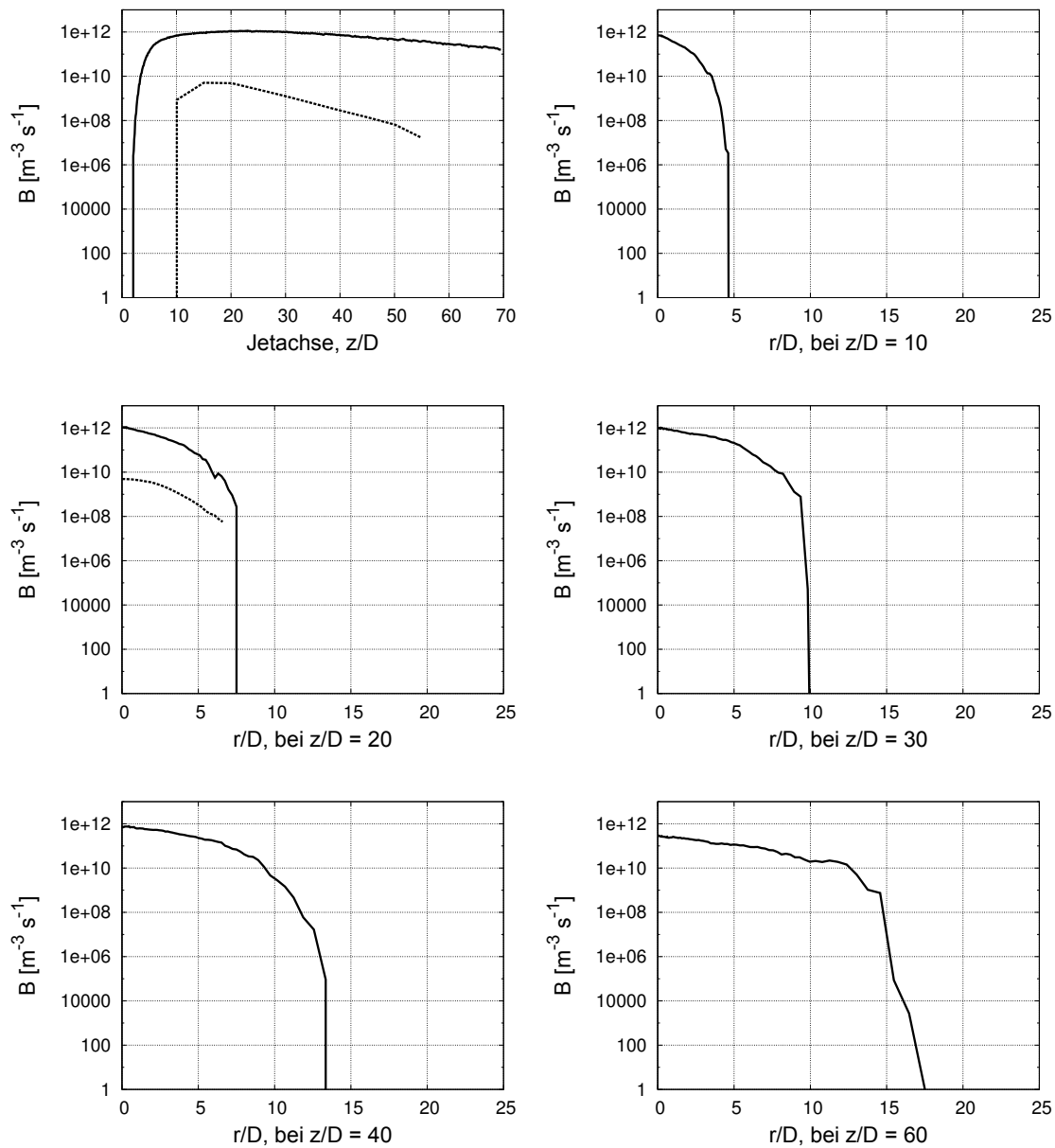
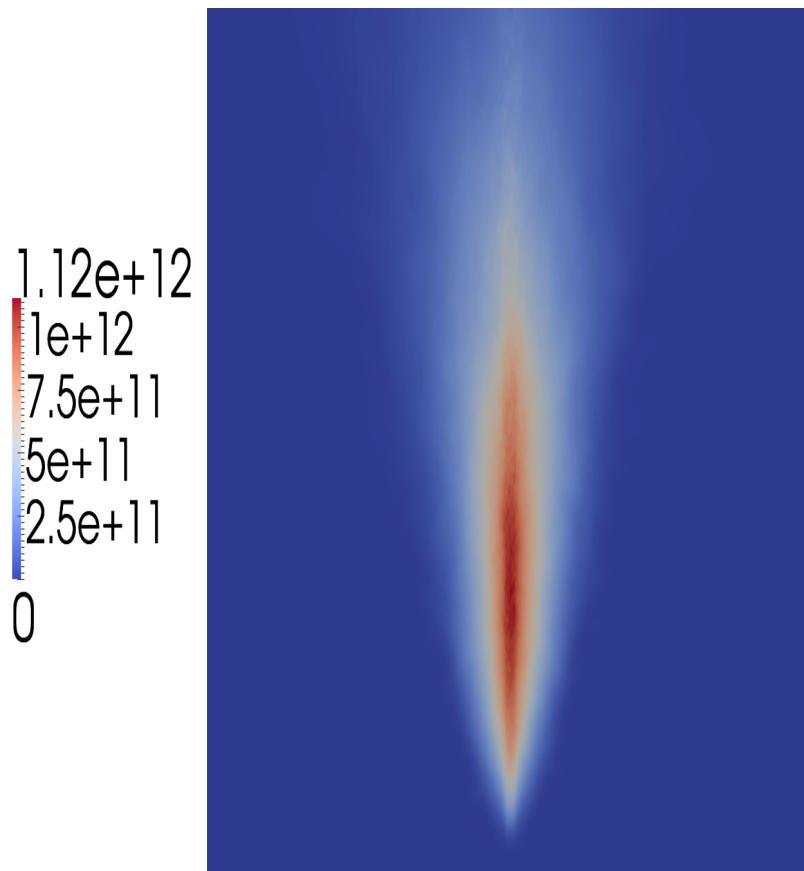


Abbildung 7.3: Nukleationsrate entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$ , zudem Daten von [41] (gestrichelt)



(b) B

Abbildung 7.4: Nukleationsrate in einer Ebene, welche die Jetachse enthält

In Abbildung 7.5 ist die zeitlich gemittelte Kondensationsrate der ersten Sektion der Größenverteilungsfunktion entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$  aufgetragen. Die Analyse der Wachstumsrate der 25. Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion findet sich im Anhang 11.3.

Die Kondensationsrate steigt entlang der Jetachse im Bereich von  $2 < z/D < 18$  steil an, findet ein Maximum bei  $z/D \approx 22$  und fällt bis zum Ende der Rechendomain gleichmäßig ab. Der radiale Verlauf bei  $z/D = 10$  zeigt ein Maximum auf der Jetachse und fällt bis  $r/D \approx 4$  auf Null ab. Betrachtet man die Entwicklung der radialen Verläufe der Kondensationsrate stromab, so findet sich stets ein Maximum auf der Jetachse. Der Maximalwert nimmt jedoch stetig ab und der Bereich hoher Wachstumsraten verbreitert sich radial.

Die Betrachtung der Kondensationsrate in einer Ebene, welche die Jetachse enthält, in Abbildung 7.6 zeigt ebenfalls signifikante Werte direkt am Düsenrand. Nach dem Aufbrechen des Jets bildet sich jedoch ein auf der Jetachse zentrierter Bereich maximaler Wachstumsraten. Die Kondensationsrate fällt in der zweiten Hälfte des Rechengebietes ab und nimmt in der Breite zu. Das räumliche Wachstumsver-

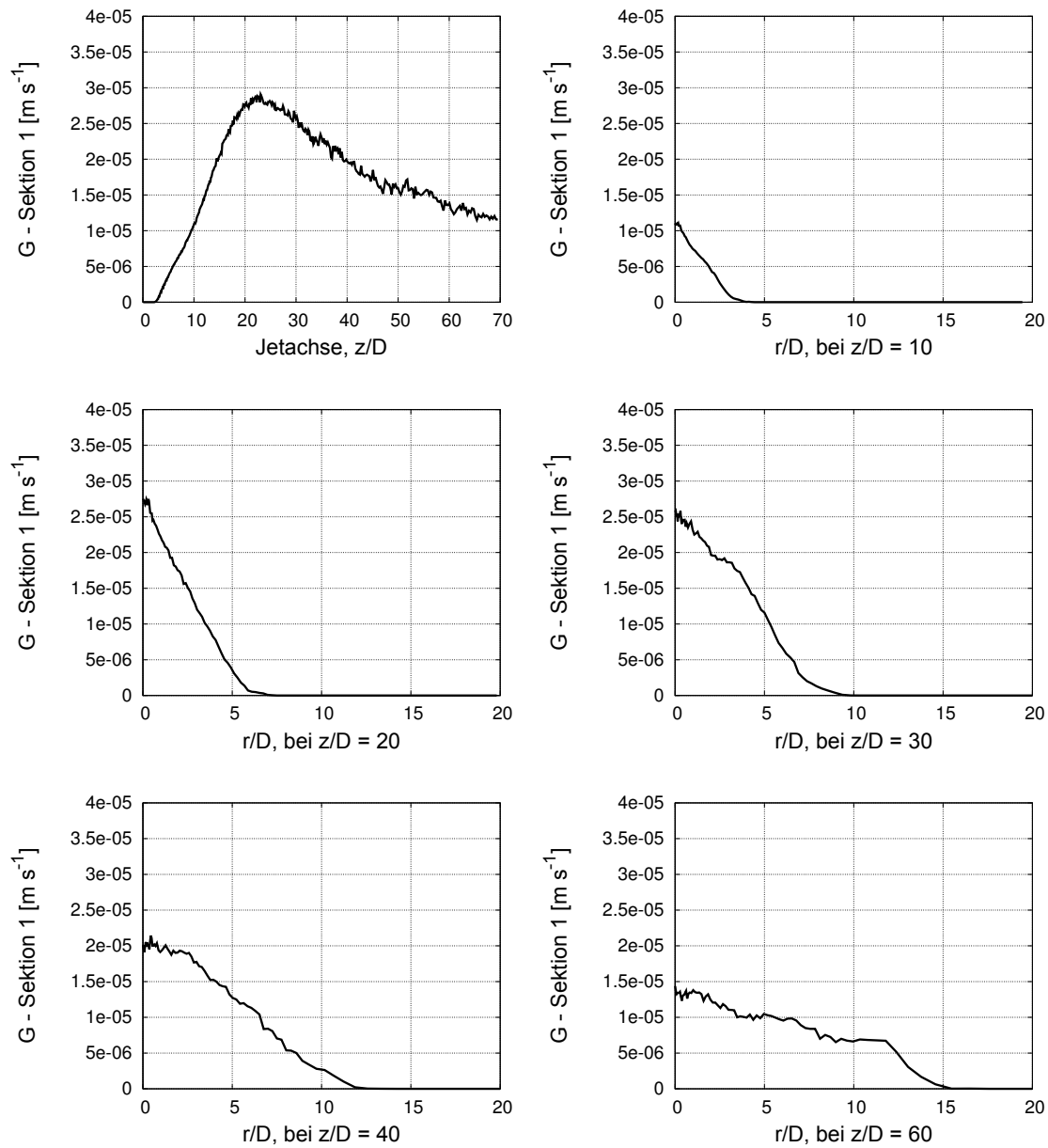


Abbildung 7.5: Kondensationsrate der 1. Sektion entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$

halten unterscheidet sich somit deutlich von dem der Tropfenbildung.



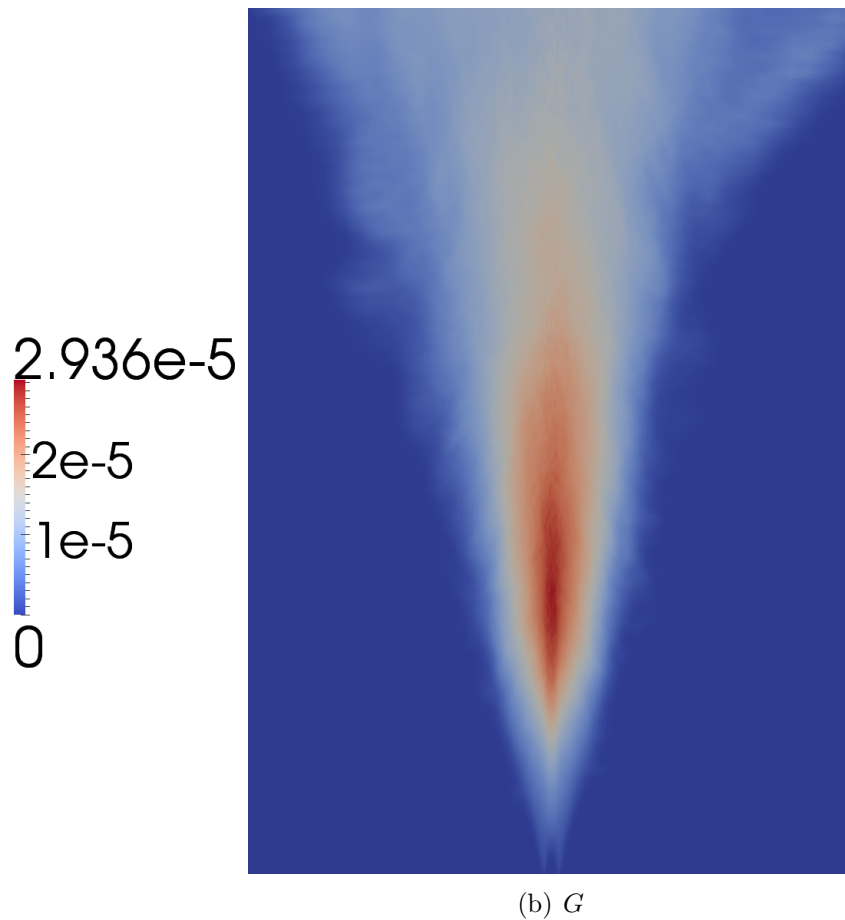


Abbildung 7.6: Kondensationsrate der ersten Sektion in einer Ebene, welche die Jetachse enthält

In Abbildung 7.7 ist die prozentuale Abweichung des zeitlich gemittelten normierten Massenbruchs  $Y_{DBP}$  vom zeitlich gemittelten Mischungsbruch  $Z$  entlang der Jetachse dargestellt. Für  $z/D < 25$  ist der Verlust des DBP aus der Gasphase vernachlässigbar. Für  $z/D > 25$  steigt die Masse der gebildeten Tropfen exponentiell an und erreicht am Ende des Rechengbietes  $\approx 2\%$ . Dieses Verhalten ist durch die steigende Anzahl der Tropfen, sowie die vorhandene Oberfläche zu erklären. Der Vergleich mit der Größenverteilungsfunktion in Abbildung 7.8, sowie des nullten Momentes entlang der Jetachse in Abbildung 7.10 verdeutlichen diesen Zusammenhang. Es ist zu erwarten, dass die Kurve auf einen Sättigungswert zu läuft, welcher sich außerhalb des Rechengbietes einstellt (siehe Abschnitt 6.3).

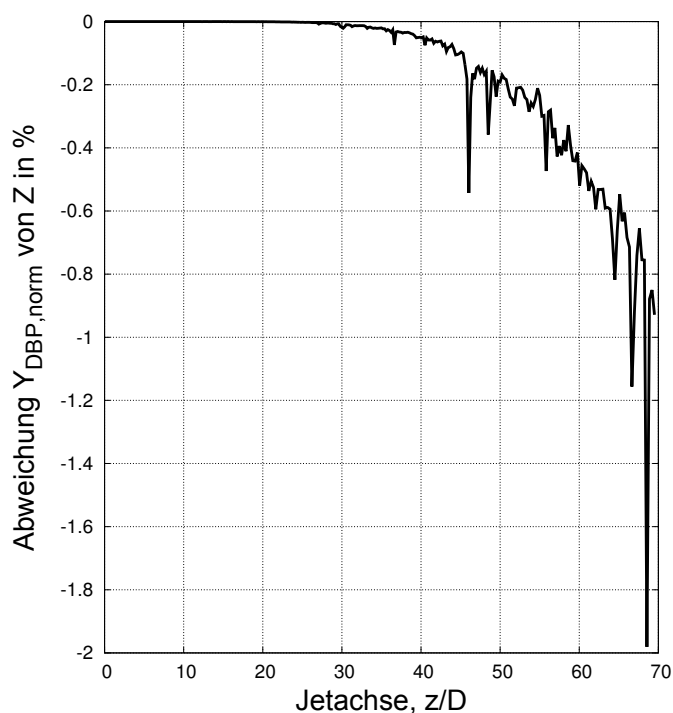


Abbildung 7.7: Prozentuale Abweichung des normierten Massenbruchs  $Y_{DBP}$  vom Mischungsbruch  $Z$  entlang der Jetachse

In Abbildung 7.8 ist die Größenverteilungsfunktion an den Stellen  $z/D = 5$ ,  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$  zu betrachten. Mit steigendem Abstand von der Düse nimmt die Anzahl der Tropfen stark zu. Das Maximum der Verteilungsfunktion verschiebt sich zu größeren Partikeldurchmessern. Die Verteilungsfunktion wird mit wachsendem Düsenabstand zunehmend spitzer und asymmetrischer. Der Abfall nach dem Maximalwert wird zunehmend steiler. In Tabelle 7.1 sind die Maximalwerte und zugehörigen Tropfendurchmesser der Verteilungsfunktionen aufgeführt.

Tabelle 7.1: Position und Betrag der Maxima der Größenverteilungsfunktionen aus Abbildung 7.8

$z/D$	$d_{p,max}$ [m]	Maximale Tropfendichte
5	$4,67 \cdot 10^{-9}$	1042980
10	$1,67 \cdot 10^{-8}$	$1,65 \cdot 10^7$
20	$5,95 \cdot 10^{-8}$	$7,92 \cdot 10^7$
30	$1,39 \cdot 10^{-7}$	$1,51 \cdot 10^8$
40	$2,12 \cdot 10^{-7}$	$2,13 \cdot 10^8$
60	$4,02 \cdot 10^{-7}$	$2,55 \cdot 10^8$

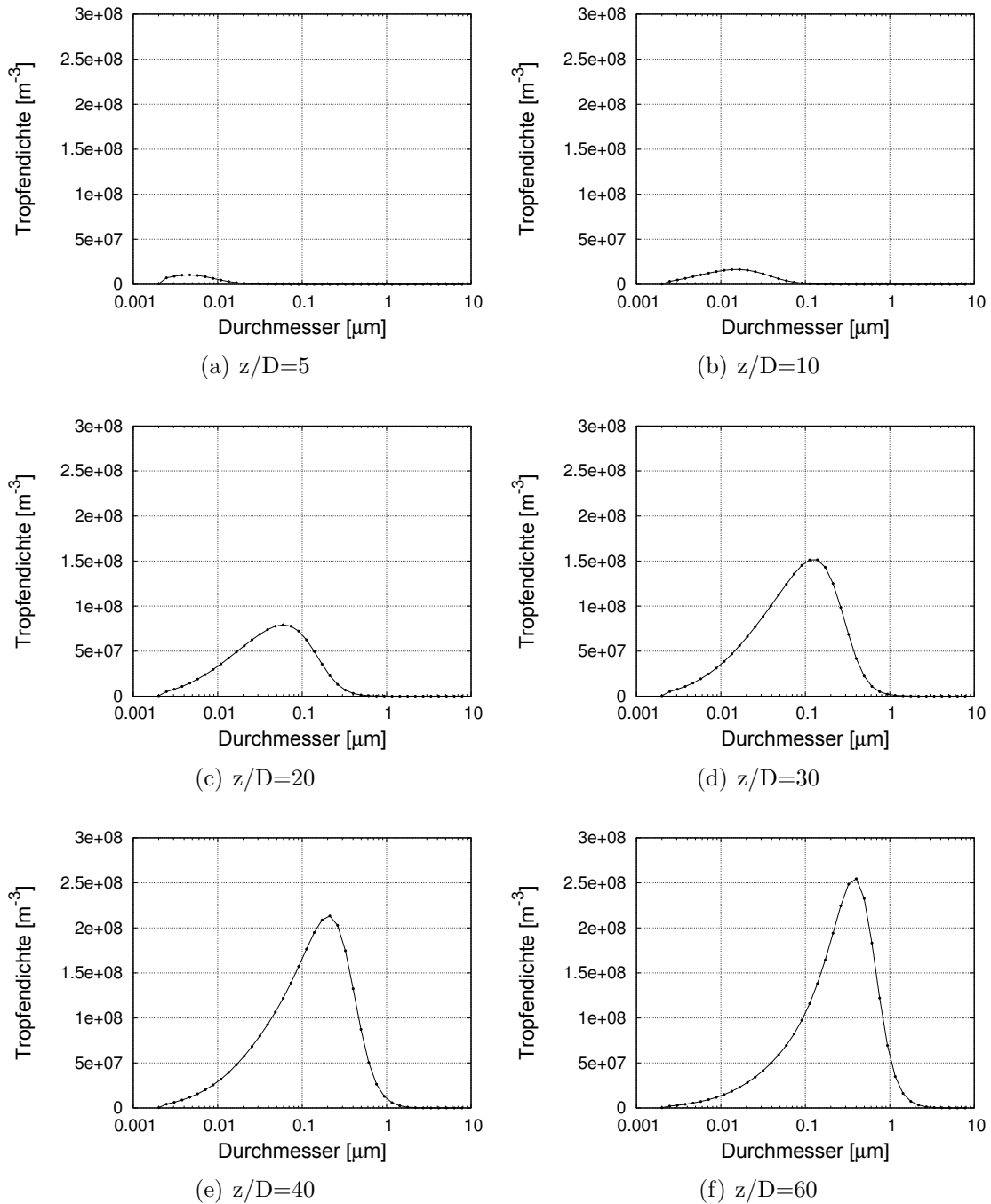


Abbildung 7.8: Größenverteilungsfunktion an den Stellen  $z/D = 5$ ,  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$

In Abbildung 7.9 ist die Größenverteilungsfunktion bei  $z/D = 20$  in der Darstellung  $dN/d\log d_p$  mit den experimentellen Daten von [69] zu betrachten. Im Bereich  $2 \cdot 10^{-7} m < d_p < 2 \cdot 10^{-6} m$  nähern sich die Kurven stark an und weisen Werte in der gleichen Größenordnung auf. In Anbetracht der unterschiedlichen Geschwindigkeitsfelder (s. Abbildung 6.1) kann hieraus jedoch nicht auf die Güte der Simulationen geschlossen werden. Für kleinere Tropfendurchmesser unterscheiden sich die Werte jedoch stark. Das bimodale Verhalten der experimentellen Daten wird von den Simulationen dieser und den anderen betrachteten Arbeiten nicht wiedergegeben. Aufgrund der endlichen Zeit, welche zur Unterdrückung der Nukleation und Kondensation bei der Extraktion des Fluides im Experiment benötigt wird (siehe auch [149]), sowie wechselnder Messtechniken, deren Gültigkeitsbereich im Bereich des lokalen Minimums der Verteilungsfunktion endeten, und einer fehlenden Fehlerabschätzung sind die experimentellen Daten jedoch mit Vorsicht zu betrachten.

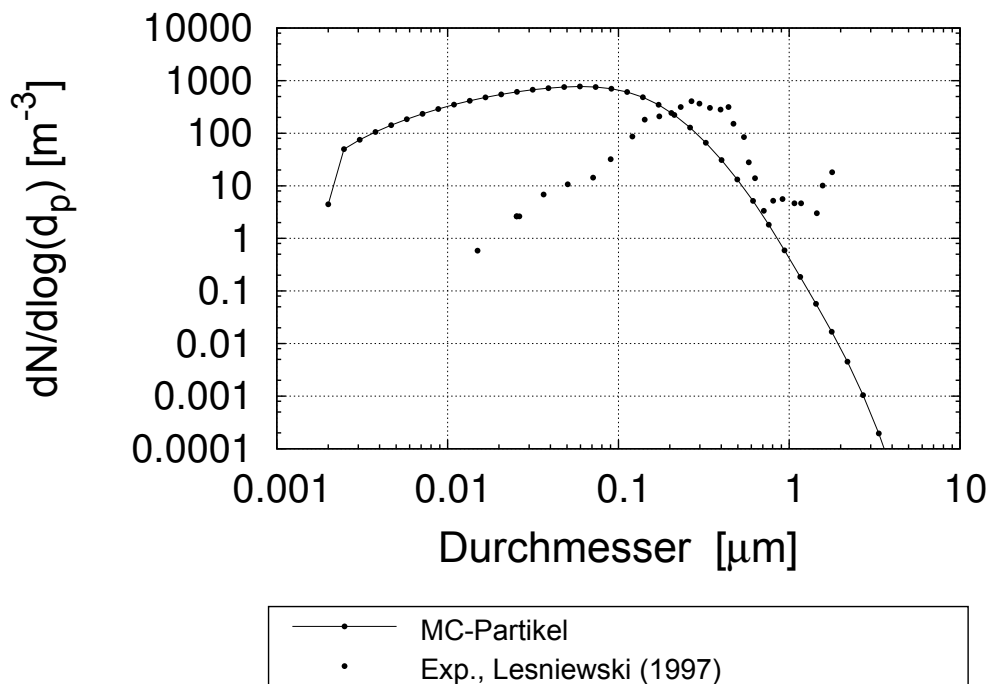


Abbildung 7.9: Größenverteilungsfunktion  $dN/d\log d_p$  bei  $z/D = 20$  aus der Simulation sowie Daten von [69]

In Abbildung 7.10 ist das zeitlich gemittelte, nullte Moment der Größenverteilungsfunktion entlang der Jetachse aufgetragen. Zusätzlich sind die experimentellen Daten von [69] und Simulationsergebnisse von [41, 149] eingezeichnet. Die Kurve aus den durchgeführten Simulationen steigt bei  $z/D \approx 3$  stark an, die Steigung flacht bei  $z/D \approx 4$  ab. Die Simulationsergebnisse im Bereich  $z/D = 35$  sind vergleichbar mit den experimentellen Daten von [69]. Die Simulationsergebnisse von [41] führen im Bereich  $30 < z/D < 50$  ebenfalls zu Ergebnissen im vergleichbaren Wertebereich, wie die betrachteten Simulationsergebnisse aus der aktuellen Arbeit. Der Anstieg der Kurven zeigt ähnliche Charakteristiken. Zunächst steigen die Werte steil an, der Anstieg flacht anschließend ab und die Werte bleiben im weiteren Verlauf auf hohem Niveau. Im Vergleich zu den aktuellen Ergebnissen ist der sehr steile Anstieg der Kurve, kurz nach dem Aufbrechen des Jets, jedoch etwas moderater. An dieser Stelle muss aber das unterschiedliche Aufbrech- und Abklingverhalten des Jets aus den Experimenten und den Simulationen beachtet werden und in den Zusammenhang mit der nichtlinearen Abhängigkeit der Nukleationsrate von den zugrunde liegenden Größen gestellt werden. Zudem müssen die unterschiedliche Modellierung von [41] und [149] für den Sättigungsdruck, die Oberflächenspannung und die Nukleationsrate bedacht werden. Eine Übersicht der verwendeten Ausdrücke ist in Abschnitt 5.2 gegeben.

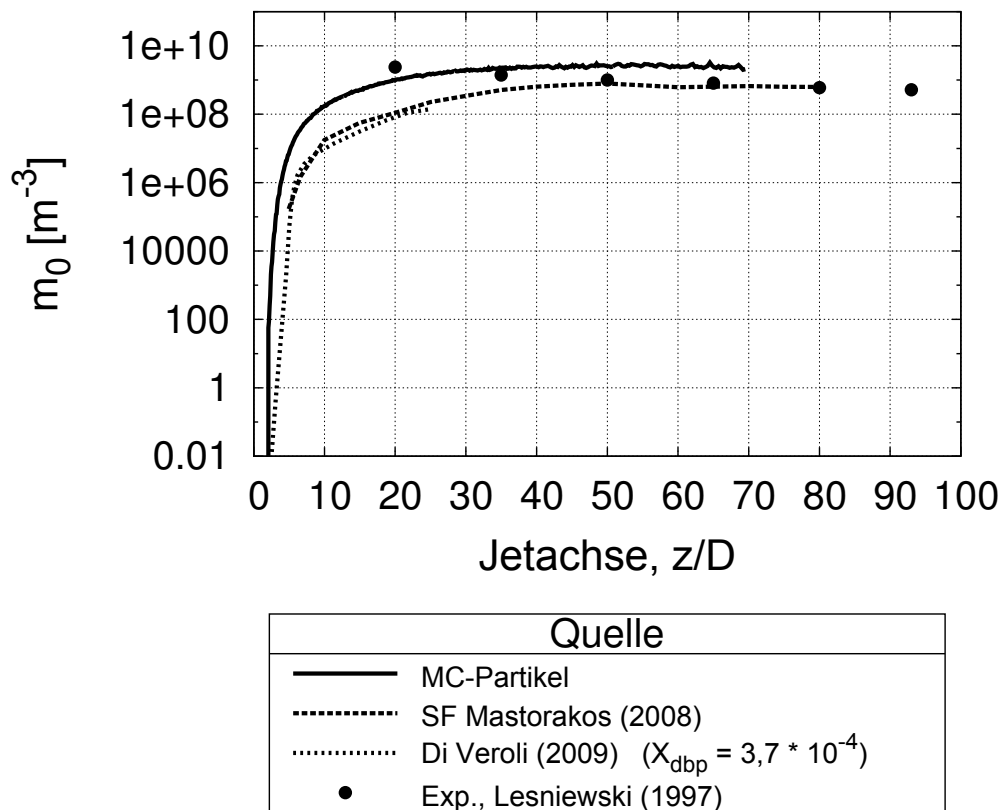


Abbildung 7.10: Nulltes Moment entlang der Jetachse aus verschiedene Quellen

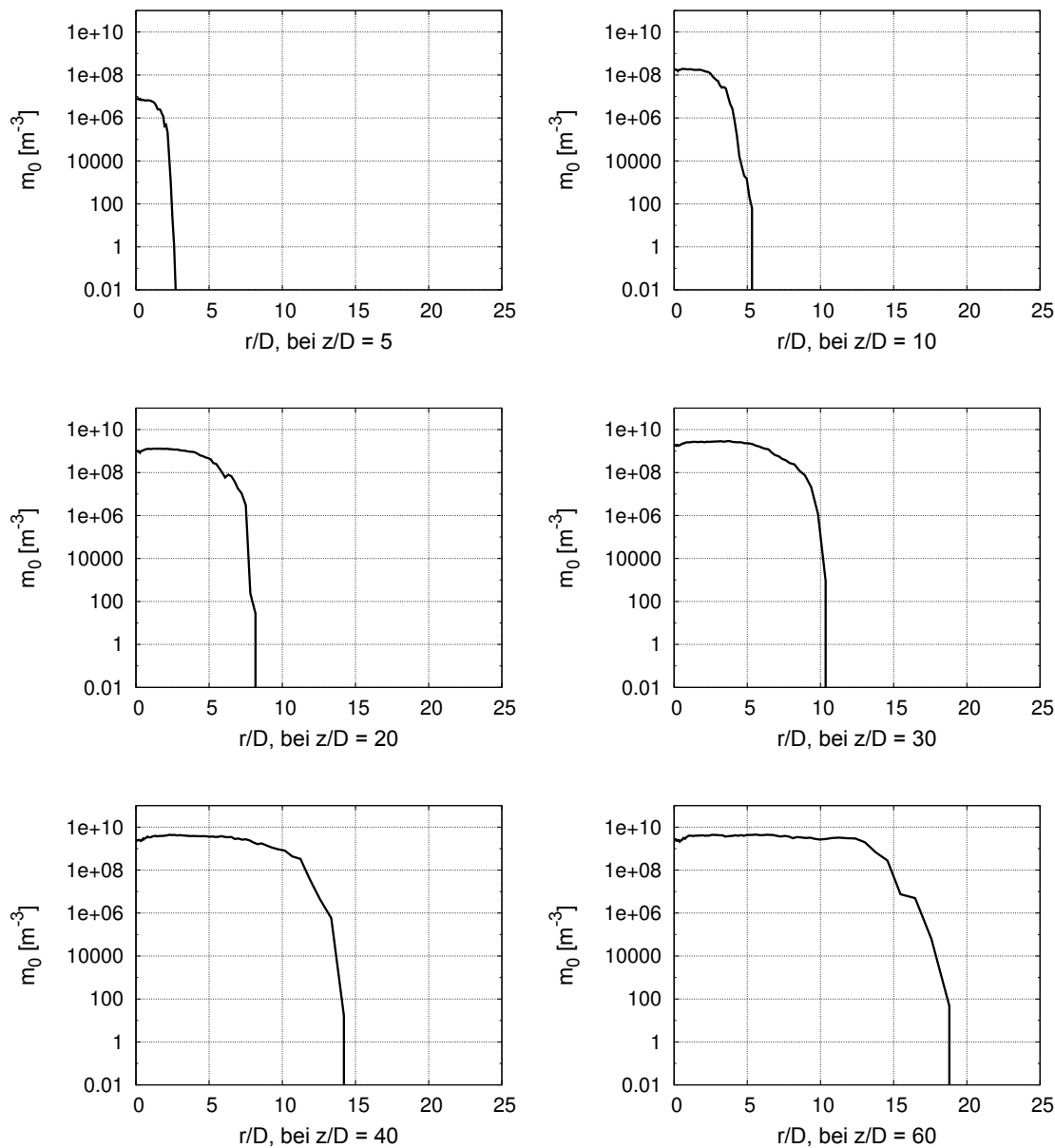


Abbildung 7.11: Nulltes Moment über dem Radius bei  $z/D = 5$ ,  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$

In Abbildung 7.11 ist das zeitlich gemittelte, nullte Moment über dem Radius bei  $z/D = 5$ ,  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$  aufgetragen. Der Verlauf der Kurven zeigt an den axialen Positionen mit  $z/D > 10$  ein lokales Minimum der Tropfendichte auf der Jetachse. Mit zunehmendem Abstand von der Düse verbreitert sich der Bereich höchster Tropfendichte und die Abnahme der Werte in radialer Richtung wird über ein größeres Gebiet ausgedehnt. Bei  $z/D = 60$  hat sich die radiale Ausdehnung des Gebietes mit Tropfen im Vergleich zu  $z/D = 2, 5$  von  $r/D = 5$  auf  $r/D = 18$  stark erweitert.

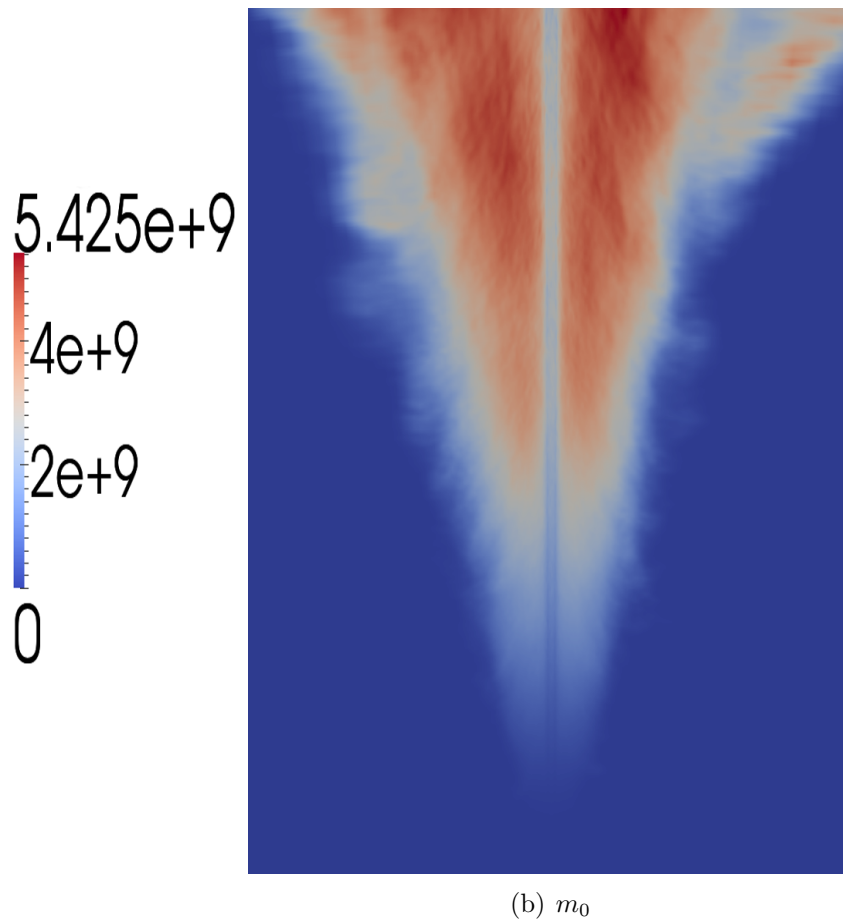


Abbildung 7.12: Nulltes Moment in einer Ebene, welche die Jetachse enthält

In Abbildung 7.12 ist das nullte Moment der Größenverteilungsfunktion in einer Ebene dargestellt, welche die Jetachse enthält. Die räumliche Ausdehnung von Gebieten mit Tropfen nimmt mit steigendem Abstand zur Düse in radialer Richtung zu und breitet sich bis zum Ende des Rechengebietes weiter aus. Die Bereiche höchster Partikelzahldichten sind konzentrisch um die Jetachse angeordnet, was durch das räumliche Verhalten der Nukleationsrate sowie konvektive und diffusive Prozesse zu erklären ist. Durch die hohen Unterschiede der Tropfendichten erscheint die Tropfendichte auf der Jetachse in der gewählten Darstellung niedrig. Der Vergleich mit Abbildung 7.11 stellt die Verhältnisse quantitativ einsichtiger dar.

In Abbildung 7.13 ist der anzahlgemittelte Durchmesser (AGD) der Größenverteilungsfunktion entlang der Jetachse aufgetragen. Der anzahlgemittelte Durchmesser wird aus der Summe aller Tropfendurchmesser geteilt durch die Anzahl aller Tropfen gebildet. Die Ergebnisse aus den Simulationen mit MC-Partikeln zeigen einen linearen Anstieg des AGD mit axialem Abstand zur Düse. Die zusätzlich eingezeichneten Ergebnisse von [69] zeigen einen nahezu konstanten, oder nur leicht ansteigenden AGD entlang der Jetachse.

Der massengemittelte Durchmesser (MGD) wird analog zum gewichteten Mittel-

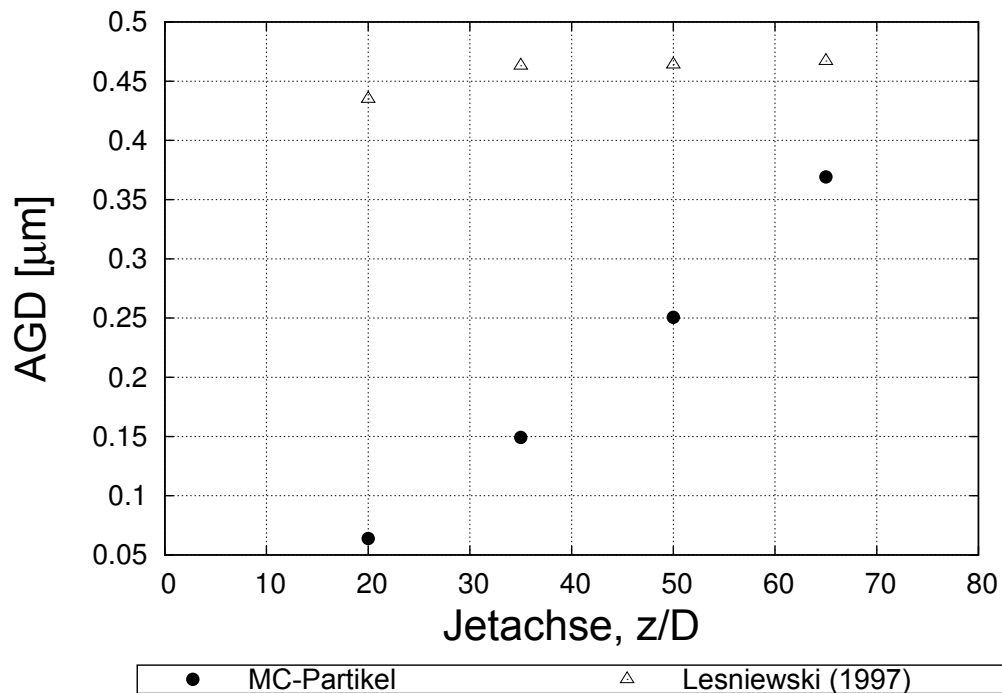


Abbildung 7.13: Anzahlgemittelter Durchmesser entlang der Jetachse

wert einer Größe  $\Phi$  gebildet (siehe Abschnitt 4.1.1). In Abbildung 7.14 ist der MGD aus den Simulationsergebnissen mit MC-Partikeln, experimentelle Ergebnisse von [69] und Simulationsergebnisse von [41], entlang der Jetachse eingezeichnet. Die Simulationsergebnisse von [41], ebenso wie die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen einen linearen Anstieg des MGD entlang der Jetachse. Die experimentellen Ergebnisse von [69] zeigen einen leichten, linearen Anstieg mit zunehmenden Abstand von der Düse. Die übereinstimmenden Tendenzen des MGD der Simulationen und das davon unterschiedliche Verhalten der experimentell ermittelten Daten, auch in Anbetracht der Unsicherheiten des Experiments, legen den Schluss nahe, dass die experimentellen Daten fehlerbehaftet sein könnten. Die Simulationsergebnisse zeigen eine qualitative Übereinstimmung der Abhängigkeit des MGD vom Abstand zur Düse.



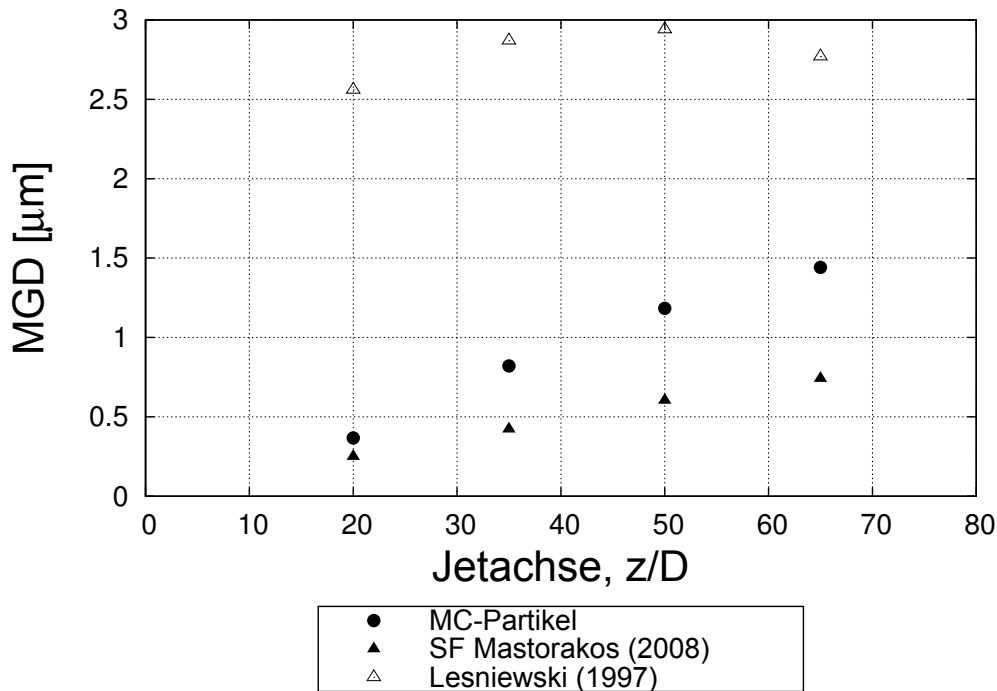


Abbildung 7.14: Massegemittelter Durchmesser entlang der Jetachse

## 7.2 Einfluss der Turbulenz

Um den Einfluss der klein- und großskaligen Turbulenz zu untersuchen, wurden Filterungs- und Mittelungsoperationen angewandt, welche die berücksichtigten Informationen bei der Berechnung abhängiger Größen reduzieren. Die MC-Partikel liefern instantane Informationen an einem bestimmten Ort. Die Berechnung der abhängigen Größen mit dieser Information und anschließender zeitlicher Mittelung (durch einen Überstrich repräsentiert) wird in Tabelle 7.2 durch  $\mathcal{F}_1$  dargestellt. Die zeitliche Mittelung der instantanen Realisierungen durch die MC-Partikel konvergiert zum statistischen Mittel der betrachteten Größe. Die Berechnung der abhängigen Größen mittels gefilterter Information (durch  $\tilde{\phantom{x}}$  repräsentiert), also ohne Feinstrukturinformation, wird durch  $\mathcal{F}_2$  symbolisiert. Dies entspricht einer Berechnung der abhängigen Größen basierend auf einer räumlich gefilterten Skalarverteilung, bei welcher die Effekte der kleinskaligen Turbulenz durch die Filterungsoperation nicht mehr berücksichtigt werden. Die Berechnung mit räumlich gefilterter und zeitlich gemittelter Information wird durch  $\mathcal{F}_3$  repräsentiert. Durch die zeitliche Mittelung der den Berechnungen zugrunde liegenden Größen wird der Einfluss der durch die LES aufgelösten turbulenten Strukturen vernachlässigt. Die Differenz der Größen  $\mathcal{F}_1$  und  $\mathcal{F}_2$  kann somit als Indikator für den Einfluss der Korrelationen der kleinskaligen Turbulenz betrachtet werden. Die Differenz der Größen  $\mathcal{F}_3$  und  $\mathcal{F}_2$  kann als Indikator des Einflusses der räumlich und zeitlich aufgelösten turbulenten Strukturen betrachtet werden. Im Folgenden wird der Effekt anhand der Sättigung (S), der homogenen Nukleationsrate (B) und der Kondensationsrate der ersten Sek-

tion der Größenverteilungsfunktion (G) betrachtet. Es wurde das LES-Netz mit 1 Million LES-Zellen und  $N_{MC,min} = 10$ ,  $N_{MC,max} = 30$  verwendet, dies entspricht der Rechnung F1 in Tabelle 6.1.

Tabelle 7.2: Definition der Berechnung abhängiger Größen

Größe	Definition
$\mathcal{F}_1$	$\bar{F}(S, \sigma(T), T, N_v)$
$\mathcal{F}_2$	$\bar{F}(\bar{S}, \sigma(\bar{T}), \bar{T}, \bar{N}_v)$
$\mathcal{F}_3$	$F(\bar{S}, \sigma(\bar{T}), \bar{T}, \bar{N}_v)$

In Abbildung 7.15 ist der Mischungsbruch in einer Ebene zu betrachten, welche die Jetachse enthält. Die instantanen Realisierungen durch die MC-Partikel sind in Abbildung 7.15(b) bei einer Sekunde Simulationszeit dargestellt. Dies sind die Größen zur Berechnung von  $\mathcal{F}_1$  aus Tabelle 7.2. Die gewichteten Mittelwerte aller Realisierungen durch die MC-Partikel in der jeweiligen LES-Zelle zu diesem Zeitpunkt sind in Abbildung 7.15(c) zu betrachten. Dies entspricht einer räumlichen Filterung und mit diesen Größen wird  $\mathcal{F}_2$  aus Tabelle 7.2 berechnet. Die zeitlich gemittelte Darstellung zu diesem Zeitpunkt (Mittelungszeit von 0,7 bis 1 Sekunde Simulationszeit) kann in Abbildung 7.15(d) betrachtet werden. Diese Größen werden zur Berechnung von  $\mathcal{F}_3$  aus Tabelle 7.2 verwendet. Es ist augenscheinlich, dass die MC-Partikel aus der Düse nur langsam mischen und auch weit stromab noch MC-Partikel mit hohen Mischungsbrüchen vorhanden sind. Die Darstellung von  $\mathcal{F}_2$  zeigt aufgrund der Beimischung der MC-Partikel aus dem Hüllstrom niedrigere gefilterte Werte als die instantanen Realisierungen der MC-Partikel mit Mischungsbrüchen deutlich über dem Mittelwert vermuten lassen. Durch die zeitliche Mittelung geht abermals Information verloren und  $\mathcal{F}_3$  zeigt einen glatten Verlauf.

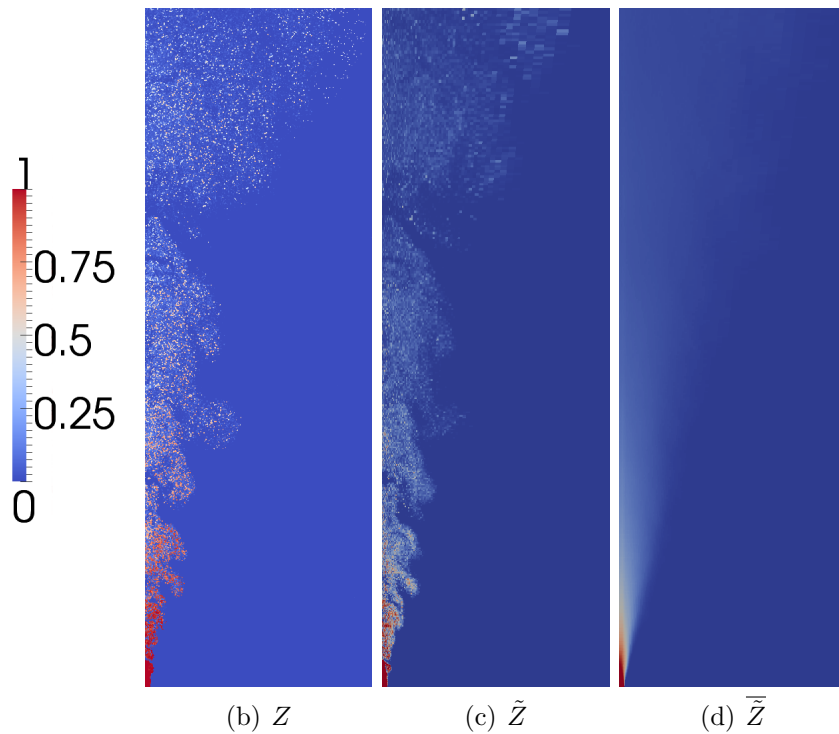


Abbildung 7.15:  $Z$  auf den MC-Partikeln,  $\tilde{Z}$  auf dem LES-Gitter sowie die zeitliche Mittelung ( $\bar{\tilde{Z}}$ ) in einer Ebene, welche die Jetachse enthält

In Abbildung 7.16 sind die zeitlich gemittelten quadratischen Abweichungen der instantanen MC-Partikel-Werte (entspricht Abbildung 7.15(b)) von  $Z$  und  $B$  von den jeweiligen gefilterten LES-Zell-Werten  $\tilde{Z}$  und  $\tilde{B}$  (entspricht Abbildung 7.15(c)) dargestellt. Die Betrachtung zeigt die zeitlich gemittelte Fluktuation der einzelnen Realisierungen um den zellgefilterten Wert und somit die Varianz der Feinstruktur. Es ist ersichtlich, dass die Varianz im Bereich des aufbrechenden Jets und der Scherschicht stark ansteigt. Während die Varianz von  $Z$  für  $z/D > 8$  wieder absinkt bleibt die Varianz von  $B$  entlang der Jetachse auf einem sehr hohen Niveau. Dies verdeutlicht erneut die nichtlineare Abhängigkeit der Nukleationsrate von den zugrunde liegenden Größen und somit den großen Einfluss der Feinstrukturinformation (kleinskaligen Turbulenz) auf den Prozess der Tropfenbildung. Die radialen Verläufe von  $Z$  zeigen ein lokales Minimum auf der Jetachse. Die Position des Maximums wandert mit zunehmendem Abstand von der Düse radial nach außen. Die Varianz von  $Z$  ist erneut stärker lokalisiert als die Varianz von  $B$ .

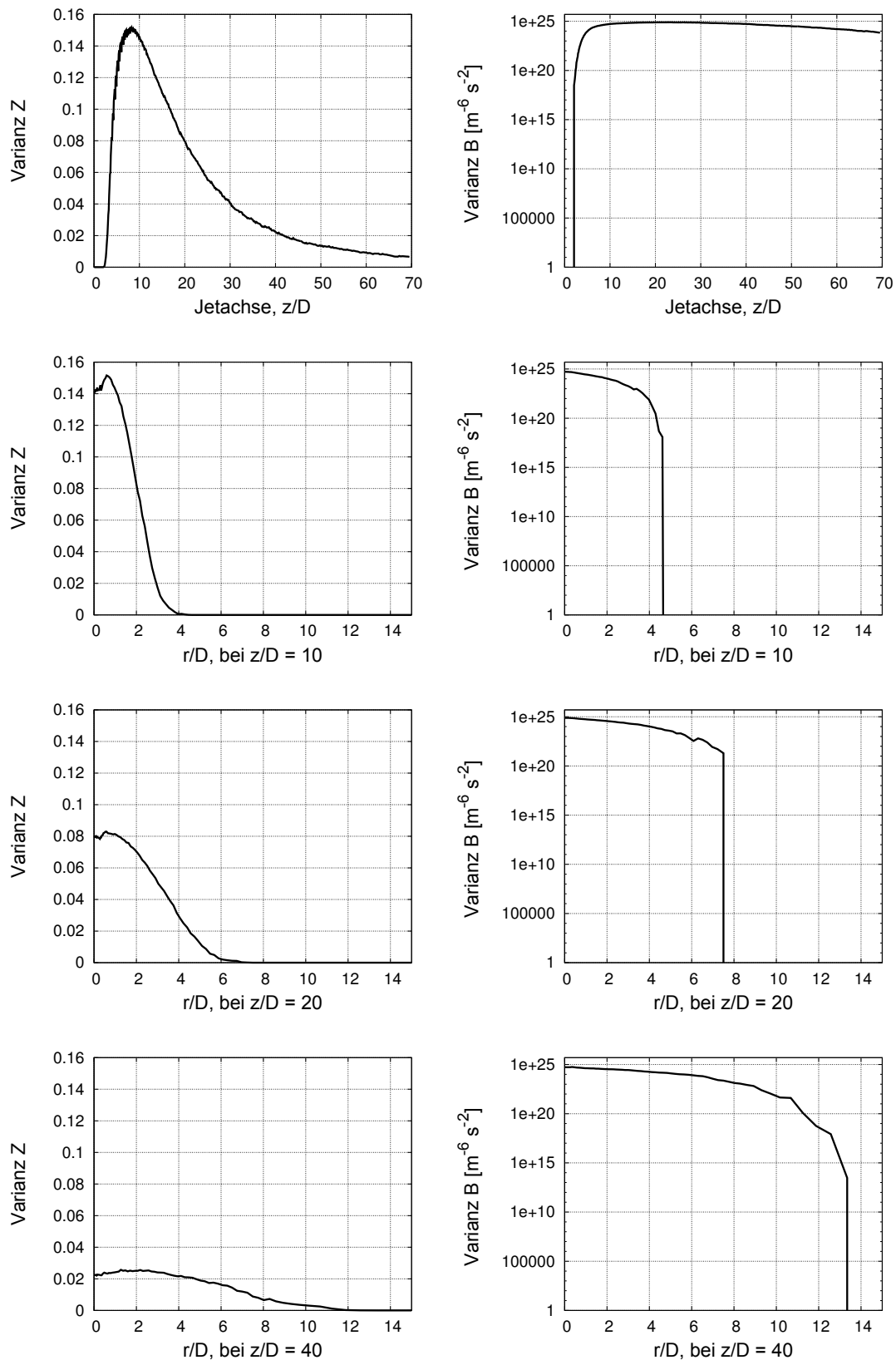


Abbildung 7.16: Zeitlich gemittelte quadratische Abweichung der instantanen MC-Partikel-Werte  $Z$  und  $B$  von den gefilterten LES-Zell-Werten  $\tilde{Z}$  und  $\tilde{B}$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$

In Abbildung 7.17 sind die instantanen gefilterten Werte ( $\tilde{Z}, \tilde{B}$ , entspricht Abbildung 7.15(c)), und die zeitlich gemittelten Verläufe von Z und B ( $\bar{\tilde{Z}}, \bar{\tilde{B}}$ , entspricht Abbildung 7.15(d)), entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  dargestellt. Während der instantane Verlauf des Mischungsbruches bereits auf den gemittelten Verlauf schließen lässt, ist dies bei der Nukleationsrate nicht ohne Weiteres möglich. Die nichtlineare Abhängigkeit der Nukleationsrate vom Mischungsbruch führt zu hohen Schwankungen der instantanen Werte.

Die quadratische Abweichung der gefilterten LES-Zell-Werte  $\tilde{Z}$  und  $\tilde{B}$  von den zeitlich gemittelten, gefilterten LES-Zell-Werten  $\bar{\tilde{Z}}$  und  $\bar{\tilde{B}}$  sind in Abbildung 7.18 entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$  dargestellt. Die Varianz des Mischungsbruchs weist hohe Werte im Bereich des aufbrechenden Jets und in der Scherschicht auf. Der Maximalwert des Verlaufes über dem Radius verschiebt sich stromab zunehmend radial nach außen und nimmt in der Höhe ab. Die Varianz der Nukleationsrate zeigt im radialen Verlauf ebenfalls Maximalwerte im Bereich der Scherschicht. Der axiale Verlauf der Varianz ist durchgehend auf einem hohen Niveau und fällt zum Ende des Rechengebietes nur leicht ab. Dies verdeutlicht den Einfluss der aufgelösten Wirbelstrukturen auf den Prozess der Tropfenbildung.

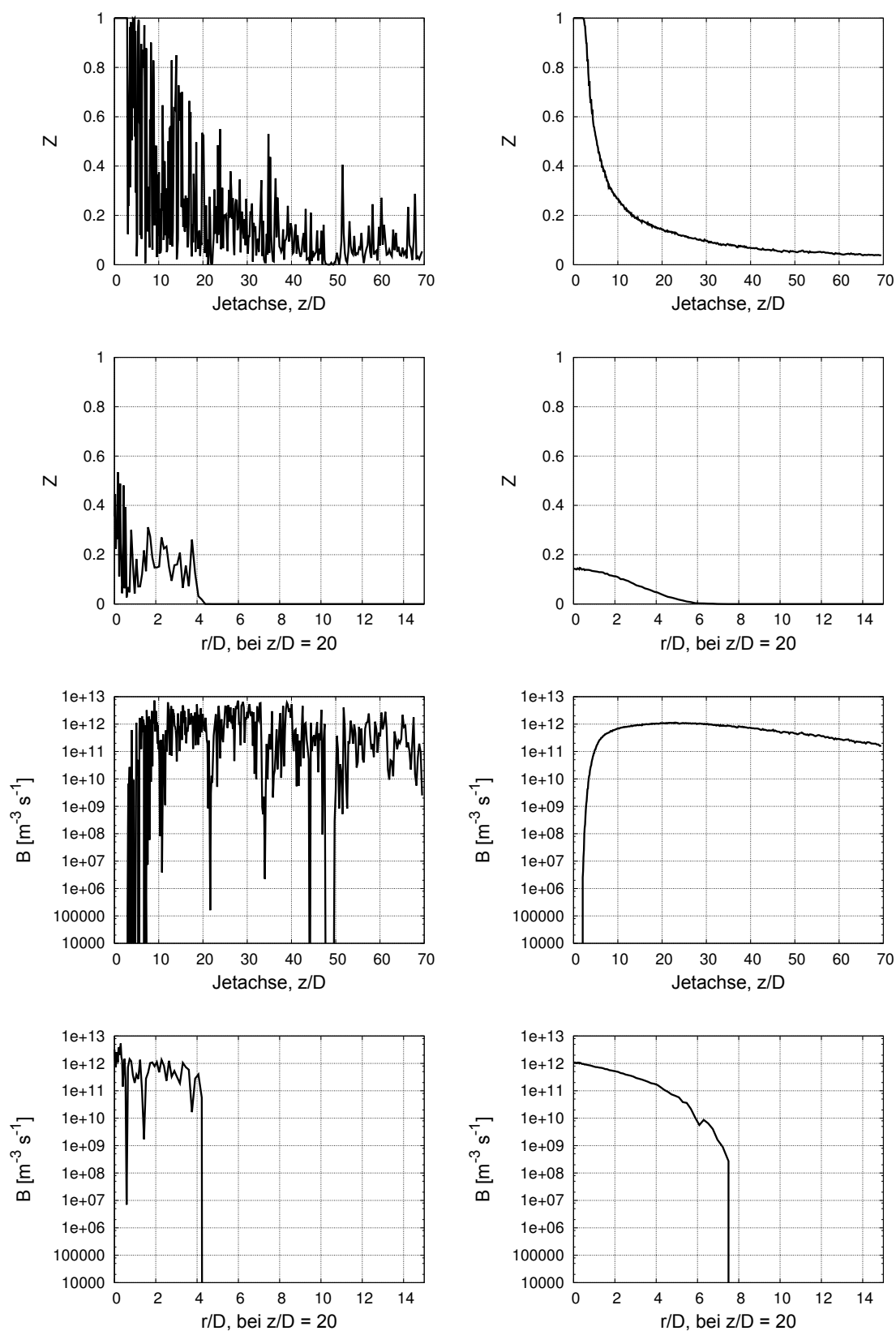


Abbildung 7.17: Gefilterter instantaner Verlauf von  $Z$  und  $B$  ( $\tilde{Z}$ ,  $\tilde{B}$ ) links und zeitlich gemittelter gefilterter Verlauf von  $Z$  und  $B$  ( $\bar{Z}$ ,  $\bar{B}$ ) rechts, entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$

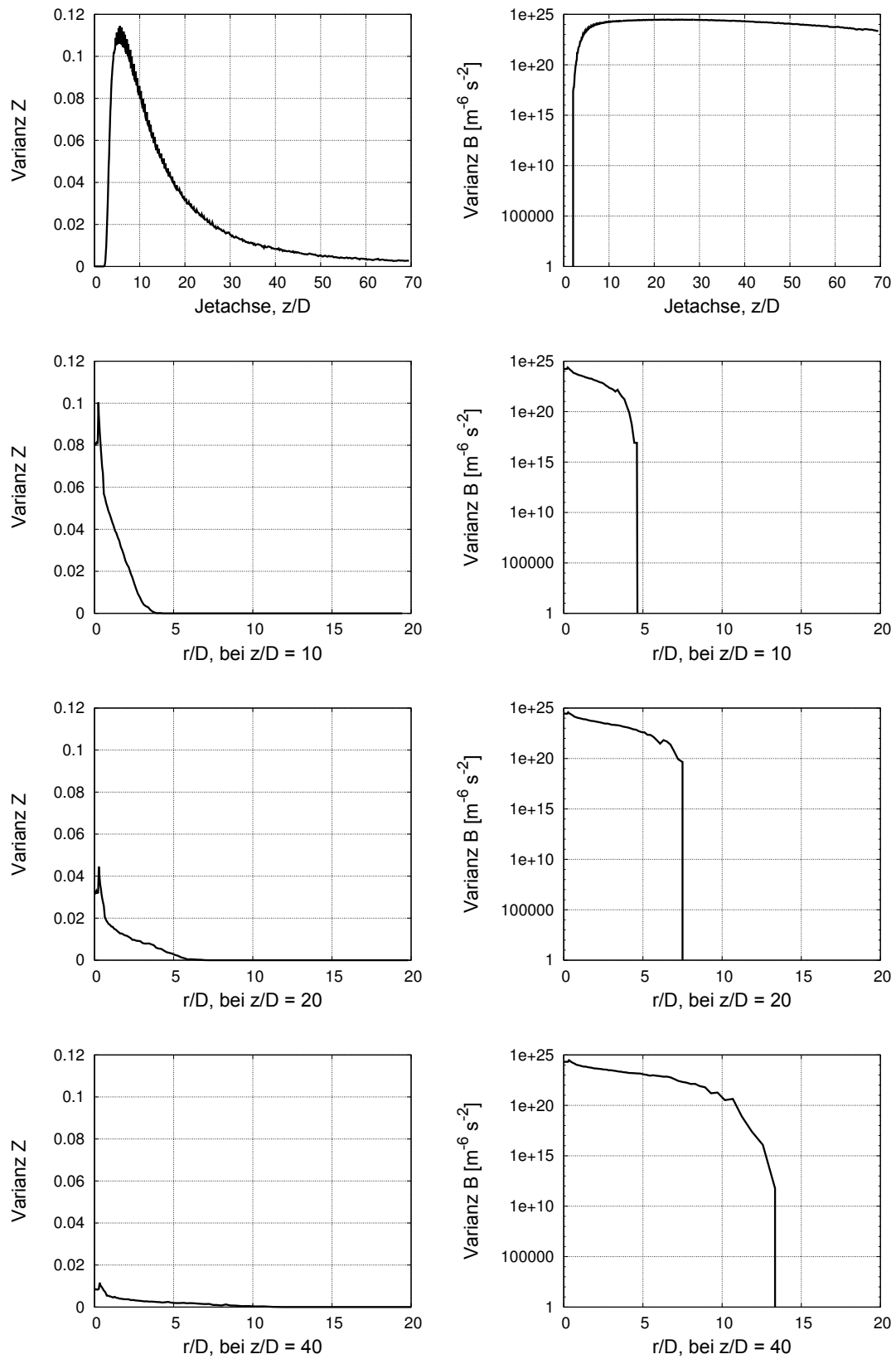


Abbildung 7.18: Zeitlich gemittelte quadratische Abweichung von  $\tilde{Z}$  und  $\tilde{B}$  von den zeitlich gemittelten LES-Zell-Werten  $\overline{\tilde{Z}}$  und  $\overline{\tilde{B}}$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$

In Abbildung 7.19 ist die Sättigung ( $S_1$ ,  $S_2$  und  $S_3$ ) entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$  aufgetragen. Zudem sind die Abweichung der Größen untereinander dargestellt. Die Abweichungen sind in Prozent angegeben und mit dem Kürzel  $\Delta(S_i, S_j) = \frac{(S_j - S_i) \cdot 100}{S_i}$  gekennzeichnet. Betrachtet man die Sättigung entlang der Jetachse, so sind die Kurvenverläufe für  $S_1$ ,  $S_2$  und  $S_3$  stark unterschiedlich. Die Kurve  $S_1$  zeigt einen steilen Anstieg bis  $z/D \approx 6$ , der Anstieg flacht anschließend ab. Die initiale Steigung von  $S_2$  ist flacher als die von  $S_1$ . Die Steigung von  $S_2$  flacht bei  $z/D \approx 8$  ab. Der Vergleich von  $S_3$  und  $S_2$  zeigt einen etwas steileren initialen Anstieg von  $S_3$ . Der Anstieg von  $S_3$  ist jedoch nicht so stark wie die initiale Steigung von  $S_1$ .  $S_3$  erreicht deutlich höhere Werte als  $S_2$  und  $S_1$  und bildet ein Maximum bei  $z/D \approx 40$ . Die prozentuale Abweichung der Größe  $S_2$  von  $S_1$  ( $\Delta(S_1, S_2)$ ) erreicht nach dem Aufbrechen des Jets einen Spitzenwert von 50% und flacht im weiteren Verlauf des Rechengebietes ab, bis im Bereich  $z/D > 50$  Werte von -40% erreicht werden. Die Verläufe von  $\Delta(S_1, S_3)$  und  $\Delta(S_2, S_3)$  haben einen breiteren Bereich höchster Werte von 86% und 93%, fallen im weiteren Verlauf jedoch stark ab und erreichen für  $z/D > 10$  ebenfalls negative Werte.

Die Sättigung aufgetragen über dem Radius bei  $z/D = 10$  zeigt ein lokales Minimum auf der Jetachse für  $S_2$  und  $S_3$ .  $S_1$  weist ein Maximum auf der Jetachse auf. Der Vergleich von  $S_2$  und  $S_3$  zeigt eine Verschiebung des Maximums nach außen mit zunehmend schmalere Konturen und höheren Amplituden. Die prozentuale Abweichung von  $S_3$  zu  $S_1$  beträgt bis zu -2400%.

Die Betrachtung des radialen Verlaufs bei  $z/D = 20$  zeigt, dass die Maxima von  $S_2$  und  $S_3$  radial nach außen gewandert sind.  $S_1$  zeigt weiterhin ein Maximum auf der Jetachse und hat ebenfalls in der radialen Ausdehnung zugenommen. Die maximale prozentuale Abweichung der Kurven untereinander beträgt  $\Delta(S_1, S_3) = -690\%$ .

Der radiale Verlauf bei  $z/D = 40$  zeigt sehr ähnliche Verläufe aller betrachteten Größen.  $S_2$  weist ein schwaches Minimum auf der Jetachse auf.  $S_3$  zeigt ein plateauartiges Maximum auf der Jetachse welches sich bis  $r/D \approx 4$  erstreckt.  $S_1$  und  $S_2$  weisen eine maximale Abweichung von  $\Delta(S_1, S_2) = -150\%$  auf. Die Differenz der Maximalwerte und die radiale räumliche Verschiebung hat mit steigendem Abstand von der Düse stark abgenommen, was der abnehmenden Intensität der Turbulenz zuzuschreiben ist. Die zeitliche Information hat bei dieser Betrachtung den größten Einfluss. Die zweidimensionalen räumlichen Darstellungen von  $S_1$ ,  $S_2$  und  $S_3$  in Abbildung 7.20 zeigen schärfere, radial nach außen verlagerte Konturen mit höheren Maximalwerten der Sättigung je weniger von der Turbulenz bei der Berechnung der abhängigen Größen berücksichtigt wird und verdeutlichen die bereits an den Linienplots erörterten Tendenzen.



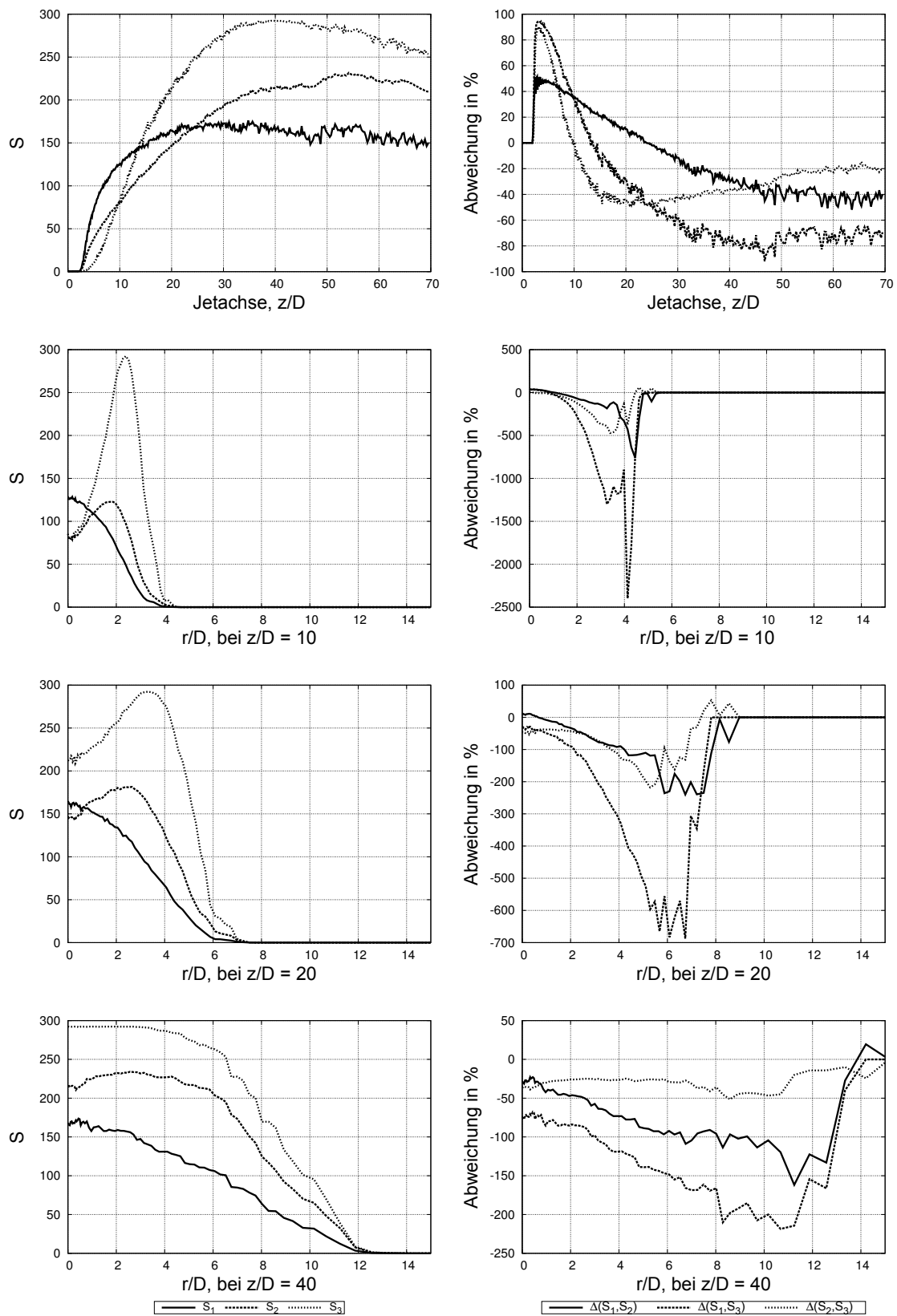


Abbildung 7.19:  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$  sowie prozentuale Unterschiede

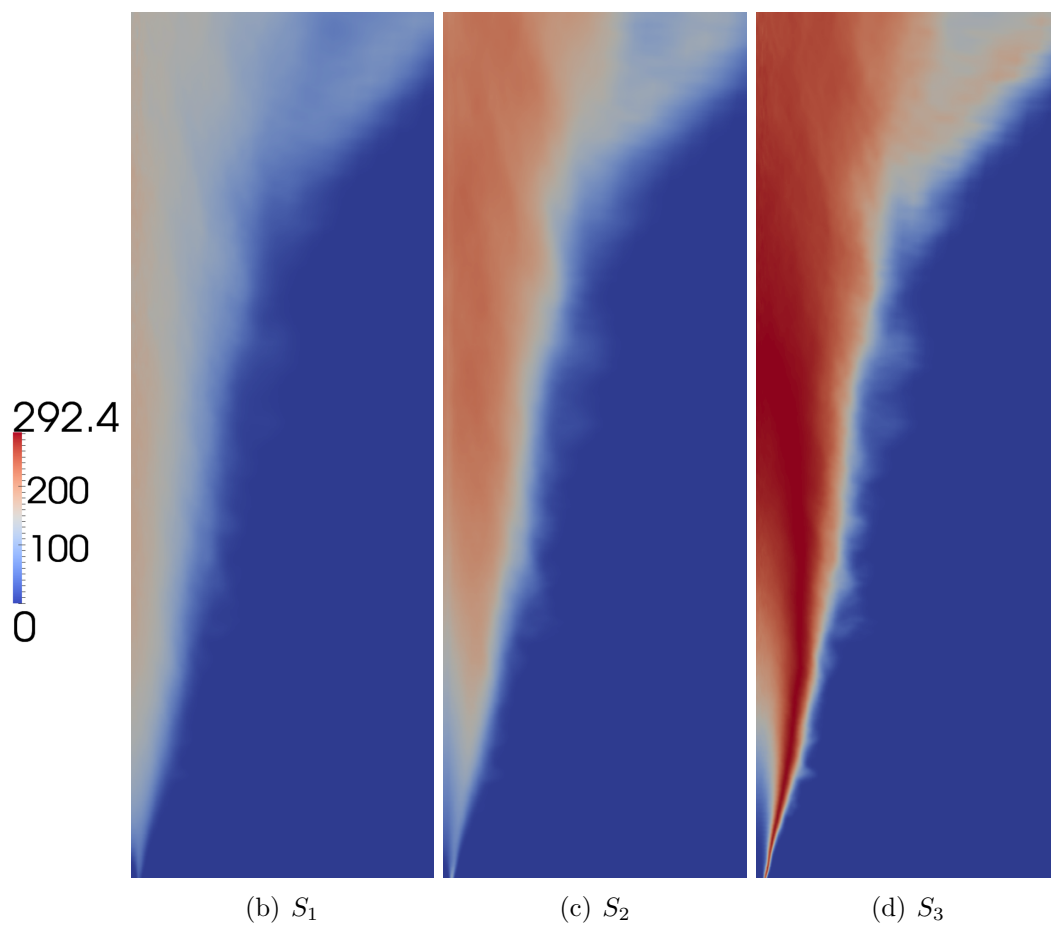


Abbildung 7.20:  $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$  in einer Ebene, welche die Jetachse enthält. Der Wertebereich der Legende entstammt  $S_3$

In Abbildung 7.21 ist die Nukleationsrate entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$  aufgetragen. Betrachtet man die Nukleationsrate entlang der Jetachse, so ist der qualitative Verlauf von  $B_1$  und  $B_2$  sehr ähnlich. Ein steiler Anstieg bei  $z/D \approx 2$  flacht bei  $z/D \approx 3$  ab, um ein plateauartiges Maximum zu erreichen.

Die Werte von  $B_2$  liegen über den Werten von  $B_1$ . Der Verlauf von  $B_3$  unterscheidet sich deutlich von den Verläufen der anderen Kurven. Signifikante Werte werden erst bei  $z/D = 6$  erreicht. Der folgende Anstieg der Werte ist moderater als der von  $B_1$  und  $B_2$ . Die Kurve liegt bis  $z/D < 12$  unter den Werten von  $B_1$  und  $B_2$ , im Bereich  $14 < z/D < 40$  darüber, sinkt jedoch im weiteren Verlauf erneut unter die Anderen ab. Das frühere Einsetzen der Nukleation  $B_1$  führt zunächst zu sehr hohen Differenzen im Vergleich zu  $B_2$ .

Der Verlauf der Nukleationsrate über dem Radius bei  $z/D = 10$  zeigt ein lokales Minimum auf der Jetachse von  $B_2$  und  $B_3$ .  $B_1$  zeigt ein Maximum auf der Jetachse und ähnelt im Verlauf dem von  $B_2$ .  $B_1$  und  $B_2$  weisen eine ähnliche radiale Ausdehnung der Verteilung auf.  $B_3$  zeigt im Vergleich eine lokalisiertere Verteilung mit höherem Maximum und kleinerer radialer Ausdehnung.

Der radiale Verlauf bei  $z/D = 20$  zeigt ein lokales Maximum von  $B_1$  auf der Jetachse.  $B_2$  und  $B_3$  zeigen nur sehr schwache Minima auf der Jetachse. Die Bereiche höchster Werte haben sich stark verbreitert und die radiale Ausdehnung der Verteilung hat zugenommen.

Betrachtet man den radialen Verlauf der Nukleation bei  $z/D = 40$ , so ist zu erkennen, dass die Verteilungen weiter in radialer Ausdehnung zugenommen haben. Die Verläufe von  $B_1$  und  $B_2$  weisen sehr breite Verteilungen auf. Der Verlauf der Kurven ist sehr ähnlich und es ist anzunehmen, dass in diesem Bereich die kleinskalige Turbulenz so weit abgeklungen ist, dass die Effekte eine untergeordnete Rolle spielen. Die großskaligen, instationären turbulenten Strukturen führen jedoch zu starken Unterschieden von  $B_3$  und den anderen betrachteten Größen.

Die zweidimensionalen räumlichen Darstellungen von  $B_1$ ,  $B_2$  und  $B_3$  in Abbildung 7.22 zeigen schärfere, radial nach außen verlagerte Konturen mit höheren Maximalwerten der Nukleationsrate je weniger von der Turbulenz bei der Berechnung der abhängigen Größen berücksichtigt wird und verdeutlichen die bereits an den Liniplots erörterten Tendenzen.

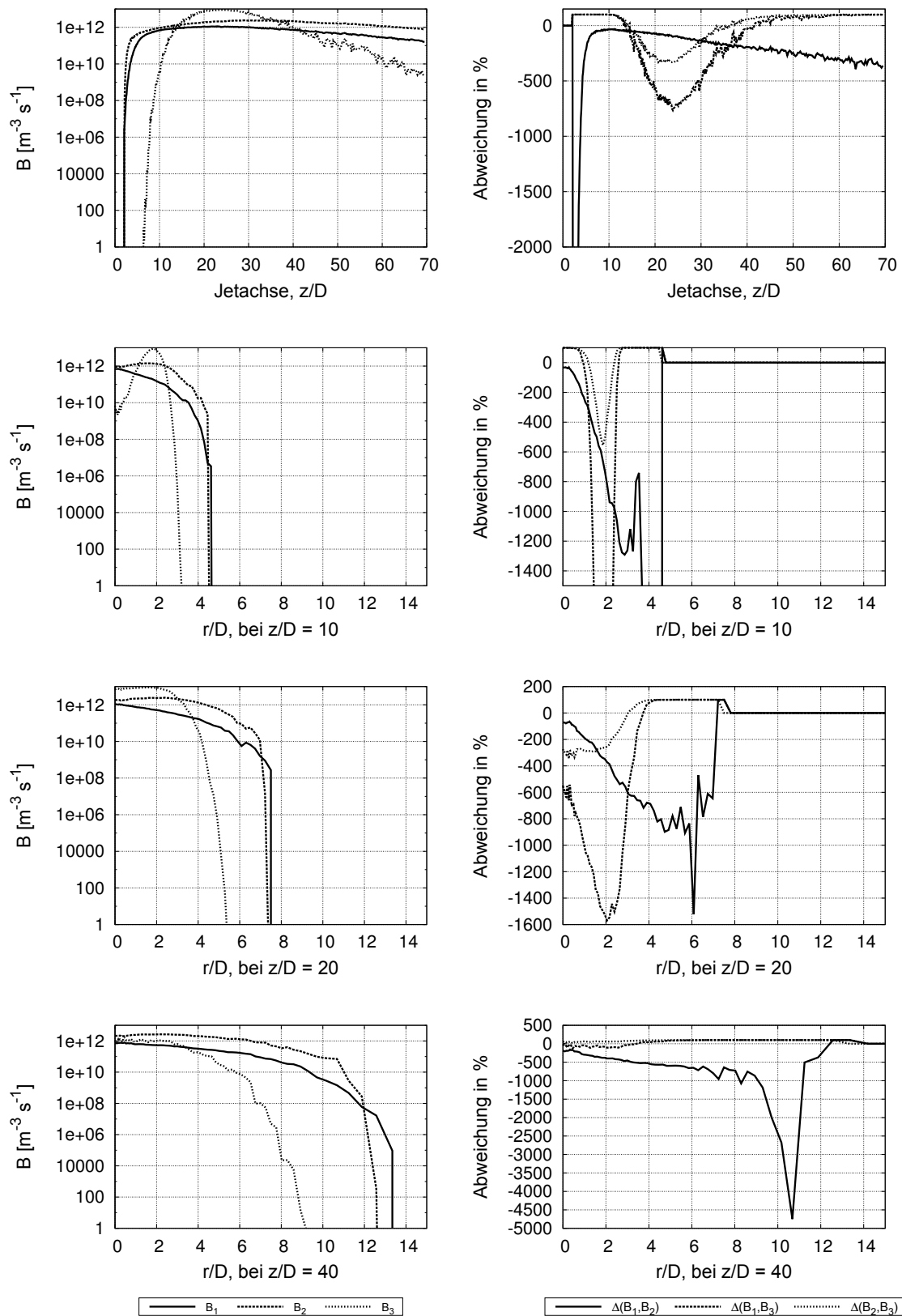


Abbildung 7.21:  $B_1$ ,  $B_2$ ,  $B_3$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$  sowie prozentuale Unterschiede

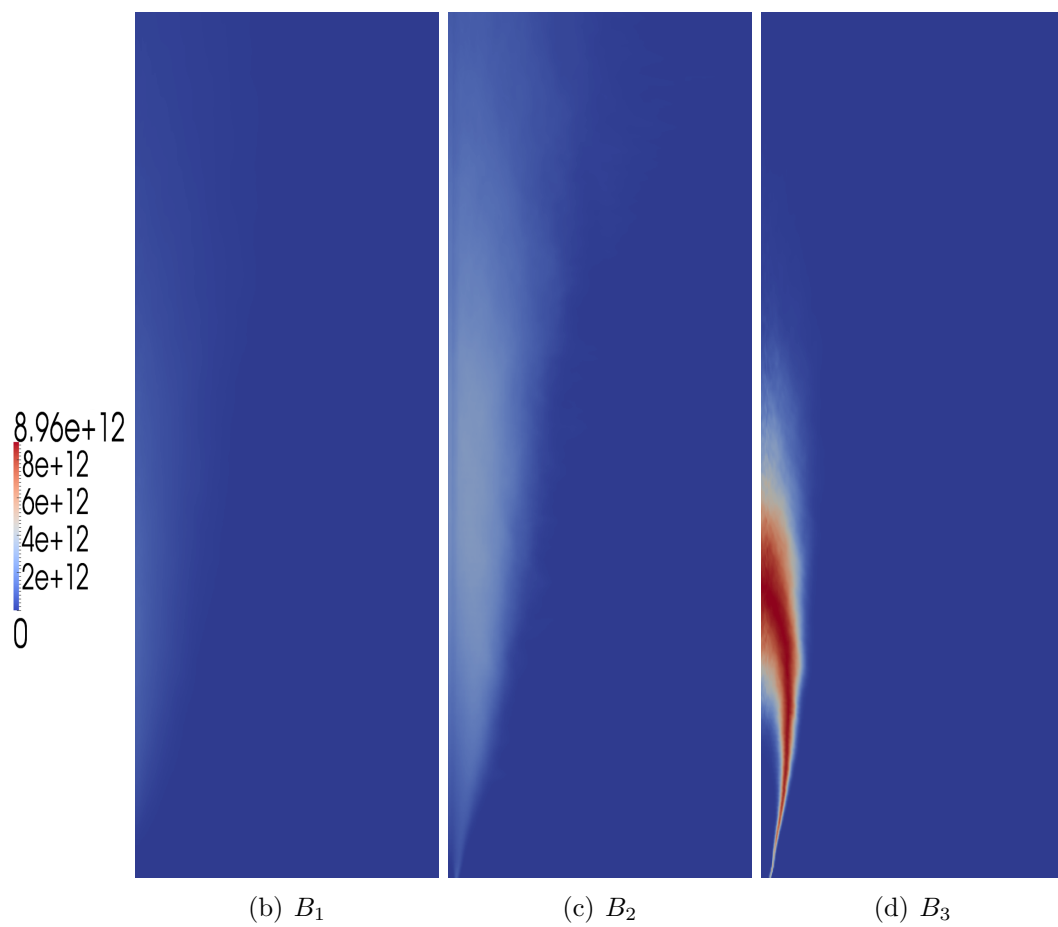


Abbildung 7.22:  $B_1$ ,  $B_2$  und  $B_3$  in einer Ebene, welche die Jetachse enthält. Der Wertebereich der Legende entstammt  $B_3$

In Abbildung 7.23 ist die Kondensationsrate der ersten Sektion entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$  und  $z/D = 40$  aufgetragen. Betrachtet man die Kondensationsrate entlang der Jetachse, so ist der qualitative Verlauf von  $G_1$  und  $G_2$  ähnlich.  $G_3$  weist einen deutlich steileren Anstieg der Kondensationsrate auf und hat ein sehr lokalisiertes Maximum. Fern von der Düse nähern sich die Kurven stark an. Der Anstieg von  $G_1$  im Bereich  $3 < z/d < 18$  ist vergleichsweise moderat und führt zu einem Maximalwert bei  $z/D = 22$ . Der Anstieg von  $G_2$  ist deutlich steiler und führt zu einem früheren, deutlich ausgeprägterem Maximum bei  $z/D = 11$ . Der Verlauf von  $G_3$  zeigt einen sehr steilen Anstieg, mit einem Maximum deutlich höherer Amplitude bei  $z/D = 4, 5$ .

Der radiale Verlauf der Kondensationsraten bei  $z/D = 10$  zeigt ein Maximum auf der Jetachse für  $G_1$  und  $G_3$ .  $G_2$  zeigt ein lokales Minimum auf der Jetachse. Der Einbruch bei  $r/D = 0, 2$  ist ein numerisches Artefakt. Die Kurvenverläufe gleichen sich mit steigendem Abstand von der Düse an und zeigen bei  $z/D = 40$  nahezu identische Verläufe.

Die zweidimensionalen räumlichen Darstellungen von  $G_1$ ,  $G_2$  und  $G_3$  in Abbildung 7.24 zeigen schärfere, radial nach außen verlagerte Konturen mit höheren Maximalwerten der Sättigung je weniger von der Turbulenz bei der Berechnung der abhängigen Größen berücksichtigt wird.

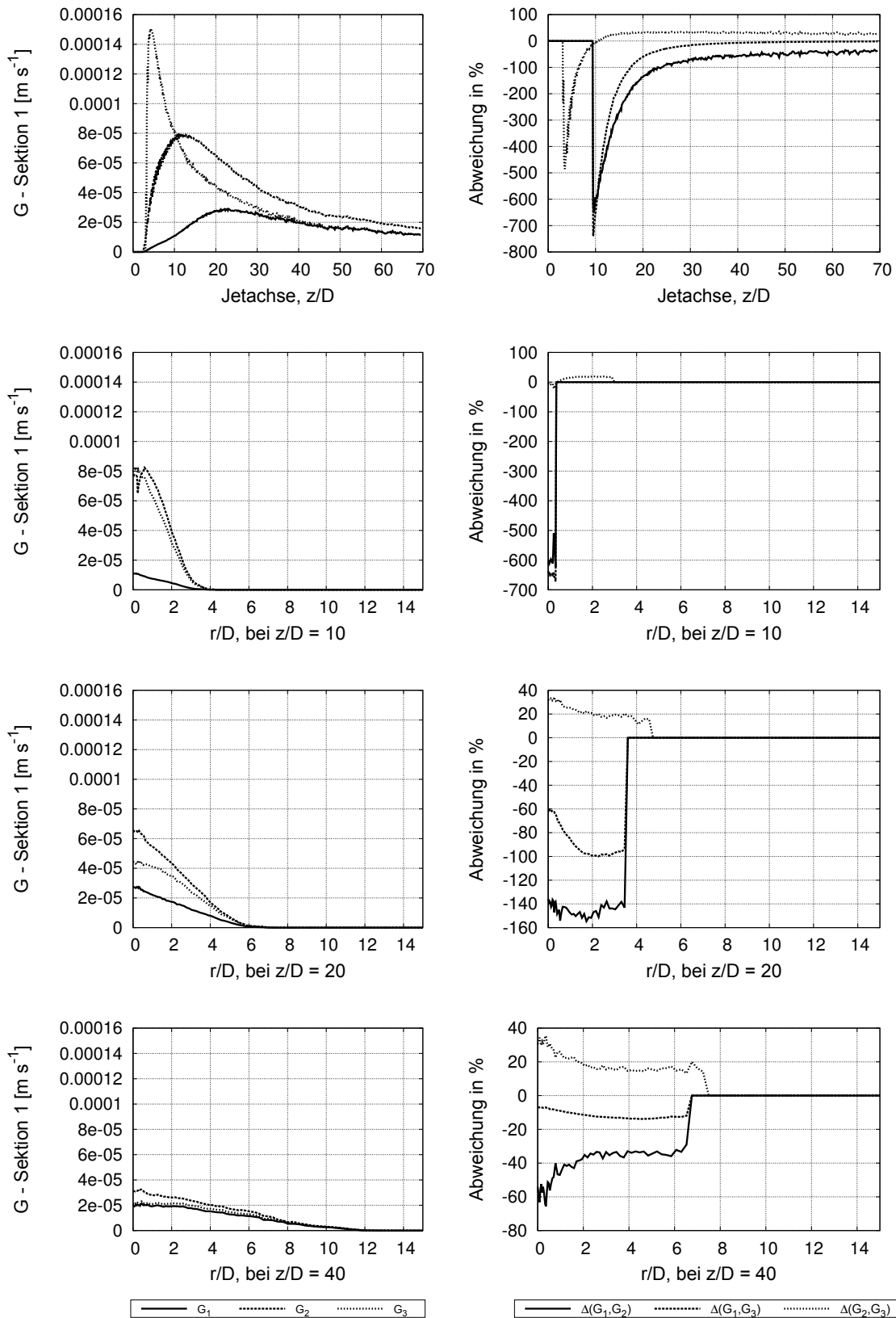


Abbildung 7.23:  $G_1, G_2, G_3$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10, z/D = 20$  und  $z/D = 40$  sowie prozentuale Unterschiede

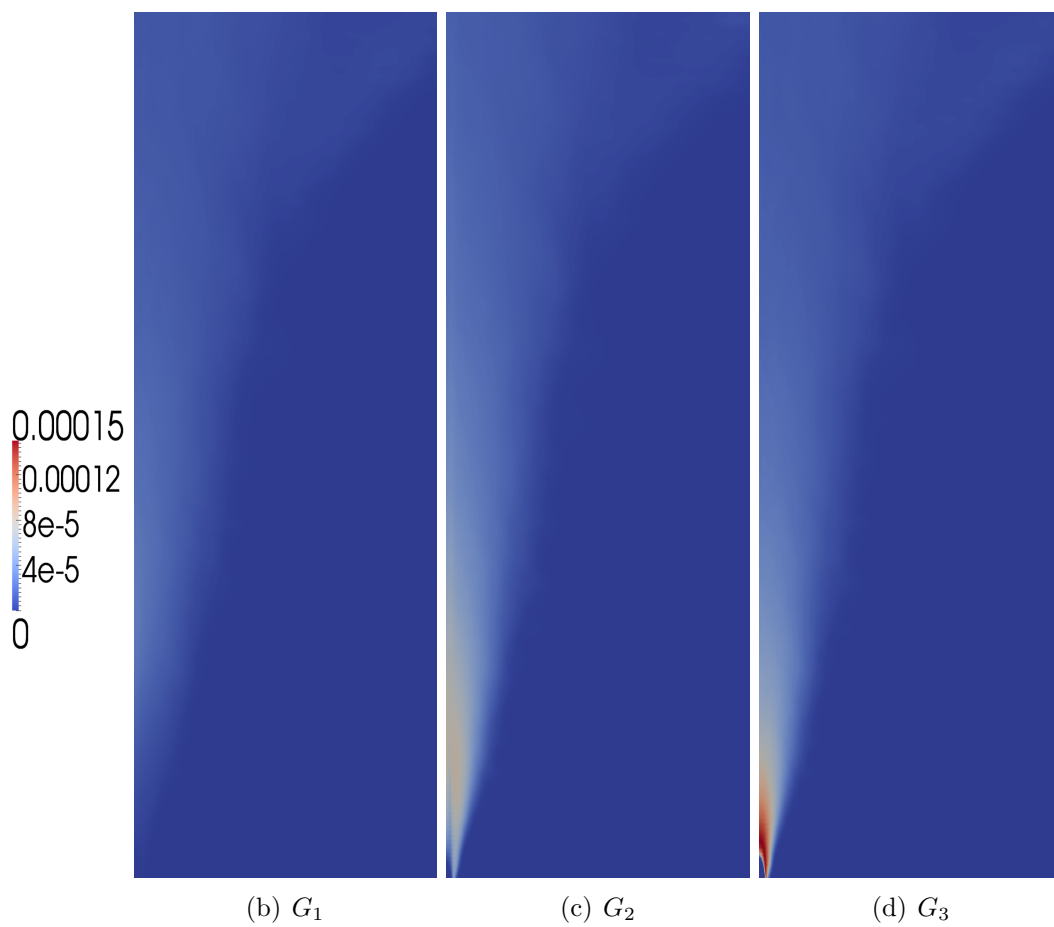


Abbildung 7.24: Kondensationsraten  $G_1$ ,  $G_2$  und  $G_3$  der ersten Sektion im Schnitt parallel der Jetachse. Der Wertebereich der Legende entstammt  $G_3$



Das Aufbrechen des Jets führt zunächst zu großen instationären dreidimensionalen Wirbelstrukturen. Der Zerfall der großen Wirbel und die Weitergabe der Energie an zunehmend kleinere Strukturen führt zu turbulenten Schwankungen, welche sich schließlich der räumlichen und zeitlichen Auflösung der LES entziehen. Insbesondere der hochsensitive Prozess der homogenen Nukleation wird von der instationären Natur der Turbulenz beeinflusst. Der hohe Einfluss der kleinskaligen Turbulenz sowie die Interaktion der turbulenten Fluktuationen der beim Phasenübergang beteiligten Skalarfelder lässt sich physikalisch durch die kleinskaligen Fluktuationen der Energie und Stoffdichte erklären, welche die Schwelle zur Clusterbildung lokal und kurzzeitig überschreiten. Der erhöhte Stoff- und Energietransport durch turbulente Schwankungen führt zu einer räumlichen Verschmierung der Skalarfelder. Zusätzlich führen die kleinskaligen Schwankungen um gefilterte LES-Zell-Werte aufgrund der hohen Sensitivität der betrachteten Prozesse zu einer zusätzlichen räumlichen Ausbreitung von Bereichen mit Tropfenbildung und Wachstum. Diese Tendenz deckt sich mit den Beobachtungen von [70] und [105] und zeigt den hohen Einfluss der groß- und kleinskaligen Turbulenz auf die Prozesse der homogenen Nukleation und Wachstum durch Kondensation.

### 7.3 Abhängigkeit von $X_{dbp}$

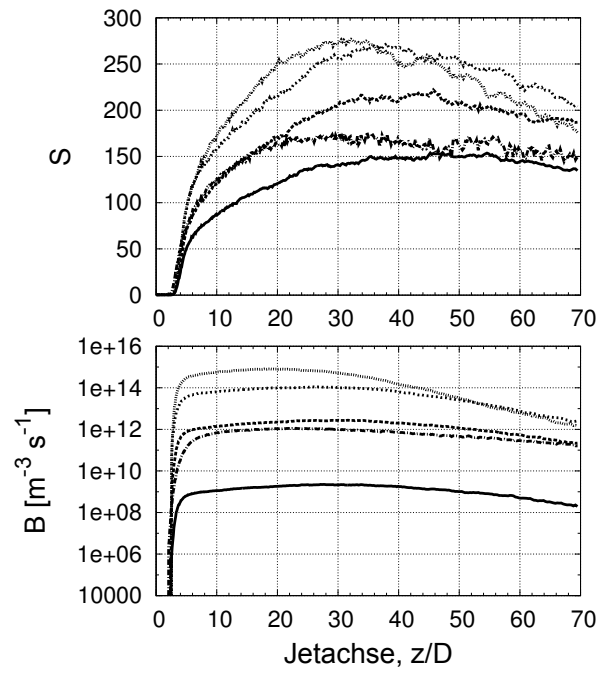
Die experimentellen Daten von Lesniewski [69] beinhalten u. a. das nullte Moment und den anzahlgemittelten Durchmesser bei  $z/D = 20$  für eine Reihe von Massenbrüchen im Bereich  $2,5 \cdot 10^{-4} < X_{dbp} < 5,1 \cdot 10^{-4}$ . Zudem stehen Datensätze aus den Simulationen von [41, 149] zur Verfügung. Wie bereits dargelegt, sind die Geschwindigkeitsprofile aller Datenquellen unterschiedlich (siehe Abbildung 6.1). Zudem wurden von [41, 149] unterschiedliche Ausdrücke für die Modellierung des Sättigungsdrucks, der Oberflächenspannung und der Nukleationsrate verwendet (siehe Abschnitt 5.2). Der quantitative Vergleich der Daten ist somit mit Bedacht durchzuführen. Das qualitative Verhalten charakteristischer Größen bei Variation der Randbedingungen dient jedoch als Indikator für die Korrektheit der Abbildung physikalischer Zusammenhänge.

In diesem Abschnitt wird zunächst das Verhalten der Sättigung, der homogenen Nukleation, der Kondensation, der kondensierten Massen und der Größenverteilungsfunktion analysiert. Im Anschluss wird das qualitative Verhalten des anzahlgemittelten Durchmessers, des nullten Moments und der Größe  $L_{43}$  bei Variation von  $X_{dbp}$  mit Daten früherer Arbeiten verglichen. Wie in Tabelle 6.1 aufgeführt, wurden Rechnungen mit  $X_{dbp} = 2,5 \cdot 10^{-4}, 2,7 \cdot 10^{-4}, 3,0 \cdot 10^{-4}, 3,6 \cdot 10^{-4}, 3,8 \cdot 10^{-4}, 4,5 \cdot 10^{-4}, 5,1 \cdot 10^{-4}$  durchgeführt. Die verwendeten Fälle tragen die Kürzel F11, F12, F13, F5, F14, F15 und F16. Die Reihenfolge der Aufzählung entspricht der aufsteigenden Folge der genannten Massenbrüche. Für die Mehrzahl der Analysen werden jedoch nur die Werte  $X_{dbp} = 2,5 \cdot 10^{-4}, 3,6 \cdot 10^{-4}, 4,5 \cdot 10^{-4}, 5,1 \cdot 10^{-4}$  verwendet, da sie das Verhalten ausreichend genau repräsentieren. Für diese Abhängigkeitsstudie wurde das LES-Netz mit 0,5 Millionen LES-Zellen mit  $N_{MC,min} = 5$  und  $N_{MC,max} = 10$  verwendet, was durch

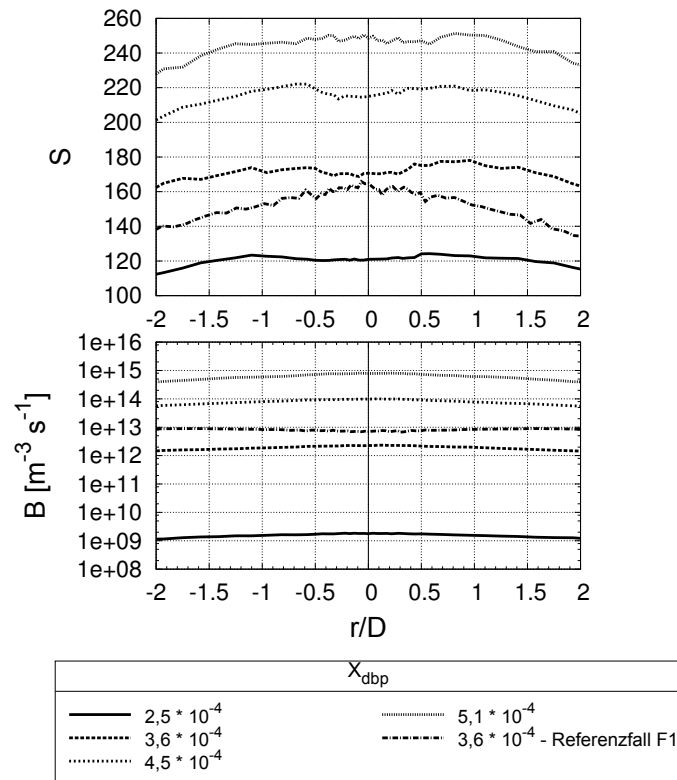
die Absicht, lediglich das qualitative Verhalten bei Variation von  $X_{dbp}$  analysieren zu wollen, gerechtfertigt werden kann.

In Abbildung 7.25 sind die Sättigung und Nukleation entlang der Jetachse (siehe Abbildung 7.25(a)) und über dem Radius bei  $z/D = 20$  (siehe Abbildung 7.25(b)) aufgetragen. Zudem sind die Daten des Referenzfalls F1 eingetragen. Es ist zu erkennen, dass der Anstieg der Sättigung entlang der Jetachse nach dem Aufbrechen des Jets für höhere  $X_{dbp}$  stärker ist. Für  $X_{dbp} = 2,5 \cdot 10^{-4}$  flacht der Anstieg bei  $z/D \approx 4$  deutlich ab und hat ein Maximum bei  $z/D = 50$ . Für  $X_{dbp} = 3,6 \cdot 10^{-4}$  flacht der Anstieg der Sättigung bei  $z/D \approx 6$  ab, findet jedoch bei  $z/D \approx 45$  ein Maximum und sinkt zum Ende der Domain wieder ab. Für  $X_{dbp} = 4,5 \cdot 10^{-4}$  und für  $X_{dbp} = 5,1 \cdot 10^{-4}$  zeigt sich ein deutliches Maximum der Sättigung bei  $z/D \approx 35$  und  $z/D \approx 30$ . Die Nukleationsrate über dem Radius, ebenfalls in Abbildung 7.25(a), zeigt ein ähnliches Verhalten. Die Nukleationsrate des Falls F16 ( $X_{dbp} = 5,1 \cdot 10^{-4}$ ) fällt bei  $z/D \approx 55$  unter die Nukleationsrate des Falls F15 ( $X_{dbp} = 4,5 \cdot 10^{-4}$ ). Dies kann durch den Massenverlust von DBP aus der Gasphase erklärt werden, welcher in Abbildung 7.27 zu betrachten ist. Der hohe Massenverlust wird durch die deutlich höhere Anzahl gebildeter Tropfen begründet. Das maximale nullte Moment von F16 ( $X_{dbp} = 5,1 \cdot 10^{-4}$ ) liegt mehr als 5 Größenordnungen über dem maximalen nullten Momente von F11 ( $X_{dbp} = 2,5 \cdot 10^{-4}$ ). Der Massenverlust aus der Gasphase durch Kondensation ist proportional zur Anzahl der Tropfen und liegt somit ebenfalls um 5 Größenordnungen höher (siehe Abschnitt 6.3). Der Vergleich der Daten von F5 mit dem Referenzfall F1 offenbart niedrigere Werte der Nukleationsrate des Falls F1. Das unterschiedliche Verhalten kann durch die geringere Anzahl der Stützstellen in den jeweiligen Dimensionen begründet werden (siehe Abschnitt 6.5).

Die Betrachtung der Sättigung und Nukleation über dem Radius bei  $z/D = 20$  (siehe Abbildung 7.25(b)) zeigt für die Sättigung ein sehr schwaches lokales Minimum auf der Jetachse. Die Nukleationswerte haben für alle Massenbrüche ihren Maximalwert auf der Jetachse. Der Referenzfall zeigt jedoch ein schwaches lokales Minimum auf der Jetachse. Die Unterschiede der Nukleationsraten betragen bis zu fünf Größenordnungen. Der Vergleich mit der Nukleationsrate des Referenzfalls F1 offenbart eine unterschiedliche räumliche Verteilung der Tropfenbildung, welche sich durch ein schwaches lokales Minimum auf der Jetachse bemerkbar macht.



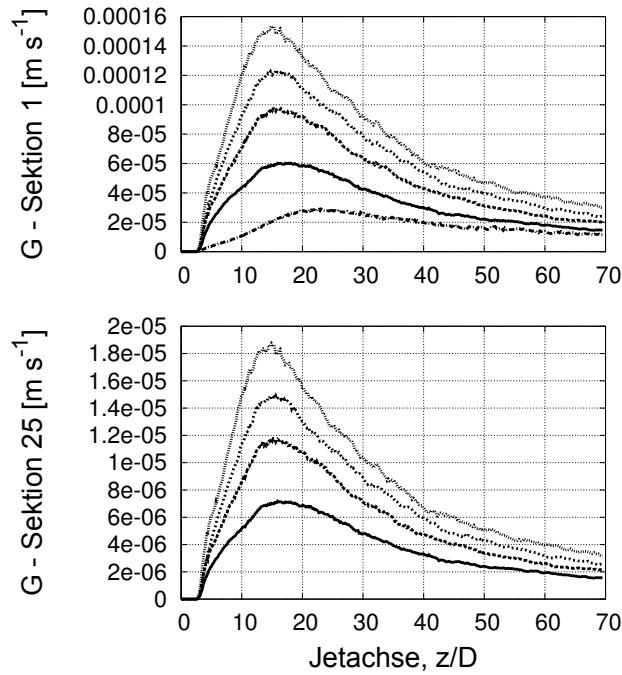
(a) Sättigung und Nukleation entlang der Jetachse



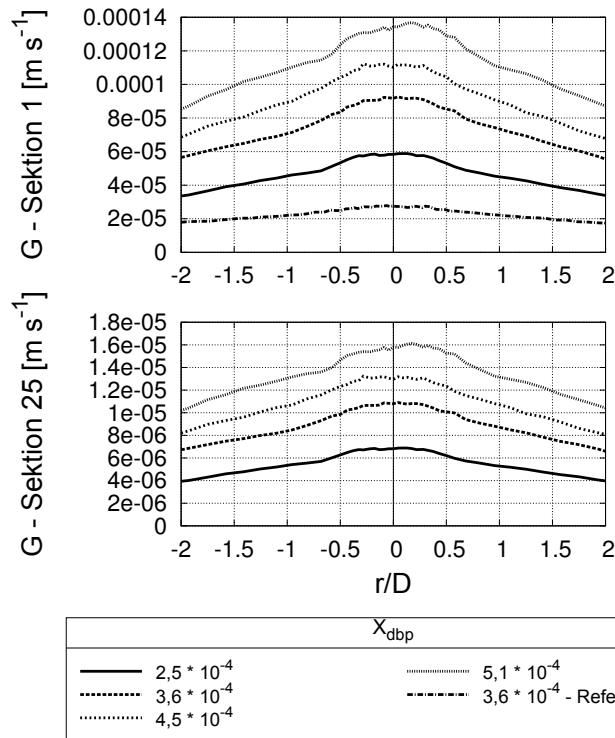
(b) Sättigung und Nukleation über  $r/D$  bei  $z/D = 20$

Abbildung 7.25: Sättigung und Nukleationsrate für verschiedene  $X_{dbp}$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$

In den Abbildungen 7.26(a) und 7.26(b) sind die Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion der Größenverteilungsfunktion für die unterschiedlichen Massenbrüche entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  aufgetragen. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Wachstumsraten mit steigender DBP-Konzentration anwachsen. Die Kurven schneiden sich nicht und höhere DBP-Konzentrationen führen stets zu schnellerem Tropfenwachstum. Der räumliche Verlauf der Wachstumsraten ist für alle DBP-Konzentrationen sehr ähnlich. Entlang der Jetachse verschiebt sich das Maximum der Wachstumsrate von  $z/D = 17$  mit steigender DBP-Konzentration stromauf und die Wachstumsrate der höchsten DBP-Konzentration findet ihr Maximum bei  $z/D = 14,5$ . Die Betrachtung des radialen Verlaufs der Wachstumsraten bei  $z/D = 20$  zeigt ein Maximum auf der Jetachse. Der Vergleich der Kondensationsrate der ersten Sektion des Falls F5 mit dem Referenzfall F1 offenbart ein früheres Ansteigen der Kondensationsrate mit einem höheren Maximalwert entlang der Jetachse. Auch der radiale Verlauf offenbart ein leicht unterschiedliches räumliches Verhalten. Die unterschiedlichen Werte der Kondensationsrate der ersten Sektion der Größenverteilungsfunktion können aufgrund der höheren Anzahl der Stützstellen dennoch zu einer ähnlichen Größenverteilungsfunktion führen (siehe Abbildung 7.29).



(a) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion entlang der Jetachse



(b) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion über  $r/D$  bei  $z/D = 20$

Abbildung 7.26: Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion für verschiedene  $X_{dbp}$  entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$

In Abbildung 7.27 ist die Abweichung der normierten DBP-Konzentration vom Mischungsbruch entlang der Jetachse aufgetragen. Die prozentual ausgefallene Masse steigt stark mit der DBP-Konzentration an. Die ausgefallene Masse beträgt am Ende der Rechendomain 0,1%, 0,9%, 11% und 34% für die Molenbrüche  $X_{dbp} = 2,5 \cdot 10^{-4}$ ,  $3,6 \cdot 10^{-4}$ ,  $4,5 \cdot 10^{-4}$ ,  $5,1 \cdot 10^{-4}$ . Wie bereits diskutiert, steigen die Nukleationsrate sowie die Kondensationsrate mit der DBP-Konzentration stark an. Die kondensierte Masse ist proportional zur Kondensationsrate und Anzahl der Tropfen. Daher fällt bei höherer DBP-Konzentration im Jet während des Abkühlvorgangs deutlich mehr Masse aus. Der Abfall der ursprünglich höheren Nukleationsraten sowie der Sättigung unter die Werte aus Rechnungen mit ursprünglich niedrigerer DBP-Konzentrationen (siehe Abbildung 7.25(a)) rührt von diesem Zusammenhang her.

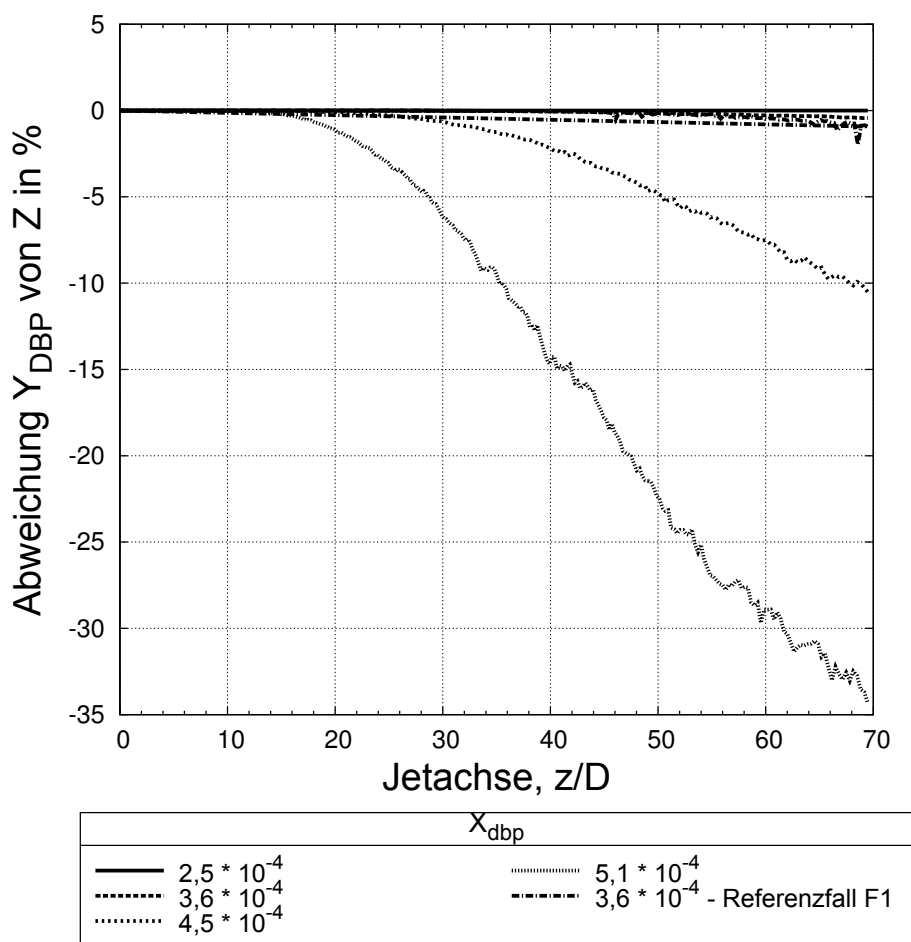


Abbildung 7.27: Prozentuale Abweichung des normierten Massenbruchs  $Y_{DBP}$  vom Mischungsbruch  $Z$  entlang der Jetachse für verschiedene  $X_{dbp}$  entlang der Jetachse

In Abbildung 7.28 ist die Größenverteilungsfunktion für verschiedene DBP-Konzentrationen gezeigt. Da die Resultate aus den Rechnungen mit unterschiedlichen DBP-Konzentrationen mehrere Größenordnungen umfassen, wurde zur

Darstellung  $dN/d\log(d_p)$  gewählt. Die Zahl der Tropfen steigt mit der DBP-Konzentration. Zudem entstehen mehr große Tropfen, das Maximum der Verteilung verschiebt sich zu höheren Durchmessern. In Abbildung 7.29 sind die Größenverteilungsfunktionen an der Stelle  $z/D = 20$  für ausgewählte Massenbrüche des DBP aus den aktuellen Simulationen sowie die experimentell ermittelten Daten von [69] zu betrachten. Die Daten von [69] zeigen nur für den Fall  $3,7 \cdot 10^{-4}$  ein eindeutig bimodales Verhalten. Die anderen experimentellen Ergebnisse weisen dieses Verhalten nicht auf, ebensowenig wie die Simulationsergebnisse. Während die Simulationsergebnisse einen klaren Trend zeigen und die Tropfendichten aus Rechnungen mit höheren Massenbrüchen des DBP stets über den Ergebnissen aus Rechnungen mit niedrigeren Massenbrüchen liegen, ist dies bei den experimentellen Ergebnissen nicht der Fall. Für  $X_{dbp} = 2,5 \cdot 10^{-4}$  verlaufen experimentelle Daten und Simulationsergebnisse für  $d_p > 0,1\mu\text{m}$  nahezu parallel. Die Simulationsergebnisse aus Rechnungen mit höheren Massenbrüchen zeigen im Bereich  $d_p < 1\mu\text{m}$  deutlich höhere Tropfendichten als die experimentellen Ergebnisse. Erneut sei aber auf die unterschiedlichen Geschwindigkeitsprofile hingewiesen. Die experimentellen Daten weisen keinerlei Tropfen mit Durchmessern kleiner  $0,01\mu\text{m}$  auf. Dies könnte durch den nicht vollständig unterdrückten Kondensationsprozess in der Absaugvorrichtung oder durch eine zu geringe Sensitivität der Messapparaturen bezüglich kleinster Tropfen zu begründen sein [149]. Der Vergleich der Daten des Falls F5 mit dem Referenzfall F1 zeigt eine sehr ähnliche Tropfenverteilungsfunktion.

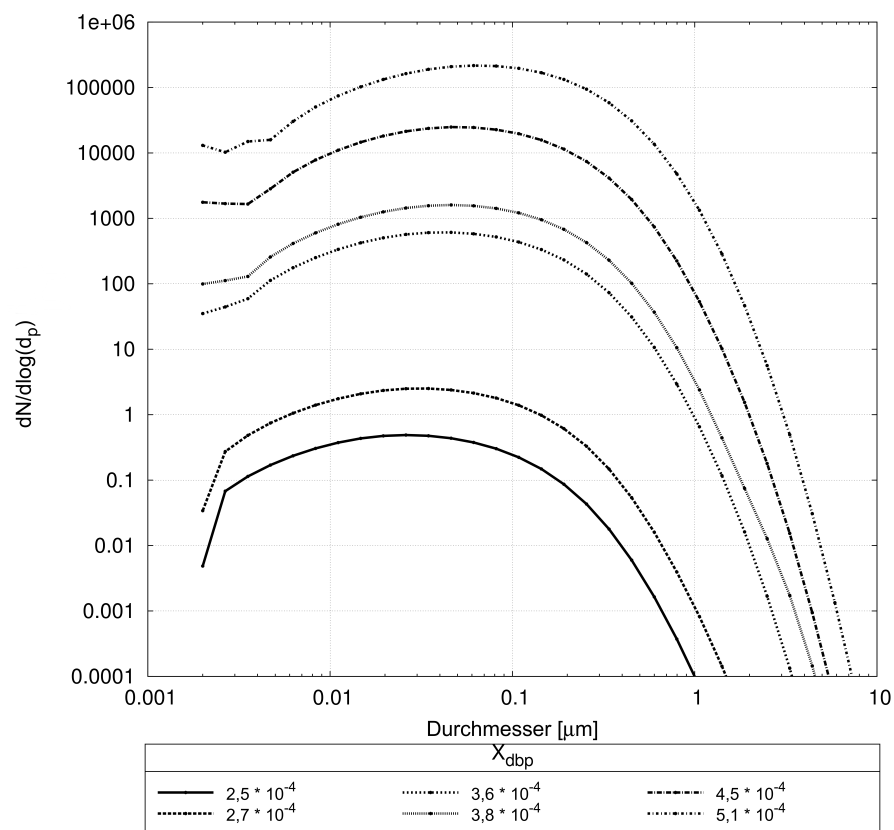


Abbildung 7.28: Größenverteilungsfunktion  $dN/d\log(d_p)$  für verschiedene  $X_{dbp}$  über dem Durchmesser bei  $z/D = 20$



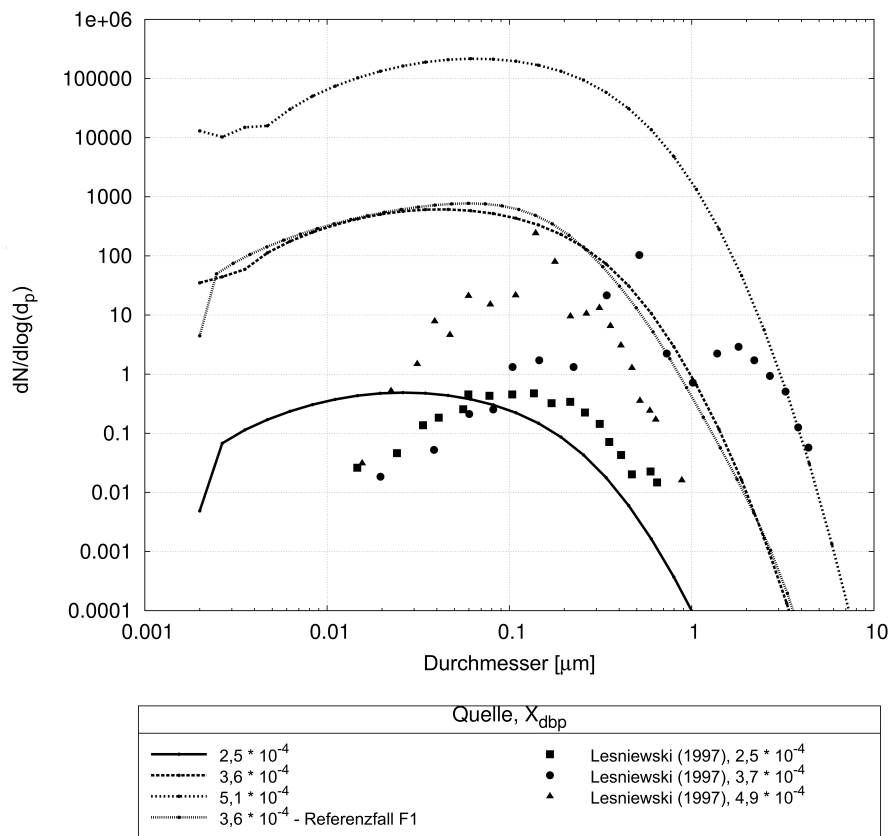


Abbildung 7.29: Größenverteilungsfunktion  $dN/d\log(d_p)$  für ausgewählte  $X_{dbp}$  über dem Durchmesser aus dieser Arbeit und [69] bei  $z/D = 20$

In Abbildung 7.30 ist das nullte Moment für verschiedene DBP-Konzentrationen entlang der Jetachse aufgetragen. Wie aus der Betrachtung der Nukleationsraten zu erwarten, unterscheidet sich  $m_0$  für die unterschiedlichen DBP-Konzentrationen um mehrere Größenordnungen. Die Form der Kurven und das relative Verhalten für unterschiedliche DBP-Konzentrationen entspricht dem bereits diskutierten Verhalten der Nukleationsraten. Der Vergleich der Daten des Falls F5 mit dem Referenzfall F1 zeigt ein unterschiedliches räumliches Verhalten der Tropfendichte. Dies lässt sich durch die unterschiedlichen Auflösungen des Lagrangen- und kartesischen Raumes erklären welche den konvektiven und diffusiven Transport beeinflussen.

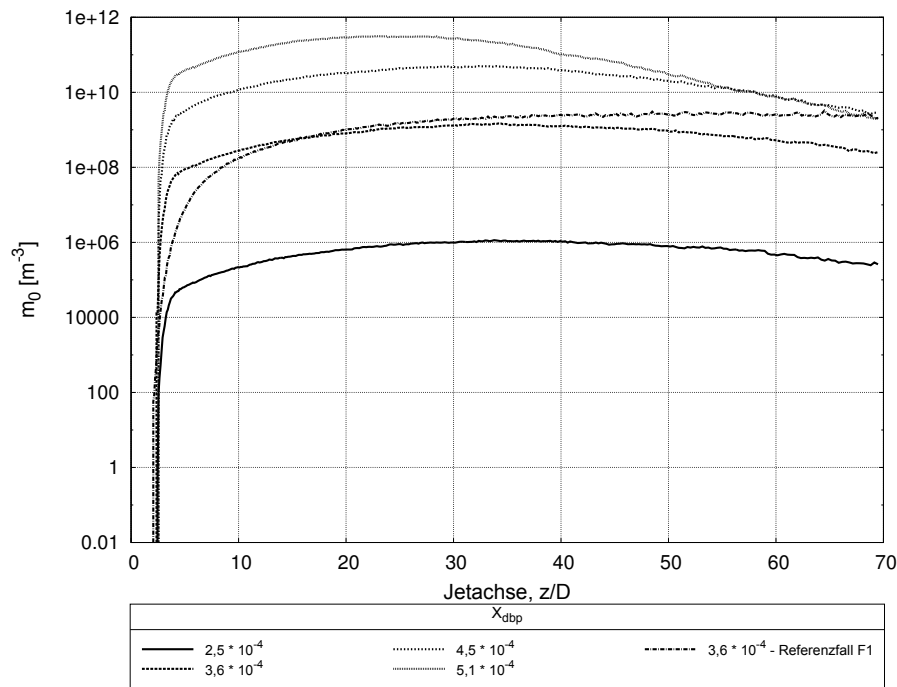
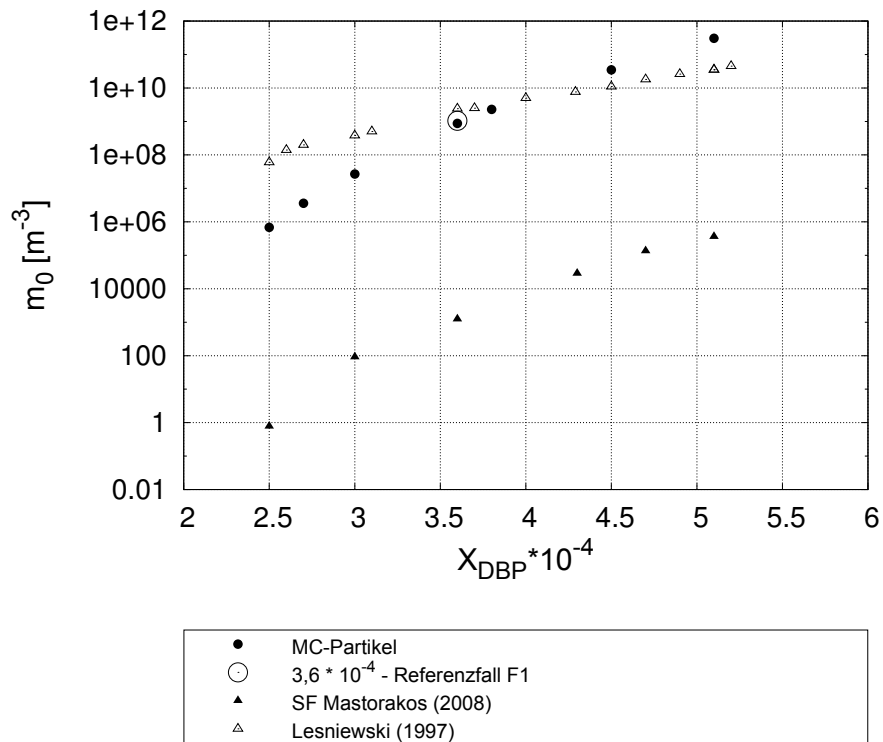
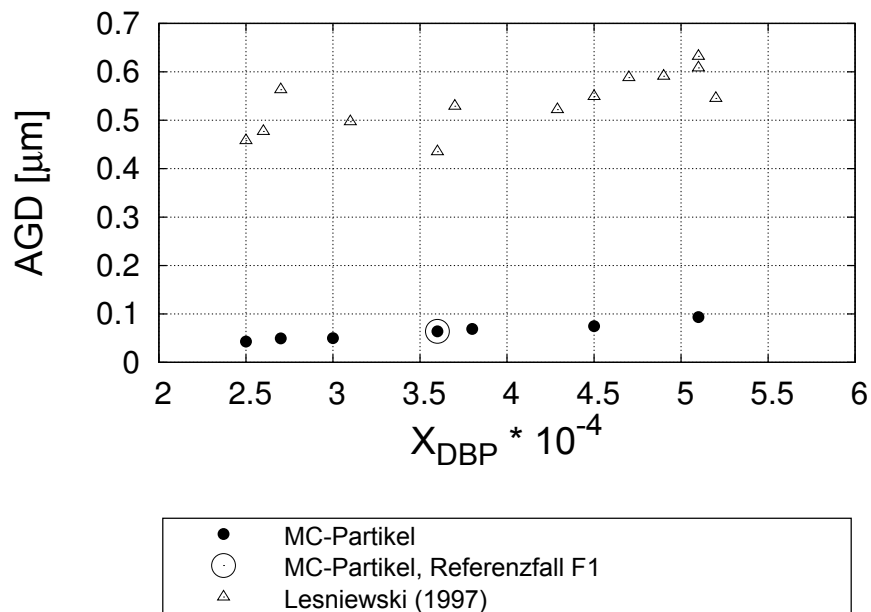


Abbildung 7.30:  $m_0$  entlang der Jetachse für verschiedene  $X_{dbp}$

In Abbildung 7.31(a) ist das nullte Moment bei  $z/D = 20$  für verschiedene DBP-Konzentrationen aufgetragen. Zusätzlich sind Daten von [41] und [69] eingezeichnet. Alle Datensätze zeigen einen exponentiellen Anstieg des nullten Momentes mit der DBP-Konzentration. Der Verlauf der Kurven von [41] und den Simulationsergebnissen dieser Arbeit ist nahezu parallel. Die Ergebnisse von [69] finden sich in ähnlichen Wertebereichen wieder, wie die der durchgeführten Simulationen. Diese Übereinstimmung ist aber aufgrund der unterschiedlichen Geschwindigkeitsprofile (siehe Abschnitt 6.2) von geringer Aussagekraft bezüglich der Güte der Simulationen oder Experimente. Der Vergleich der Daten des Falls F5 mit dem Referenzfall F1 zeigt ein nahezu identisches nulltes Moment.

In Abbildung 7.31(b) ist der AGD bei  $z/D = 20$  für verschiedene DBP-Konzentrationen aufgetragen. Die Ergebnisse von [69] weisen ebenfalls eine näherungsweise lineare Abhängigkeit des AGD von der DBP-Konzentration auf. Die Steigung ist nahezu identisch, was auf eine physikalisch korrekte Umsetzung

des LES-PDF-MC-Partikel-Konzepts hindeutet. Wie in Abbildung 7.28 zu erkennen ist, führen die durchgeführten Simulationen zu deutlich mehr kleineren Partikeln als die experimentellen Ergebnissen nahelegen. Die experimentellen Daten weisen jedoch keinerlei Tropfen mit Durchmessern kleiner  $0,01 \mu\text{m}$  auf. Dies könnte durch den nicht vollständig unterdrückten Kondensationsprozess in der Absaugvorrichtung oder durch eine zu geringe Sensitivität der Messapparaturen bezüglich kleinster Partikel zu begründen sein [149]. Dies könnte den durchweg höheren AGD aus den Experimenten von [69] erklären. Auffällig ist auch die deutlich höhere Streuung der experimentellen Daten des AGD im Vergleich zu denen des nullten Moments, was die Güte der Messungen der Tropfengröße fraglich erscheinen lässt. Der Vergleich der Daten des Falls F5 mit dem Referenzfall F1 zeigt abermals eine gute Übereinstimmung.

(a)  $m_0$  über  $X_{dbp}$  bei  $z/D = 20$ (b) Anzahlgemittelter Durchmesser über  $X_{dbp}$  bei  $z/D = 20$ Abbildung 7.31:  $m_0$  und Anzahlgemittelter Durchmesser über  $X_{dbp}$ , Simulationen dieser Arbeit, aus [41] und experimentelle Ergebnisse aus [69]

In Abbildung 7.32 ist  $L_{43} = \frac{m_4}{m_3}$  über  $X_{dbp}$  bei  $z/D = 20$  aufgetragen. Zusätzlich zu Ergebnissen dieser Arbeit sind die Daten von [149] zu betrachten. Beide Datensätze zeigen einen linearen Anstieg von  $L_{43}$  mit der DBP-Konzentration. Die Daten von [149] steigen von  $L_{43} = 0,16\mu m$  bis  $L_{43} = 0,24\mu m$ . Die Daten dieser Arbeit steigen von  $L_{43} = 0,02\mu m$  bis  $L_{43} = 0,03\mu m$ . Die Steigungen der Ergebnisse von [149] ist leicht höher als die der Daten dieser Arbeit. Der Referenzfall F1 liefert einen vergleichbaren Wert wie der Fall F5. Erneut sei aber auch an dieser Stelle auf die unterschiedlichen Geschwindigkeitsfelder hingewiesen.

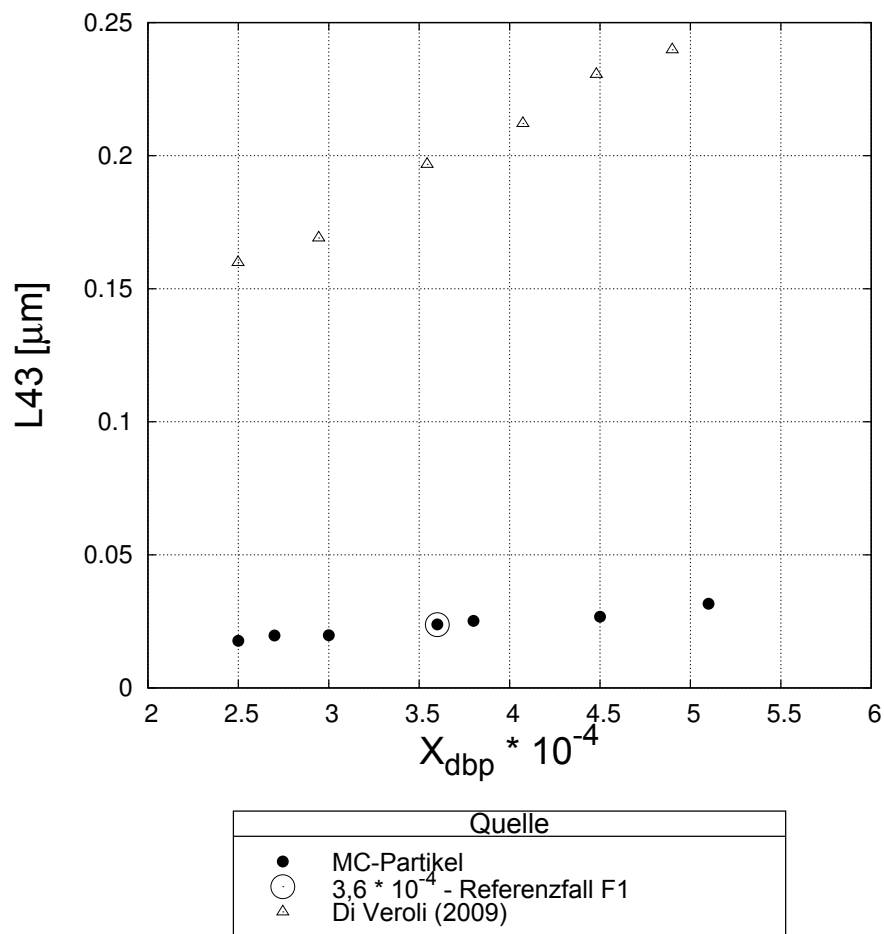


Abbildung 7.32:  $L_{43}$  über  $X_{dbp}$  bei  $z/D = 20$ , Ergebnisse dieser Arbeit und von [149]

Der Vergleich der aktuellen Simulationsergebnisse mit den experimentellen Daten von [69] zeigt ein übereinstimmendes Verhalten des nullten Momentes und des AGD bei Variation der DBP-Konzentration. Die qualitativen Abweichungen können durch das unterschiedliche Geschwindigkeitsfeld sowie experimentelle Unsicherheiten begründet werden. Insbesondere die fragliche Unterdrückung des Phasenübergangs bei der Extraktion des Fluides sowie die hohe Streuung der Messwerte mindern die Aussagekraft der experimentellen Daten. Dies gilt insbesondere für die Größenverteilungsfunktion der Tropfen, welche im Experiment nur für einige Kon-

zentrationen des DBP ein bimodales Verhalten aufweisen, welches weder in den aktuellen Simulationen noch bei anderen numerischen Arbeiten beobachtet wurde.

Die lineare Abhängigkeit des nullten Moments bei Variation der DBP-Konzentration ist im Einklang mit den Simulationsergebnissen von [41]. Ebenso zeigt  $L_{43}$  ein identisches Verhalten bei Variation der DBP-Konzentration im Vergleich mit den Simulationsdaten von [149]. Die quantitativen Unterschiede lassen sich durch die unterschiedlichen Geschwindigkeitsfelder und verwendeten Modellierungen des Sättigungsdrucks, der Oberflächenspannung und der Nukleationsrate begründen.

Das Verhalten der betrachteten charakteristischen Größen steht im Einklang mit den Ergebnissen von [69, 41, 149] und lässt auf die korrekte Umsetzung des LES-PDF-Konzeptes mit MC-Partikeln im Rahmen dieser Arbeit schließen.

## 7.4 Mischungsmodelle

Für die Untersuchung der Eigenschaften und Auswirkungen der Mischungsmodelle auf charakteristische Größen werden die Fälle F2 und F3 herangezogen (siehe Tabelle 6.3). Das verwendete LES-Netz hat 1 Million LES-Zellen und die MC-Partikel-Kontrollparameter sind  $N_{MC,min} = 5$  und  $N_{MC,max} = 10$ .

Wie bereits in Abschnitt 3.6 dargelegt, muss das turbulente Mischen der transportierten Skalare modelliert werden. Aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeit der Nukleationsrate von den zugrundeliegenden Größen ist das Verhalten des Mischungsmodells essenziell für die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (siehe Abschnitt 3.2). Daher wird in diesem Abschnitt zunächst der Einfluss der Verteilungen des Mischungsbruchs an ausgewählten Positionen im Strömungsfeld für das IEM- und MCD-Mischungsmodell betrachtet. Bei der Betrachtung der Produkte der Wahrscheinlichkeitsverteilung mit der Nukleationsrate und Kondensationsrate werden  $B(Z)$  (s. Gleichung 3.17) und  $G(Z)$  (s. Gleichung 3.20) anhand des jeweiligen Mischungsbruchwertes direkt berechnet. Hierbei werden  $T$  und  $Y_{DBP}$  als linear von  $Z$  abhängig betrachtet. Anschließend werden die Simulationsergebnisse ausgewertet. Die Randbedingungen für den Mischungsbruch sind 0 im Hüllstrom und 1 im Jet. Eine bimodale Verteilung (0 und 1) würde bei einer LES-Simulation statistisch homogen verteilter Geschwindigkeits- und Skalarfelder für beide Modelle zu einer Verteilung um den Mittelwert (0,5) relaxieren [93]. Das instationäre Verhalten des Jets in dem sehr großen Reservoir an kalten Partikeln aus dem Hüllstrom führt jedoch zu einem anderen Verhalten. Aufgrund der nichtlinearen Abhängigkeit des homogenen Nukleationsprozesses und der Kondensation haben auch kleine Unterschiede in der Mischungsbruchverteilung große Auswirkungen auf die Raten der homogenen Nukleation und Kondensation. Um das unterschiedliche Verhalten der resultierenden Größen bei Verwendung der Mischungsmodelle IEM und MCD zu untersuchen, wurde die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von  $Z$  an vier Positionen ( $z/D = 10, 20, 30, 60$ ) entlang der Jetachse ( $r/D = 0$ ) untersucht. Die Positionen wurden so gewählt, dass das unterschiedliche Verhalten der Mischungsmodelle sich bestmöglich herausarbeiten lässt. Der Mischungsbruchraum wurde in 100 diskre-

te Werte unterteilt. Die Werte wurden über 0,05 Sekunden Simulationszeit erfasst und sind mit mehr als  $6 \cdot 10^5$  Realisierungen statistisch repräsentativ. Die räumliche Ausdehnung, in welcher die Statistiken erhoben wurden, umfassen  $r/D < 0,5$  und  $\Delta z = 0,01D$  und  $\phi = 360^\circ$ . In den Abbildungen 7.33, 7.34, 7.35 und 7.36 sind die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von  $Z$  sowie die Multiplikation selbiger mit  $B(Z)$  und  $G(Z)$  an den Positionen  $z/D = 10, 20, 30, 60$  dargestellt.

Die Betrachtung der Abbildung 7.33 legt das stärker bimodale Verhalten des IEM-Mischungsmodells offen. Bei  $z/D = 10$  hat das IEM-Mischungsmodell die ursprünglich bimodale Verteilung zu verbreiterten Verteilungen gemischt, deren Maximalwerte zum Mittelwert wandern. Der Wertebereich zwischen den Verteilungsmaxima wird beim IEM-Modell nur schwach besetzt (siehe Abbildung 7.33(a)) für  $0,3 < Z < 0,5$ ). Das MCD-Mischungsmodell bildet einen deutlich sanfteren Übergang zwischen den Verteilungsmaxima mit kleineren Maximalwerten. Die Positionen der Maxima sind für beide Mischungsmodelle bei  $z/D = 10$  sehr ähnlich gelegen. Da der Kondensationsprozess fast über den gesamten Mischungsbruchraum stattfindet bildet das Produkt  $WDF \cdot G(Z)$  näherungsweise die Verteilungsfunktion von  $Z$  ab. Durch die starke Lokalisierung der homogenen Nukleation im Mischungsbruchraum ist dieser Prozess nur schwach von der Verteilungsfunktion des Mischungsbruches beeinflusst. Bei  $z/D = 20$  (siehe Abbildung 7.34(a)) haben sich

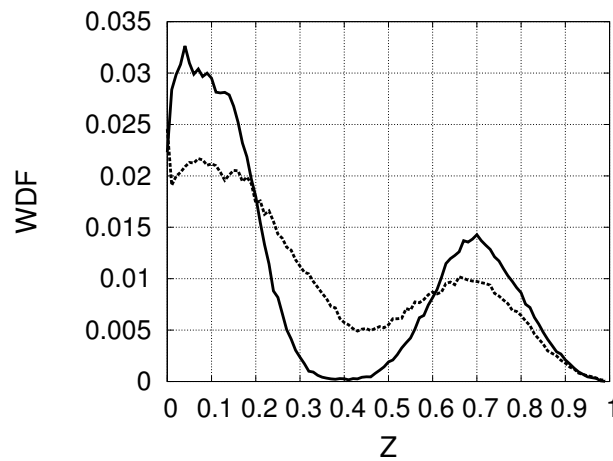
Tabelle 7.3: Integral der Kurven der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von  $Z$  mal Nukleationsrate von  $Z$  sowie Kondensationsrate von  $Z$

$z/D$	$WDF(Z) \cdot B(Z)$		$WDF(Z) \cdot G(Z)$	
	IEM	MCD	IEM	MCD
10	$1,86 \cdot 10^6$	$1,39 \cdot 10^6$	$6,21 \cdot 10^{-7}$	$7,35 \cdot 10^{-7}$
20	$2,70 \cdot 10^6$	$1,99 \cdot 10^6$	$4,52 \cdot 10^{-7}$	$6,10 \cdot 10^{-7}$
30	$2,81 \cdot 10^6$	$2,76 \cdot 10^6$	$3,13 \cdot 10^{-7}$	$4,49 \cdot 10^{-7}$
60	$7,37 \cdot 10^5$	$4,13 \cdot 10^6$	$1,41 \cdot 10^{-7}$	$3,32 \cdot 10^{-7}$

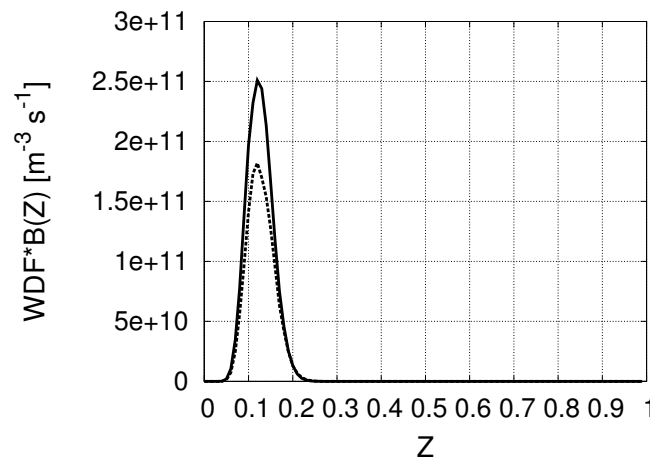
die Maxima des IEM-Mischungsmodells weiter aufeinander zubewegt. Die PDF aus der Rechnung mit dem MCD-Mischungsmodell weist bereits ein vereintes Maximum auf. Der Vergleich der Nukleationsraten multipliziert mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion in den Abbildungen 7.33(b) und 7.34(b) zeigt deutlich höhere Werte für das IEM-Mischungsmodell. Der Maximalwert liegt bei  $Z \approx 0,12$ . Mischungsbruchwerte für  $Z \gg 0,12$  oder  $Z \ll 0,12$  spielen für die Nukleation keine Rolle. Das Integral der Kurven von  $WDF \cdot G(Z)$  und  $WDF \cdot B(Z)$  ist in Tabelle 7.3 dargestellt und verdeutlicht die in den betrachteten Abbildungen gezeigten Tendenzen. Aus der Abbildung 7.33(c) geht hervor, dass die Sensitivität der Kondensationsrate bezüglich des Mischungsbruchs deutlich anderer Natur ist, als die der Nukleation. Der größte Anteil der Kondensation findet beim Maximalwert der  $Z$ -Verteilung mit höherem Mischungsbruch statt ( $Z \approx 0,7$ ), welcher bei der Nukleation keine Rolle spielt. Die betrachteten Kondensationsraten, multipliziert mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von  $Z$  zeigen auch hohe Werte für die Bereiche des Mischungsbruchs zwischen den Maxima der Verteilungsfunktion von  $Z$ . Die in

Tabelle 7.3 dargestellte Integration (bzw. Summation über die diskretisierte Verteilung) zeigt deutlich höhere Kondensationsraten für das MCD-Mischungsmodell. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von  $Z$  bei  $z/D = 30$  in Abbildung 7.35(a) zeigt für das IEM-Modell noch ein zweites kleines Maximum bei  $Z = 0,3$ . Das größere Maximum bei niederen Mischungsbruchwerten ist weiter angewachsen. Für das IEM-Modell führt dies erneut zu einer deutlich höheren Nukleationsrate, die Kondensation verhält sich umgekehrt. Im Bereich um  $Z \approx 0,2$  liefert  $PDF \cdot G(Z)$  aus dem MCD-Modell deutlich höhere Werte als das IEM-Modell. Die Summation über die diskreten Werte kann Tabelle 7.3 entnommen werden. Bei  $z/D = 60$  zeigt Abbildung 7.36(a) eine sehr scharfe Spitze der Verteilung aus dem IEM-Modell. Das MCD-Modell zeigt eine breitere Verteilung, deren Maximum bei einem höheren Wert im Mischungsbruchraum liegt. Die Abbildungen 7.36(b) und 7.36(c) sowie die integrierten Daten der Tabelle 7.3 zeigen deutlich höhere Werte für die Nukleations- und Kondensationsrate aus dem MCD-Mischungsmodell. Die großen Auswirkungen der unterschiedlichen Verteilungsfunktionen des IEM- und MCD-Mischungsmodells rühren von der stark nichtlinearen Abhängigkeit der homogenen Nukleationsrate und der Kondensationsrate von den zugrunde liegenden Größen her. Das beobachtete Mischungsverhalten des IEM- und MCD-Mischungsmodells stimmt mit den Beobachtungen von [93] im Kern überein und legt nahe, das MCD-Mischungsmodell aufgrund des besseren Mischungsverhaltens für weitere Rechnungen zu benutzen. Das IEM-Mischungsmodell führt zu Beginn des Mischungsprozesses zunächst zu höheren Nukleationsraten, da der Maximalwert der Verteilungsfunktion im unteren Bereich des Mischungsbruchraums ( $Z \approx 0,12$ ) für die Nukleationsrate maßgeblich ist und sich die Maxima einander annähern, ohne den Mischungsbruchraum zwischen den Maxima nennenswert zu füllen. Im späteren Verlauf des Mischens führt die Verteilung des Mischungsbruchs jedoch zu höheren Nukleationsraten für das MCD-Mischungsmodell. Die Kondensationsraten sind an allen betrachteten Stellen deutlich höher für das MCD-Mischungsmodell. Dies ist durch die höhere Sensitivität der Kondensation für Mischungsbrüche um  $Z = 0,4$  und die Bimodalität der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aus dem IEM-Mischungsmodell zu erklären. Der exemplarisch entlang der Jetachse betrachtete Mischungsverlauf für das IEM- und MCD-Mischungsmodell ist auch für andere Stromlinien, die ihren Ursprung in der Düse haben, charakteristisch.

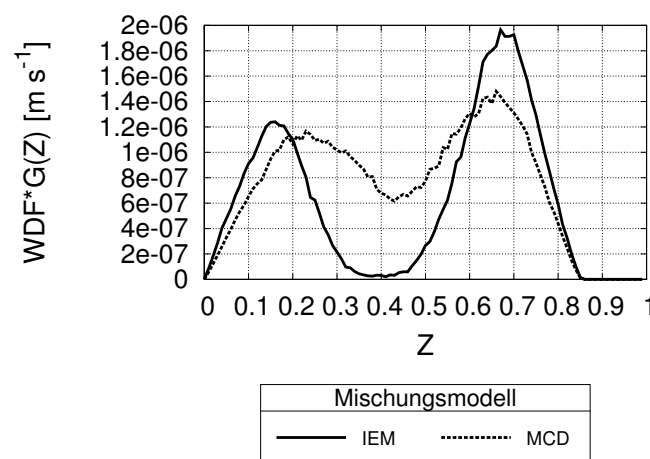




(a) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z$

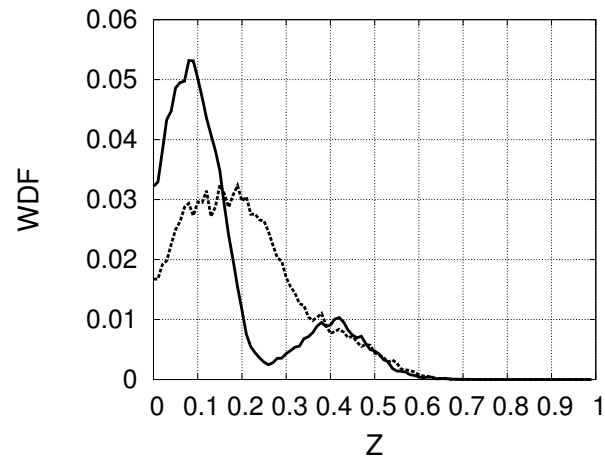
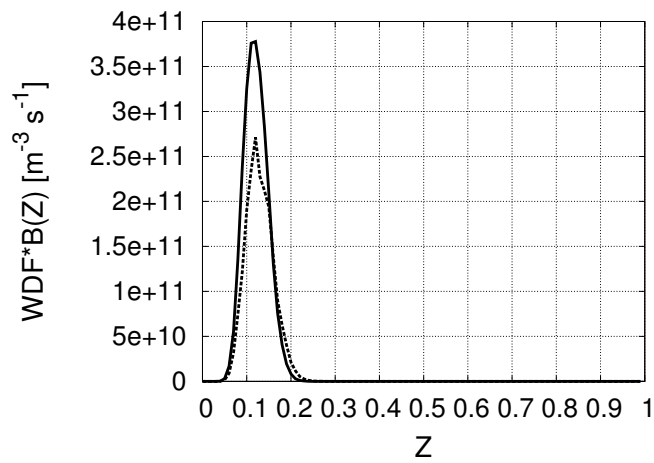
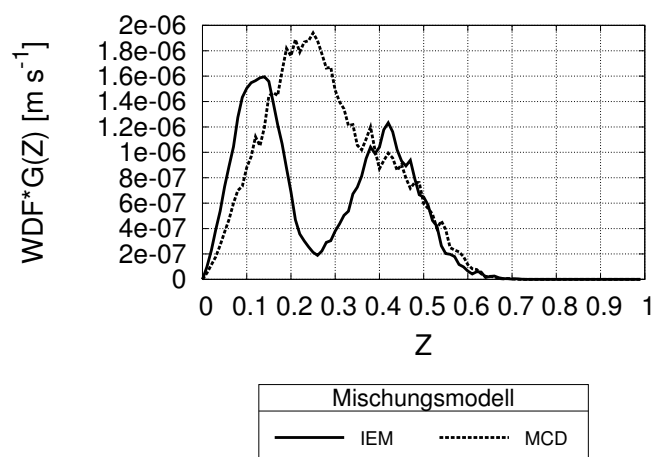


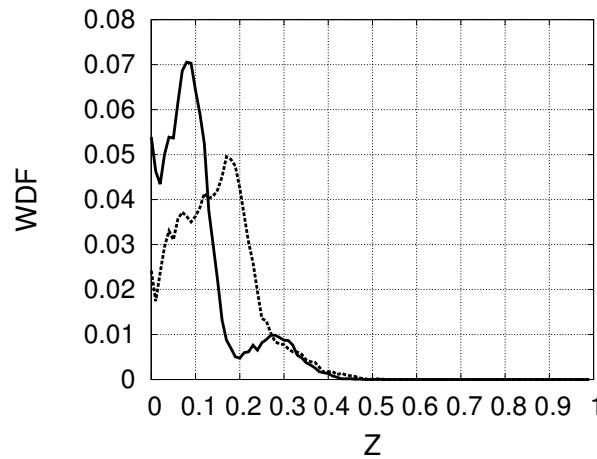
(b) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*B(Z)$



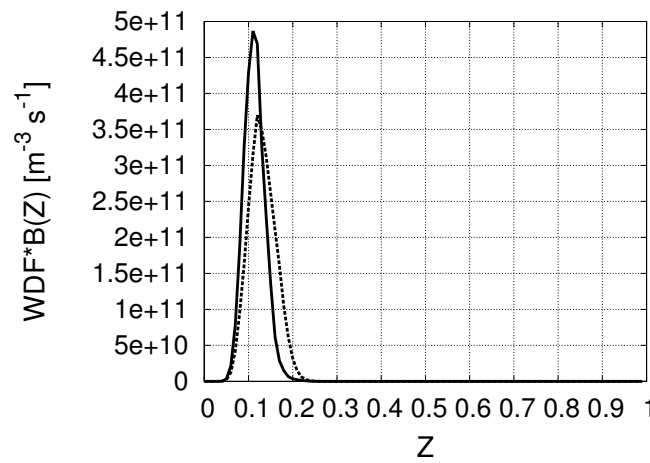
(c) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*G(Z)$

Abbildung 7.33:  $WDF(Z)$ ,  $WDF(Z)*B(Z)$  und  $WDF(Z)*G(Z)$  bei  $z/D = 10$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell

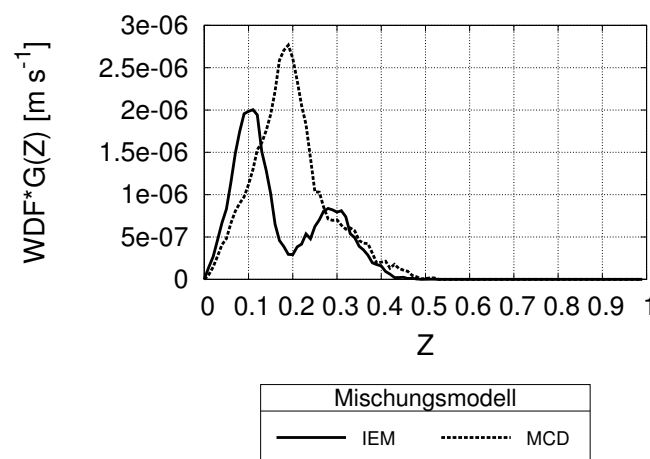
(a) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z$ (b) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*B(Z)$ (c) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*G(Z)$ Abbildung 7.34:  $WDF(Z)$ ,  $WDF(Z)*B(Z)$  und  $WDF(Z)*G(Z)$  bei  $z/D = 20$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell



(a) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z$

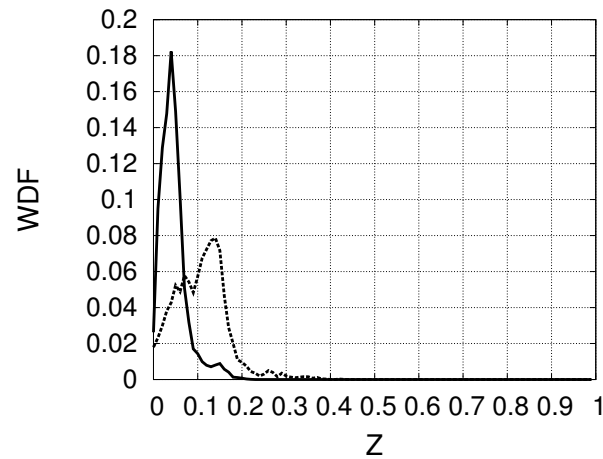
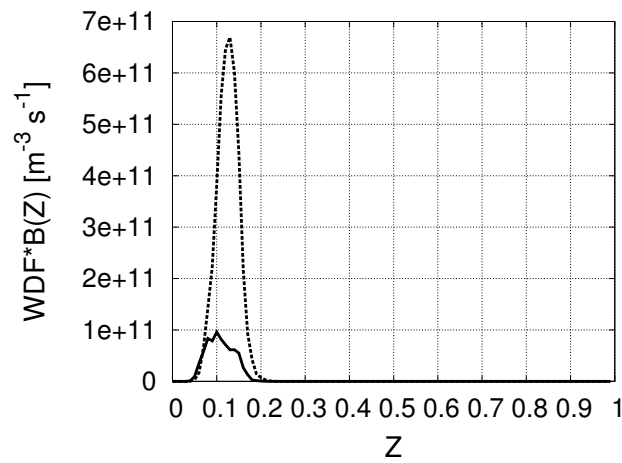
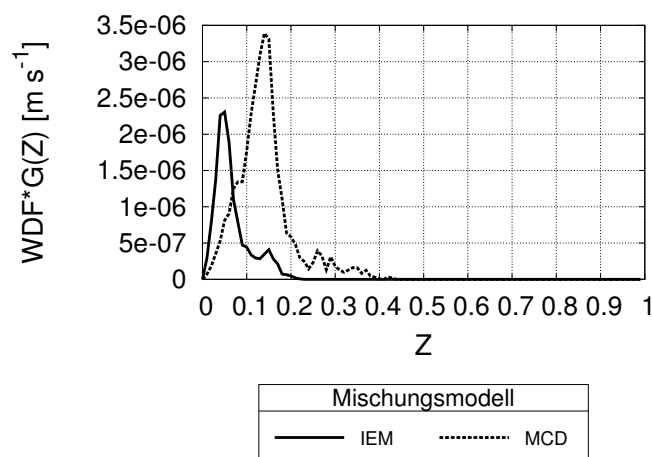


(b) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*B(Z)$



(c) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*G(Z)$

Abbildung 7.35:  $WDF(Z)$ ,  $WDF(Z)*B(Z)$  und  $WDF(Z)*G(Z)$  bei  $z/D = 30$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell

(a) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z$ (b) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*B(Z)$ (c) Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung von  $Z*G(Z)$ Abbildung 7.36:  $WDF(Z)$ ,  $WDF(Z)*B(Z)$  und  $WDF(Z)*G(Z)$  bei  $z/D = 60$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell

Im Folgenden werden zunächst die Ergebnisse aus Simulationen mit dem IEM-Mischungsmodell und MCD-Mischungsmodell gegenübergestellt. Anschließend wird auf das unterschiedliche Verhalten der vorhergegangenen Betrachtung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen und der nun analysierten Simulationsergebnisse eingegangen.

In Abbildung 7.37 ist der Mischungsbruch entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  unter Verwendung der untersuchten Mischungsmodelle sowie der LES-Rechnung zu betrachten. Nach dem Aufbrechen des Jets weisen die Kurvenverläufe des gemittelten Mischungsbruches aus der LES-Rechnung und des MCD-Mischungsmodells identische Verläufe bis  $z/D = 3,5$  auf. Im Bereich  $3 < z/D < 26$  zeigt der Verlauf des Mischungsbruches unter Verwendung des IEM-Mischungsmodells leicht niedrigere Mischungsbruchwerte als unter Verwendung des MCD-Mischungsmodells. Für  $z/D < 30$  ist der Verlauf des Mischungsbruches unter Verwendung des MCD-Modells mit dem der LES identisch. Für  $z/D > 40$  nähern sich die Kurven der Mischungsbrüche aus Simulationen mit unterschiedlichen Mischungsmodellen an und sind für  $z/D > 50$  nahezu identisch. Betrachtet man die Verläufe über dem Radius bei  $z/D = 20$ , so sind die Konturen aus der Rechnung mit dem MCD-Mischungsmodell und der LES-Rechnung sehr ähnlich, unterscheiden sich jedoch in der Amplitude. Die höchsten Werte des Mischungsbruches sind auf der Jetachse zu finden. Die Kurvenverläufe gleichen sich für  $r/D = 4$  stark an und das IEM-Modell liefert für  $r/D > 5$  leicht höhere Werte als das MCD-Modell.

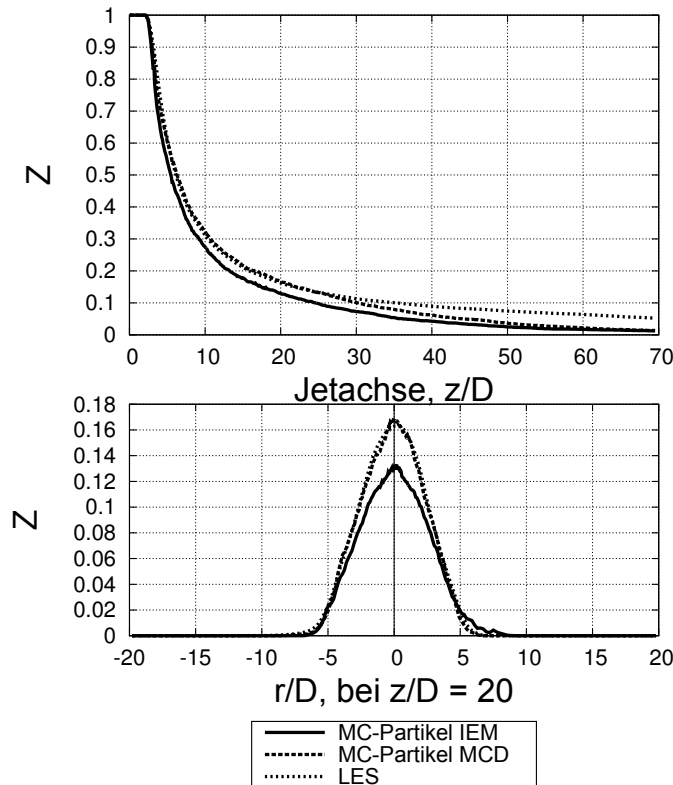
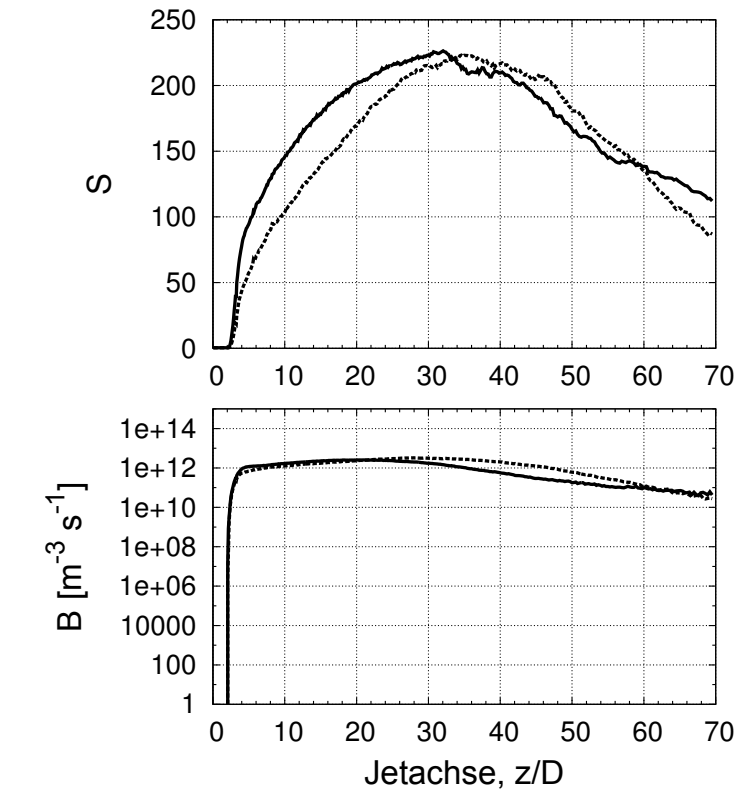


Abbildung 7.37: Mischungsbruch entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 20$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell sowie aus der LES-Rechnung

In Abbildung 7.38(a) ist zu betrachten, wie die Sättigung entlang der Jetachse nach Aufbrechen des Jets für das IEM-Modell früher und stärker ansteigt als für das MCD-Modell. Während die Sättigung aus dem MCD-Modell bei  $z/D \approx 35$  ein Maximum vom  $S \approx 221$  erreicht, so zeigt die Sättigung aus Rechnungen mit dem IEM-Mischungsmodell einen Maximalwert von  $S \approx 226$  bei  $z/D \approx 32$ . Die Kurven der Sättigung verlaufen im Bereich  $40 < z/D < 55$  nahezu parallel und schneiden sich bei  $z/D = 60$ . Die Sättigung aus der Rechnung mit dem IEM-Modell weist am Ende des Rechengebietes einen Wert von  $S \approx 112$  auf, die aus der Rechnung mit dem MCD-Modell einen Wert von  $S \approx 89$ . Der Vergleich der Nukleationsraten aus den Rechnungen mit unterschiedlichen Mischungsmodellen zeigt einen simultanen steilen Anstieg im Bereich des aufbrechenden Jets. Die Nukleationsrate aus der Rechnung mit dem IEM-Mischungsmodell behält die initiale hohe Steigung etwas länger bei und liegt im Bereich  $5 < z/D < 20$  über der Rate aus dem MCD-Mischungsmodell. Im Bereich  $25 < z/D < 60$  liegt die Nukleationsrate aus der Rechnung mit dem MCD-Mischungsmodell über der Rate aus der Rechnung mit dem IEM-Mischungsmodell. Für  $z/D > 60$  sind die Nukleationsraten aus den Rechnungen mit unterschiedlichen Mischungsmodellen nahezu identisch.

Die über dem Radius aufgetragene Sättigung bei  $z/D = 20$  in Abbildung

7.38(b) verdeutlicht das räumlich unterschiedliche Verhalten der Mischungsmodelle. Das MCD-Mischungsmodell liefert ein lokales Minimum auf der Jetachse für die Sättigung. Das IEM-Mischungsmodell zeigt einen Kurvenverlauf der Sättigung über dem Radius mit einem Maximum auf der Jetachse und deutlich höheren Werten. Die Nukleationsraten weisen für beide Mischungsmodelle ein Maximum auf der Jetachse auf. Die Kurven schneiden sich bei  $r/D \approx \pm 0,5$ . Für radiale Abstände größer  $r/D > 0,5$  liefert das MCD-Mischungsmodell höhere Werte, für kleinere radiale Abstände liegt die Nukleationsrate aus der Rechnung mit dem IEM-Mischungsmodell über der aus der Rechnung mit dem MCD-Mischungsmodell.



(a) Entlang der Jetachse

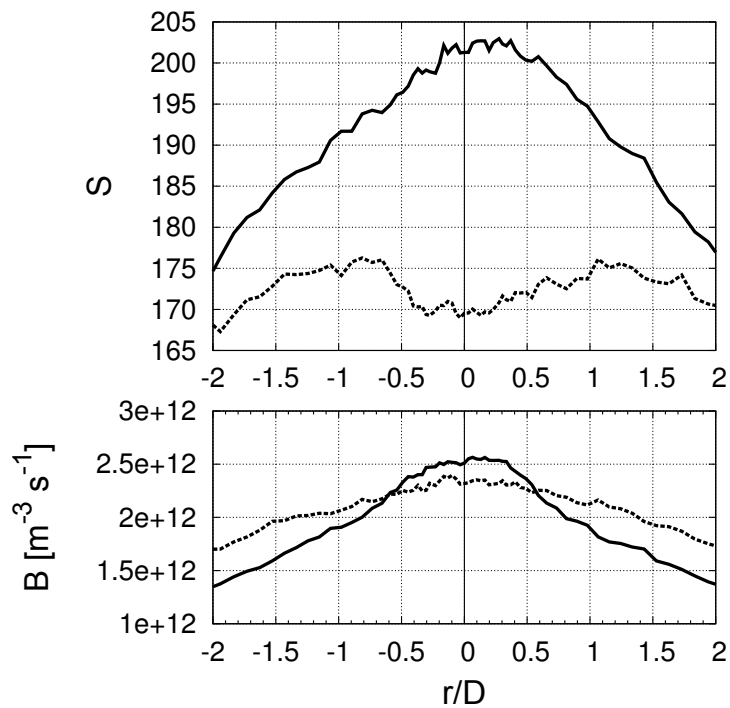
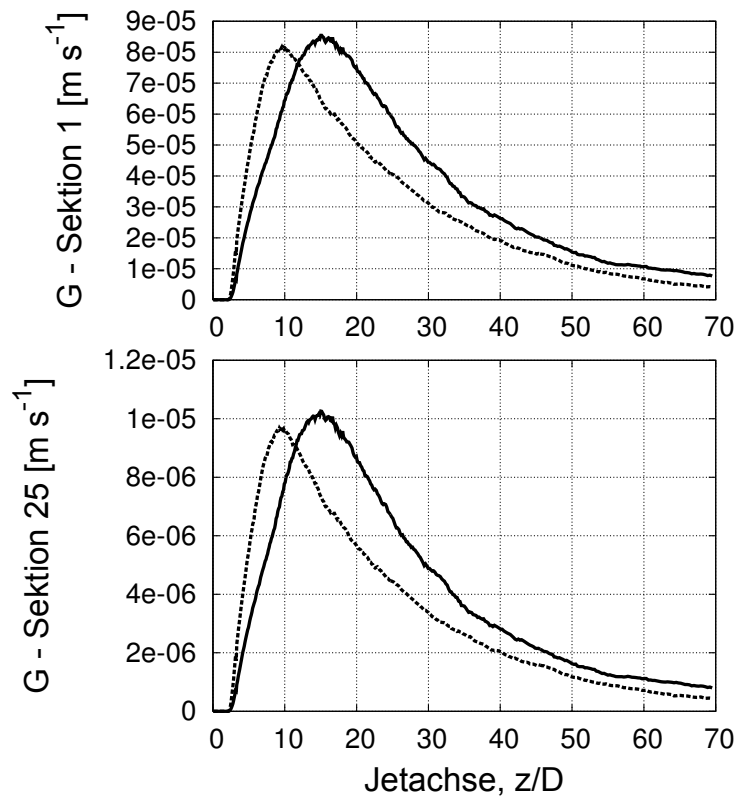
(b) Über dem Radius bei  $z/D = 20$ 

Abbildung 7.38: Sättigung und Nukleation für IEM- und MCD-Mischungsmodell



In Abbildung 7.39(a) ist die Kondensationsrate der 1. und 25. Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion aus Rechnungen mit beiden Mischungsmodellen entlang der Jetachse (siehe Abbildung 7.39(a)) und über dem Radius (siehe Abbildung 7.39(b)) aufgetragen. Der Vergleich der Kondensationsraten zeigt einen steileren Anstieg unter Verwendung des MCD-Mischungsmodells. Das MCD-Mischungsmodell führt zu einem Maximalwert der Kondensationsrate bei  $z/D = 10$ . Das IEM-Mischungsmodell führt zu einem Maximalwert bei  $z/D = 15$ . Das Maximum der Kondensationsrate aus der Rechnung mit dem MCD-Mischungsmodell erreicht 95% des Maximalwertes aus der Rechnung mit dem IEM-Mischungsmodell, bezogen auf den Maximalwert des IEM-Mischungsmodells. Der Vergleich der radialen Verläufe der Wachstumsraten bei  $z/D = 20$  zeigt ein ähnliches räumliches Verhalten. Beide Mischungsmodelle liefern ein Maximum der Wachstumsrate auf der Jetachse. Die Wachstumsrate aus der Rechnung mit dem IEM-Mischungsmodell liegt um  $\approx 38\%$  über der Wachstumsrate aus der Rechnung mit dem MCD-Mischungsmodell, bezogen auf die Werte aus der Rechnung mit dem IEM-Mischungsmodell.



(a) Entlang der Jetachse

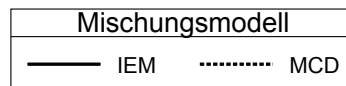
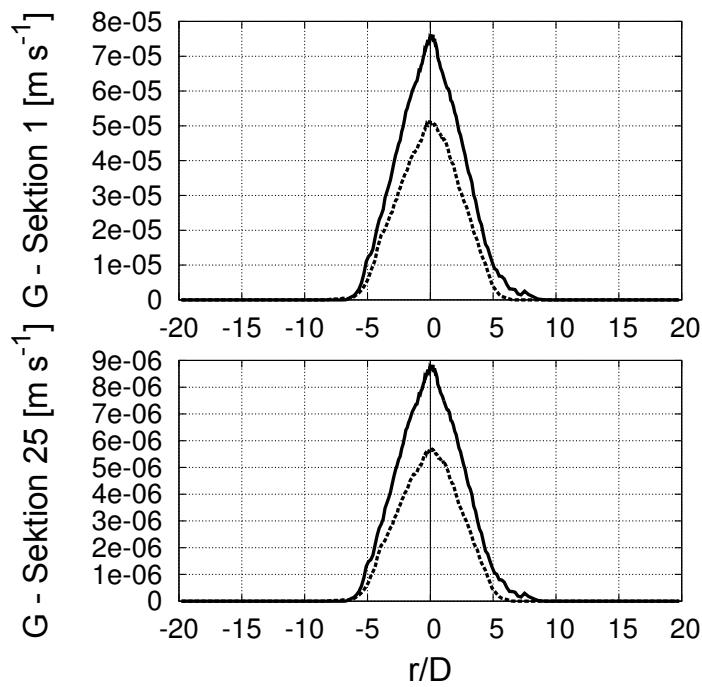
(b) Über dem Radius bei  $z/D = 20$ 

Abbildung 7.39: Kondensationsrate für IEM- und MCD-Mischungsmodell

Vergleicht man das nullte Moment der gesamten Rechendomains, so erhält man aus Rechnungen mit dem MCD-Mischungsmodell ( $m_0 = 4,290405 \cdot 10^8$ ) eine 3,2 mal höhere Tropfendichte als aus der Rechnung mit dem IEM-Modell ( $m_0 = 1,332645 \cdot 10^8$ ). Die Betrachtung des nullten Momentes entlang der Jetachse in Abbildung 7.40(a) zeigt für das IEM-Modell im Bereich  $z/D < 25$  eine höhere Tropfendichte als aus der Simulation mit dem MCD-Modell. Die Kurven schneiden sich bei  $z/D = 25$  und das MCD-Modell liefert fortan eine höhere Tropfendichte. In Abbildung 7.40(b) ist die Größenverteilungsfunktion bei  $z/D = 20$  zu betrachten. Während das IEM-Modell bei  $z/D = 20$  mehr und größere Tropfen als das MCD-Modell vorhersagt, so ändert sich der Trend bei Betrachtung der Größenverteilungsfunktion aus dem gesamten Rechengebiet (s. Abbildung 7.41). Bei  $z/D = 20$  liegt das Maximum der Größenverteilungsfunktion der Tropfen für die Rechnung unter Verwendung des IEM-Modells bei  $d \approx 0,046\mu m$ , für das MCD-Modell bei  $d \approx 0,02\mu m$ . Für die Größenverteilungsfunktion aus der gesamten Rechendomains liegen die Maxima bei  $d \approx 0,25\mu m$  und  $d \approx 0,12\mu m$  für das IEM- und MCD-Mischungsmodell.

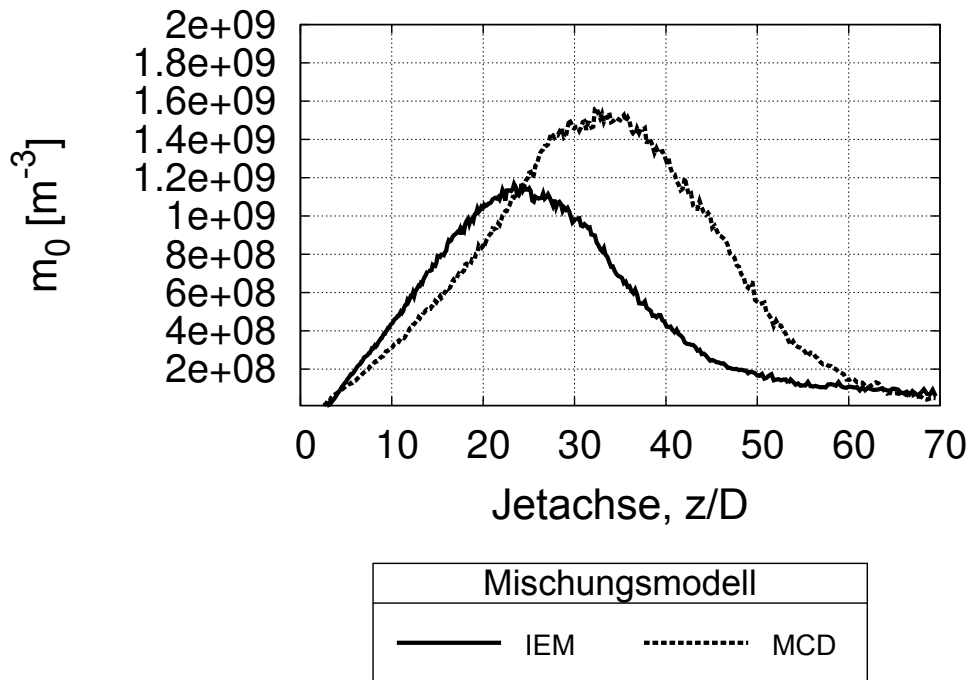
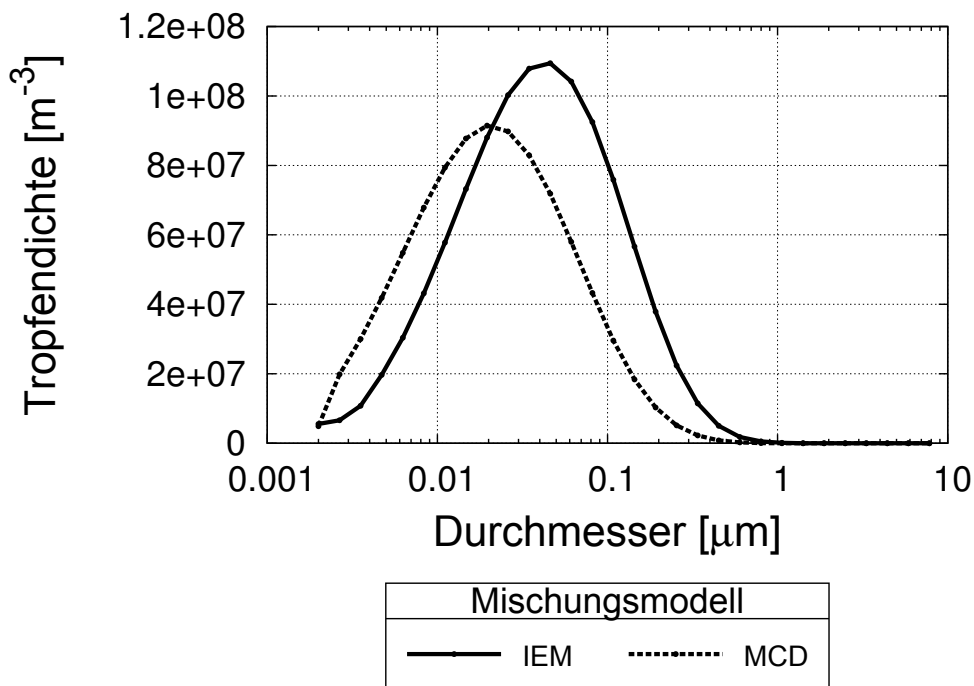
(a)  $m_0$  Entlang der Jetachse(b) Tropfendichte über  $r/D$  bei  $z/D = 20$ 

Abbildung 7.40: Tropfendichte und nulltes Moment für IEM- und MCD-Mischungsmodell

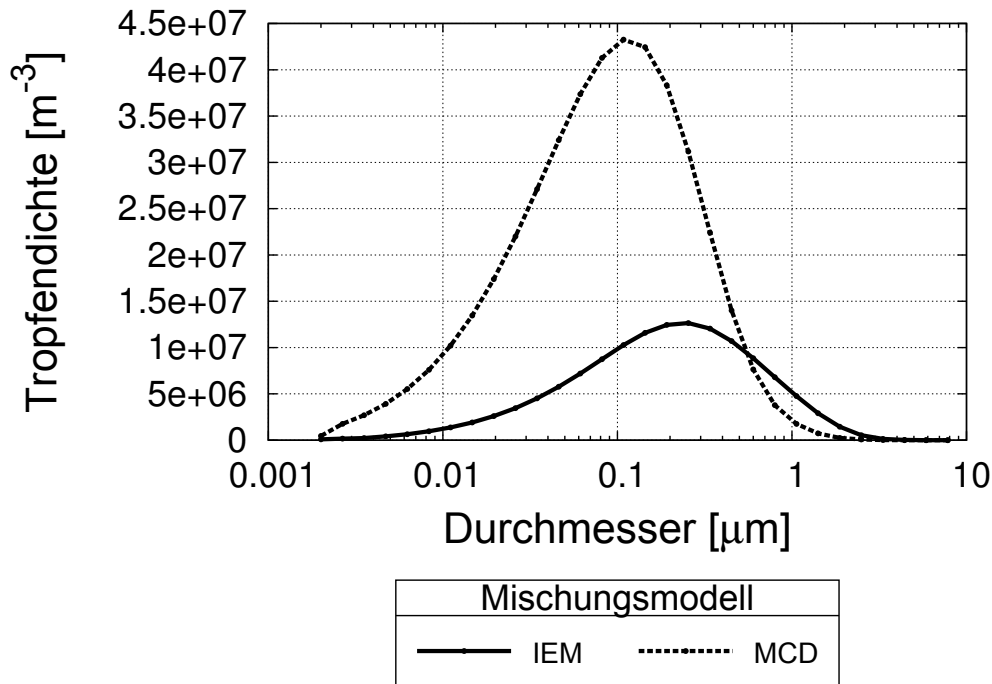


Abbildung 7.41: Partikelgrößenverteilung der gesamten Rechendomains für IEM- und MCD-Mischungsmodell

Abschließend seien noch verschiedene Zusammenhänge der betrachteten Daten erörtert. Betrachtet man den zeitlich gemittelten, räumlich gefilterten Verlauf von  $B(Z)$  entlang der Jetachse in Abbildung 7.38, so ist augenscheinlich dass dieser nicht dem analytischen Verlauf von  $B(Z)$  (entsprechend Abbildung 3.3) unter Berücksichtigung der räumlichen Verteilung von  $Z$  entlang der Jetachse (siehe Abbildung 7.37) entspricht. Dieser Zusammenhang wurde in Abschnitt 7.2 erörtert. Die Unterschiede abhängiger Größen wie  $B(Z)$  bei identischen gefilterten und zeitlich gemittelten  $Z$ -Werten unter Verwendung des MCD-Modells und IEM-Modells fußen auf den in diesem Abschnitt betrachteten Verteilungsfunktionen im  $Z$ -Raum.

Betrachtet man das Verhältnis der Integrale der Kurven der diskretisierten  $WDP(Z) \cdot G(Z)$  oder  $WDP(Z) \cdot B(Z)$  (siehe Tabelle 7.3), so ergeben sich Unterschiede im Vergleich zu den Verhältnissen der gefilterten und zeitlich gemittelten Verläufe der Kondensationsrate und der Nukleationsrate an identischen Abständen von der Düse (siehe Abbildung 7.39(a) und 7.38(a)). Nach Gleichung 2.15 ist eine Übereinstimmung zu erwarten. Zum einen ist diese Diskrepanz durch die unterschiedliche räumliche Verteilung der zugrunde liegenden Skalare zu begründen. Diese räumlichen Unterschiede können in Abbildung 7.37 betrachtet werden. Zusätzlich zu den unterschiedlichen Verteilungen des Mischungsbruchs im Raum ist die Abweichung der Temperatur und des Massenbruchs des DBP für weitere Unterschiede verantwortlich. Die Abweichung von  $Y_{DBP}$  und  $T$  von der linearen Abhängigkeit von  $Z$  aufgrund der Transitionseffekte wurde in Abschnitt 6.3 erörtert. Zudem ist zu beachten, dass die WDF an den Stellen  $z/D = 10, 20, 30, 60$  über  $\pm 0, 5D$  in radialer

Richtung erhoben wurde und mehr Information berücksichtigt als die Ratenverläufe entlang der Jetachse. Aufgrund dieser Effekte können die axialen Verläufe der Nukleation (siehe Abbildung 7.38(a)) und Kondensation (siehe Abbildung 7.39(a)) nicht vollständig mit der nachfolgenden Betrachtung erklärt werden. Dennoch tragen die Betrachtungen zu einem erweiterten Verständnis der multidimensionalen Zusammenhänge bei.

Ein großer Einfluss ist auch der Gewichtsverteilung der MC-Partikel zuzuschreiben. Wie in Abschnitt 4.1.2 beschrieben, transportieren schwere MC-Partikel vorwiegend niedere Massenbrüche und leichte MC-Partikel hohe Massenbrüche ( $Z_h = 0$ ,  $Z_{jet} = 1$ ). Die in den Abbildungen 7.42(a), 7.43(a), 7.44(a) und 7.45(a) dargestellte normierte Gewichtsverteilung über dem Mischungsbruch zeigt deutliche Unterschiede aus den Rechnungen der verwendeten Mischungsmodelle. Die unterschiedlichen Verteilungen rühren hierbei von der Verteilung der Skalare auf den MC-Partikeln bei identischer Gewichtsverteilung im Raum. Abermals ist die Tendenz des IEM-Mischungsmodells zu erkennen, die ursprünglichen Verteilungsfunktionen als solche zu erhalten und aufeinander zu wandern zu lassen. Es sind an allen betrachteten Stellen zwei Extrema der Verteilung zu erkennen, der Bereich dazwischen ist nur schwach besetzt. Die Eigenschaft des MCD-Mischungsmodells, eine gaussförmige Verteilung herzustellen, führt dazu, dass sich das lokale Maximum bei hohen  $Z$ -Werten, welches bei  $z/D = 10$  noch sichtbar ist, weiter stromab mit dem Maximum aus dem Hüllstrom vereint hat. Aufgrund der viel höheren Zahl der MC-Partikel aus dem Hüllstrom haben die Verteilungen  $w(Z)$  einen Maximalwert bei  $Z \approx 0$ , welcher in den Darstellungen abgeschnitten wurde um die Verteilung für höhere  $Z$ -Werte hervorzuheben. Die Ausschnitte sind jedoch so gewählt, dass die Kreuzungspunkte der Verteilungen bei kleinen Mischungsbrüchen aus den Simulationen mit unterschiedlichen Mischungsmodellen sichtbar sind. Zur Berechnung der gefilterten LES-Zell-Werte einer Größe wird nach Gleichung 4.2 das Gewicht der MC-Partikel berücksichtigt. Um den Einfluss der Gewichtsverteilung abschätzen zu können, können die Produkte  $WDF \cdot B(Z) \cdot w(Z)$  und  $WDF \cdot G(Z) \cdot w(Z)$  betrachtet werden. Durch die unterschiedliche Sensitivität der Kondensation und homogenen Nukleation über die Bereiche des Mischungsbruches haben die Gewichtsverteilungen unterschiedliche Auswirkungen.

In Abbildung 7.42 sind die normierte Gewichtsverteilung  $w(Z)$ ,  $WDF \cdot w(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z)$ ,  $WDF \cdot G(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z) \cdot w(Z)$  und  $WDF \cdot G(Z) \cdot w(Z)$  bei  $z/D = 10$  für das IEM-Mischungsmodell und MCD-Mischungsmodell dargestellt. Bei  $z/D = 10$  betragen die Werte des Mischungsbruches auf der Jetachse  $Z = 0,274$  für das IEM-Modell und  $Z = 0,322$  für das MCD-Modell. Die Gewichtsverteilung in Abbildung 7.42(a) spiegelt die bereits diskutierten Eigenschaften der Mischungsmodelle wieder. Das IEM-Modell zeigt eine Verteilung mit zwei lokalen Maxima. Die Verteilung aus der Simulation mit dem MCD-Modell zeigt eine Besetzung der Gewichtsverteilung für mittlere  $Z$ -Werte, welche im IEM-Modell nicht zu beobachten ist. Der Vergleich der WDF in Abbildung 7.42(a) mit  $WDF \cdot w(Z)$  in Abbildung 7.42(b) zeigt eine starke Verschiebung der Verteilungen. Der Bereich der WDF mit niedrigeren  $Z$ -Werten erhält einen deutlich größeren Einfluss. Die Berücksichtigung der Gewichtsverteilung hat einen geringen Einfluss auf den Nukleationsprozess (ver-

gleiche Abbildungen 7.42(c) und 7.42(e)). Der Kondensationsprozess ist durch die Berücksichtigung der Gewichte stärker betroffen (vergleiche Abbildungen 7.42(d) und 7.42(f)). Der Bereich mittlerer  $Z$ -Werte, welcher beim MCD-Mischungsmodell besetzt ist, wird im Einfluss stark abgeschwächt. Die Verhältnisse der betrachteten Prozesse bleiben gleich. Auch nach Berücksichtigung der Gewichtsverteilung liefert das IEM-Modell höhere Werte.

Die Betrachtung der Gewichtsverteilung an der Stelle  $z/D = 20$  in Abbildung 7.43(a) zeigt für das IEM-Modell abermals zwei Extrema. Bei  $z/D = 20$  betragen die Werte des Mischungsbruches auf der Jetachse  $Z = 0,128$  für das IEM-Modell und  $Z = 0,166$  für das MCD-Modell. Die Verteilungsfunktion in Abbildung 7.43(a) aus der Simulation mit dem MCD-Mischungsmodell deutet bereits ein Maximum bei niedrigen  $Z$ -Werten an. Das Produkt der Verteilungsfunktion mit  $WDF \cdot B(Z)$  in Abbildung 7.43(e) zeigt eine Verschiebung der Maximalwerte. Für das MCD-Modell hat sich der Maximalwert im Mischungsbruchraum zu höheren Werten verschoben. Beim IEM-Modell hat sich das Maximum zu niedrigeren  $Z$ -Werten verschoben. Durch die Berücksichtigung der Gewichte hat sich das Verhältnis umgekehrt und das MCD-Modell liefert höhere Werte. Betrachtet man den Effekt auf den Prozess der Kondensation in den Abbildungen 7.43(d) und 7.43(f), so spielt der Bereich für  $Z > 0,3$  nur noch eine untergeordnete Rolle und die Bereiche mit  $Z < 0,3$  fallen verstärkt ins Gewicht. Der Vergleich mit den über dem Mischungsbruchraum gebildeten Integralen der Kurvenverläufe in Tabelle 7.4 verdeutlicht dies.

Weiter stromab, bei  $z/D = 30$  (siehe Abbildung 7.44) können die gleichen Beobachtungen wie bei  $z/D = 20$  gemacht werden. Die Werte des Mischungsbruches auf der Jetachse betragen  $Z = 0,073$  für das IEM-Modell und  $Z = 0,100$  für das MCD-Modell. Durch die weitere Verschiebung der Gewichtsverteilung (siehe Abbildung 7.44(a)) hin zu kleineren  $Z$ -Werten verstärken sich jedoch die Effekte. Dies stellt Tabelle 7.4 in Zahlen dar.

Betrachtet man die Effekte bei  $z/D = 60$  in Abbildung 7.45, so stellt man fest, dass die Verschiebung der Gewichtsverteilung zu sehr kleinen Werten im Mischungsbruchraum die Verhältnisse der Kondensation umkehrt (vergleiche Abbildungen 7.45(d) und 7.45(f)). Die Werte des Mischungsbruches auf der Jetachse betragen  $Z = 0,017$  für das IEM-Modell und  $Z = 0,022$  für das MCD-Modell. Das IEM-Modell liefert höhere Werte für den Kondensationsprozess als das MCD-Modell. Das MCD-Modell liefert weiterhin höhere Werte für den Nukleationsprozess unter Berücksichtigung der Gewichtsverteilung (siehe Abbildung 7.45(e)), jedoch sind die Unterschiede geringer geworden.

Tabelle 7.4: Integral der Kurven der normierten Gewichtsverteilung von  $Z \cdot \text{WDF}$  von  $Z \cdot \text{Nukleationsrate}$  von  $Z$  sowie der normierten Gewichtsverteilung von  $Z \cdot \text{WDF}$  von  $Z \cdot \text{Kondensationsrate}$  von  $Z$

$z/D$	$WDF(Z) \cdot B(Z) \cdot w(Z)$		$WDF(Z) \cdot G(Z) \cdot w(Z)$	
	IEM	MCD	IEM	MCD
10	$2,46 \cdot 10^4$	$1,76 \cdot 10^4$	$4,43 \cdot 10^{-13}$	$3,80 \cdot 10^{-13}$
20	$6,40 \cdot 10^4$	$9,33 \cdot 10^4$	$1,06 \cdot 10^{-12}$	$1,27 \cdot 10^{-12}$
30	$4,93 \cdot 10^4$	$1,64 \cdot 10^5$	$1,15 \cdot 10^{-12}$	$1,75 \cdot 10^{-12}$
60	$5,63 \cdot 10^3$	$7,96 \cdot 10^3$	$9,51 \cdot 10^{-13}$	$4,35 \cdot 10^{-13}$



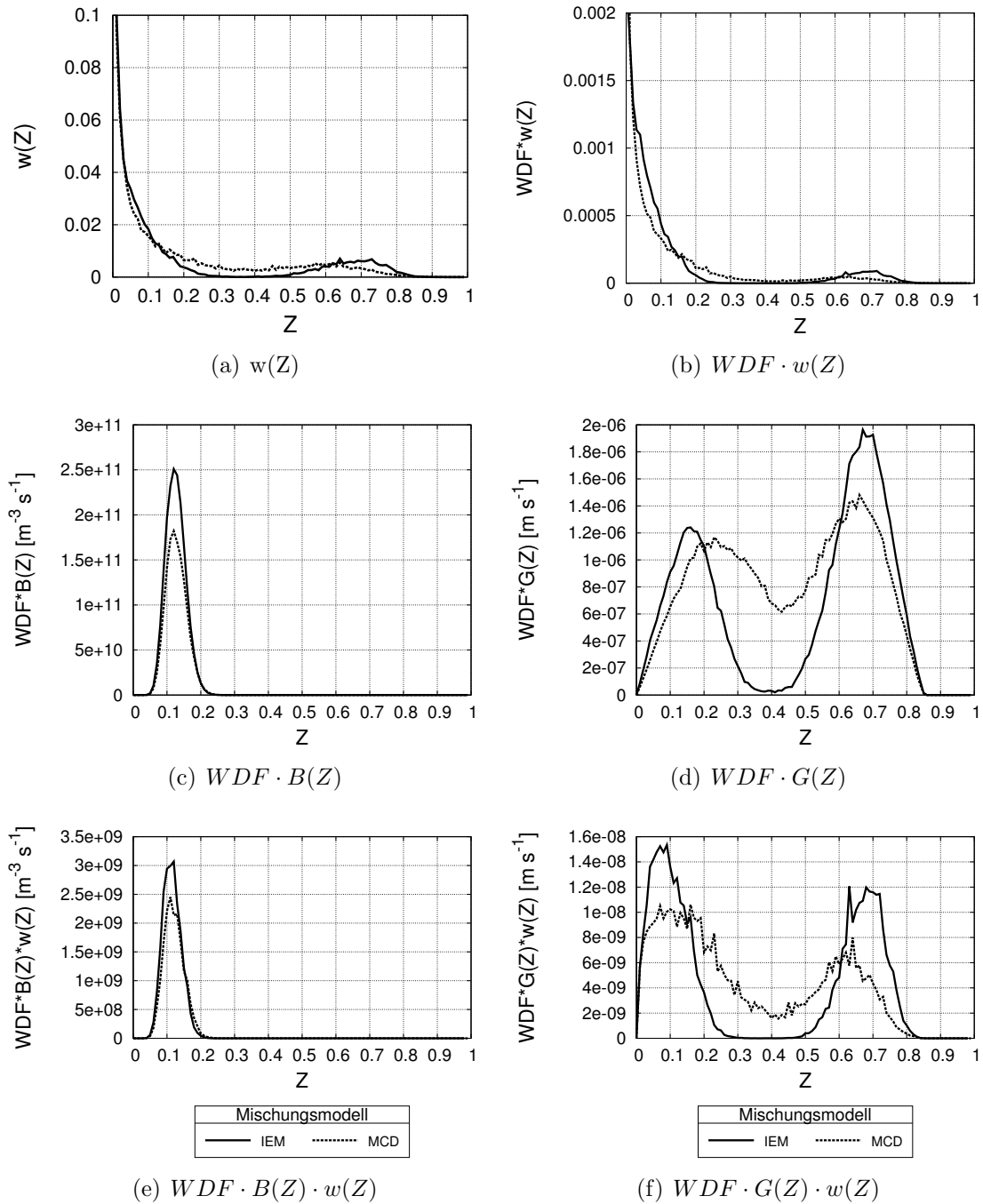


Abbildung 7.42: Normierte Gewichtsverteilung  $w(Z)$ ,  $WDF \cdot w(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z)$ ,  $WDF \cdot G(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z) \cdot w(Z)$  und  $WDF \cdot G(Z) \cdot w(Z)$  bei  $z/D = 10$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell

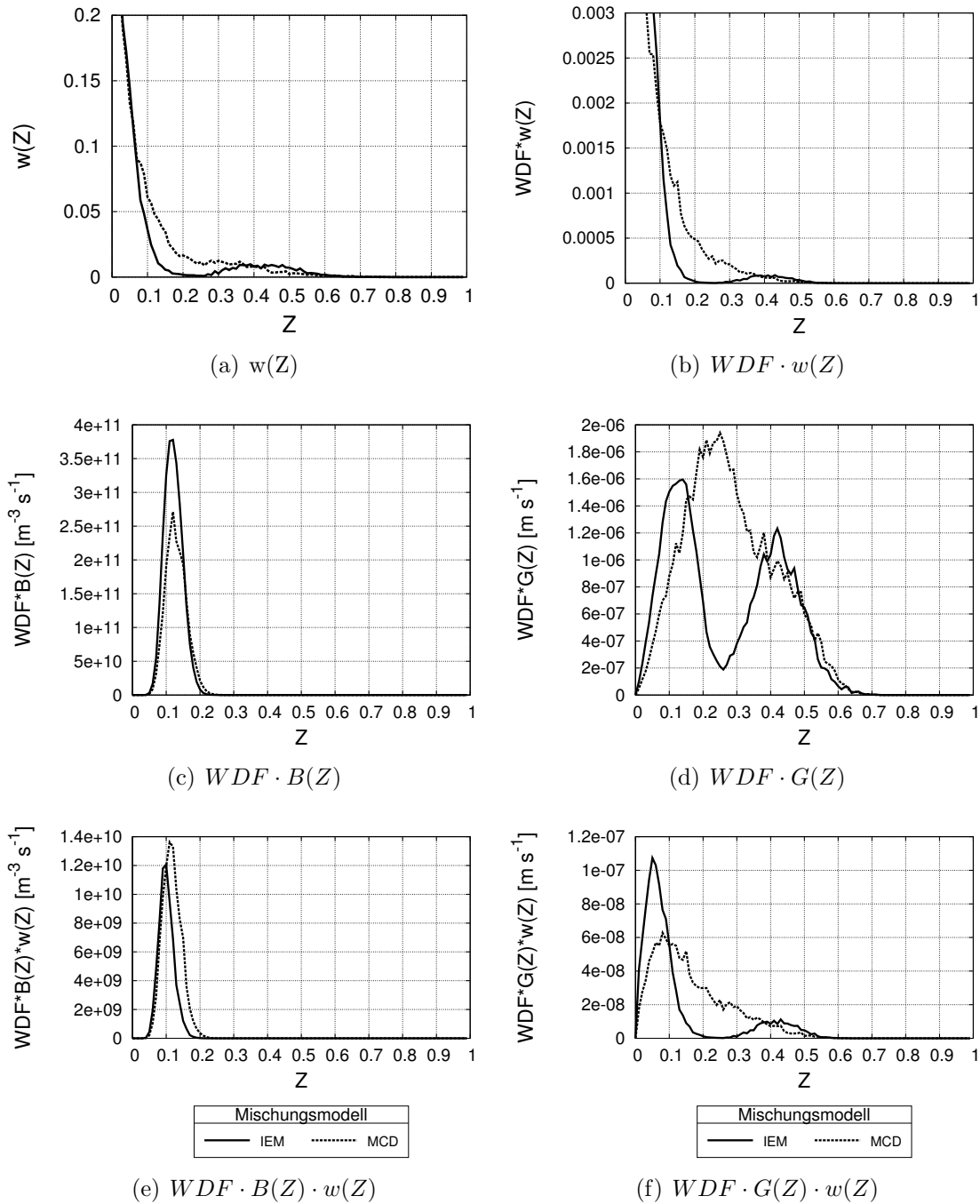


Abbildung 7.43: Normierte Gewichtsverteilung  $w(Z)$ ,  $WDF \cdot w(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z)$ ,  $WDF \cdot G(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z) \cdot w(Z)$  und  $WDF \cdot G(Z) \cdot w(Z)$  bei  $z/D = 20$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell

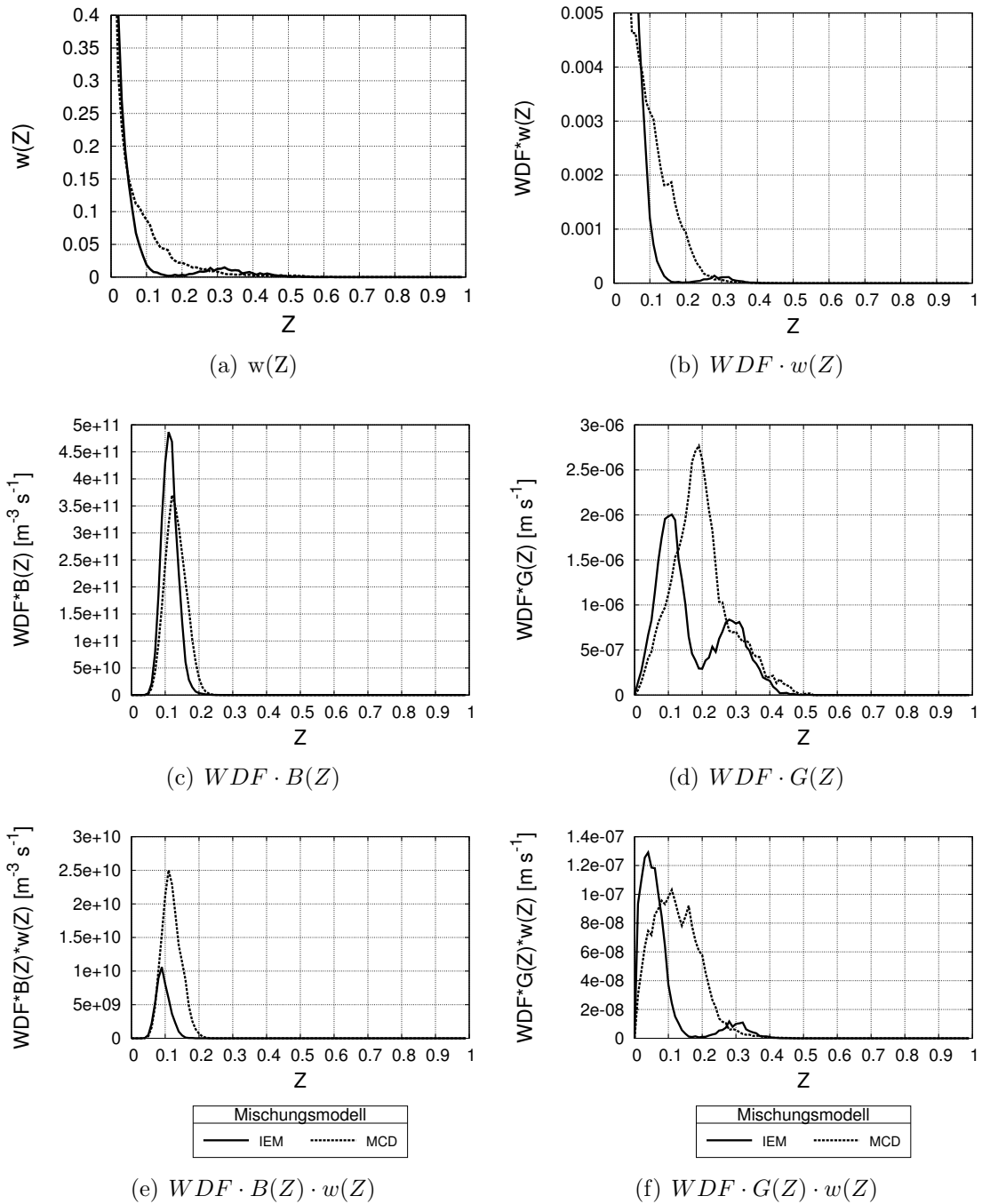


Abbildung 7.44: Normierte Gewichtsverteilung  $w(Z)$ ,  $WDF \cdot w(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z)$ ,  $WDF \cdot G(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z) \cdot w(Z)$  und  $WDF \cdot G(Z) \cdot w(Z)$  bei  $z/D = 30$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell

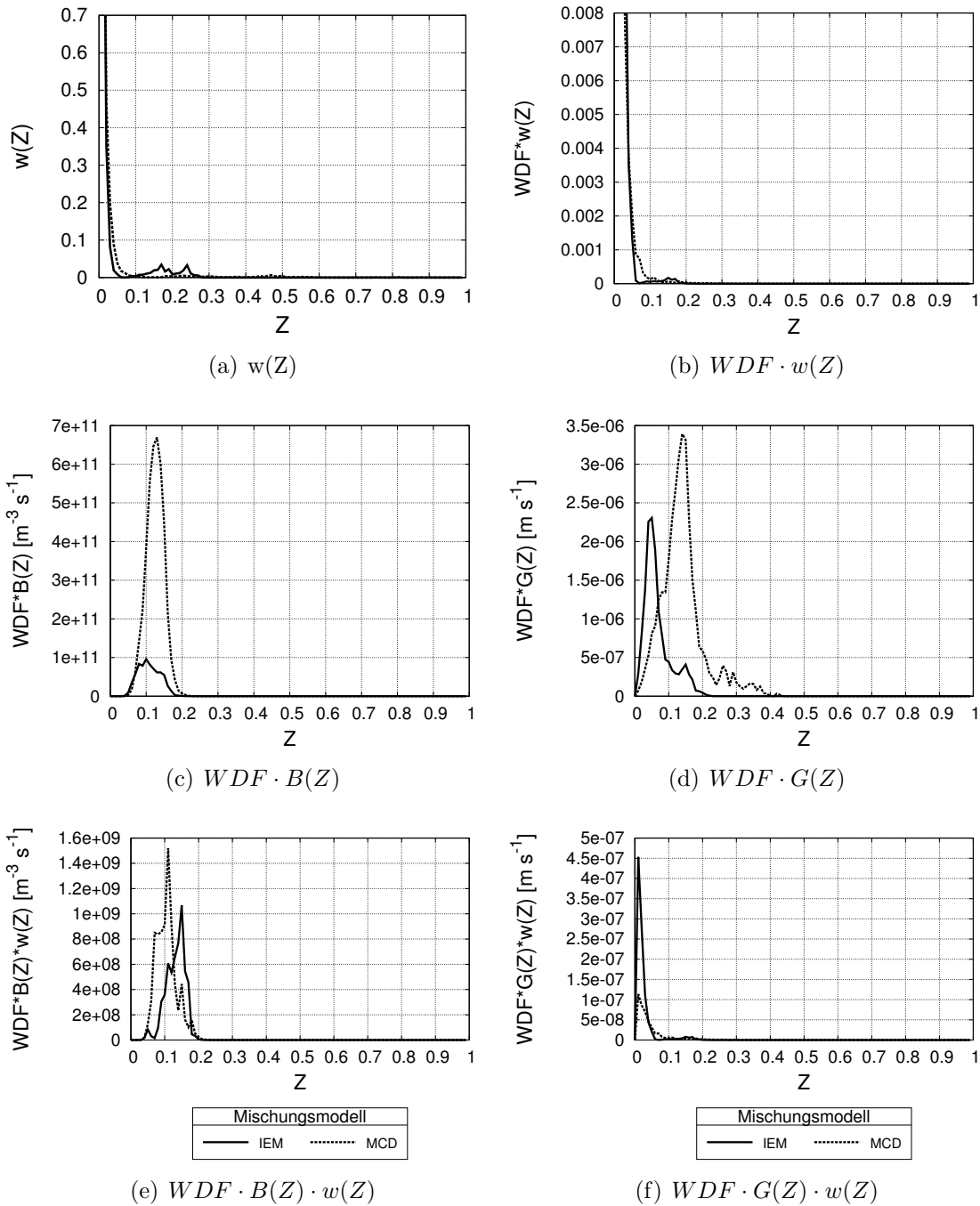


Abbildung 7.45: Normierte Gewichtsverteilung  $w(Z)$ ,  $WDF \cdot w(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z)$ ,  $WDF \cdot G(Z)$ ,  $WDF \cdot B(Z) \cdot w(Z)$  und  $WDF \cdot G(Z) \cdot w(Z)$  bei  $z/D = 60$  für IEM- und MCD-Mischungsmodell

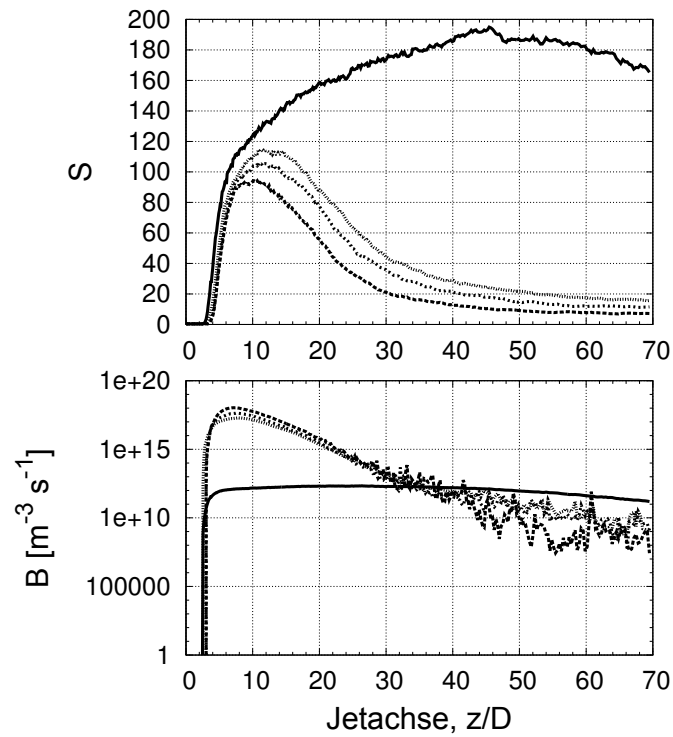
Die Betrachtung zeigt, dass der Einfluss der Gewichte der Informationsträger eine signifikante Rolle spielt. Die Gewichtsverteilungen spiegeln die Eigenschaften der Mischungsmodelle wieder, verschieben jedoch die Schwerpunkte der WDF zu niedrigeren Massenbrüchen. Diese Verschiebung ist auch der besonderen Gewichtsverteilung der MC-Partikel durch die Eigenschaften der Randbedingungen in Kombination mit der gewünschten Besetzungszahl der LES-Zellen geschuldet. Der Einfluss auf die betrachteten Prozesse ist von der Sensitivität im Mischungsbruchraum abhängig und hat besonderen Einfluss auf den Wachstumsprozess der Tropfen durch Kondensation. Die Untersuchungen dieses Abschnittes zeigen auch die Wichtigkeit der Modellierung des turbulenten Mischens, welche großen Einfluss auf die Skalarverteilungen hat. Die Unterschiede in der Skalarverteilung wirken sich stark auf die betrachteten Prozesse der Kondensation und homogenen Nukleation aus und führen zu deutlichen Unterschieden in der Größenverteilungsfunktion der Tropfen.

## 7.5 Einfluss der Oberflächenspannung

Um den Einfluss der Oberflächenspannung  $\sigma$  zu untersuchen wurden Rechnungen mit den modifizierten Oberflächenspannungen nach Mastorakos [41]  $\sigma_{Mi}$  (siehe Abschnitt 3.3) durchgeführt. Hierfür wurde das LES-Netz mit 0,5 Millionen LES-Zellen und  $N_{MC,min} = 5$ ,  $N_{MC,max} = 10$  verwendet. Die verwendeten Fälle sind mit den Kürzeln F5, F18, F19 und F20 bezeichnet. Eine Übersicht der wichtigsten Eigenschaften findet sich in Tabelle 6.1.

In Abbildung 7.46(a) ist die Sättigung entlang der Jetachse aufgetragen. Der Verlauf unter Verwendung der modifizierten Oberflächenspannungen  $\sigma_{Mi}$  unterscheidet sich deutlich von dem unter Verwendung von  $\sigma$ . Die Sättigungen aus Rechnungen mit modifizierter Oberflächenspannung haben ein Maximum bei  $z/D \approx 8$  und fallen im weiteren Verlauf stark ab. Die Sättigung aus der Rechnung mit  $\sigma$  hat ein Maximum bei  $z/D \approx 45$  und fällt zum Ende des Rechengebietes leicht ab. Der Maximalwert ändert sich durch die Modifizierung der Oberflächenspannung stark und führt zu  $\approx 50\%$  niedrigeren Werten. Die Erklärung ist in der stark erhöhten Nukleationsrate zu finden. Durch die niedrigere Oberflächenspannung erhöht sich die Nukleationsrate um mehr als 5 Größenordnungen. Dies ist in Abbildung 7.46(b) zu erkennen (siehe auch Abschnitt 3.3). Es ist die Nukleationsrate für die verschiedenen Oberflächenspannungen entlang der Jetachse aufgetragen. Unter Verwendung der niedrigeren Oberflächenspannung zeigt sich ein ausgeprägtes Maximum der Nukleationsrate bei  $z/D \approx 5$ . Im Gegensatz zur Kurve unter Verwendung von  $\sigma$ , welche nur langsam zum Ende des Rechengebietes wieder absinkt, fallen die Werte der anderen Kurven stark ab. Die unstetige Form der Kurven ist durch die noch höhere Sensitivität der Nukleationsrate von den zugrunde liegenden Skalaren zu erklären. Die Rechnungen wurden bereits mit deutlich kleinerer Zeitschrittweite berechnet, was eine Verbesserung der Ergebnisse gegenüber den Standardeinstellungen bewirkte, jedoch keine vollständige Glättung der Kurven. Eine weitere Glättung der Kurven kann durch längere Mittelungszeit, mehr MC-Partikel pro LES-Zelle oder kleinere Zeitschrittweiten erreicht werden. Da jedoch keine neuen Erkenntnisse zu erwar-

ten sind, wurde vom Einsatz weiterer Ressourcen für diese Rechnungen abgesehen. Die stark ausgeprägten Maxima der Sättigung und Nukleationsrate unter Verwendung von  $\sigma_{Mi}$  lassen sich durch die Betrachtung von Abbildung 7.47 erklären. Es ist die Abweichung des normierten Massenbruches von DBP vom Mischungsbruch entlang der Jetachse dargestellt. Es ist augenscheinlich, dass mit sinkender Oberflächenspannung deutlich mehr Masse aus der Gasphase ausfällt. Dies ist durch die höhere Nukleationsrate und die damit verbundene größere Anzahl an Tropfen zu erklären. Zunächst fällt mehr Masse durch Nukleation aus der Gasphase aus, daher stehen mehr Tropfen zur Kondensation zur Verfügung und es geht deutlich mehr DBP in den flüssigen Zustand über. Die Rechnungen mit den modifizierten Oberflächenspannungen führen zum nahezu vollständigen Verlust des DBP aus der Gasphase ( $\approx 98\%$ ). Die Verwendung von  $\sigma$  führt zu  $\approx 25\%$  kondensierter Masse. In Abbildung 7.46(b) sind die Sättigung und Nukleationsrate über dem Radius aufgetragen. Die Sättigung aus der Rechnung mit  $\sigma$  zeigt ein lokales Minimum auf der Jetachse. Die Sättigungen aus Rechnungen mit  $\sigma_{Mi}$  weisen deutlich niedrigere Werte auf und haben ein Maximum auf der Jetachse. Das Verhalten von B ist analog, die leicht niedrigeren Werte der Nukleationsraten aus der Rechnung mit  $\sigma$  auf der Jetachse sind aufgrund der logarithmischen Darstellungen jedoch nicht augenscheinlich.



(a) Sättigung und Nukleation entlang der Jetachse

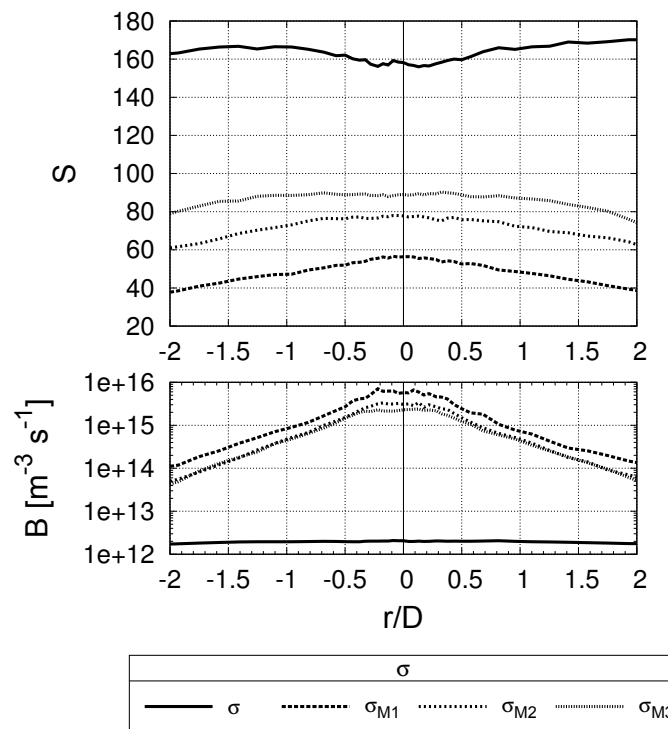

 (b) Sättigung und Nukleation über  $r/D$  bei  $z/D = 20$ 

 Abbildung 7.46: Sättigung und Nukleationsrate für verschiedene  $\sigma$  entlang der Jetachse und über dem Radius

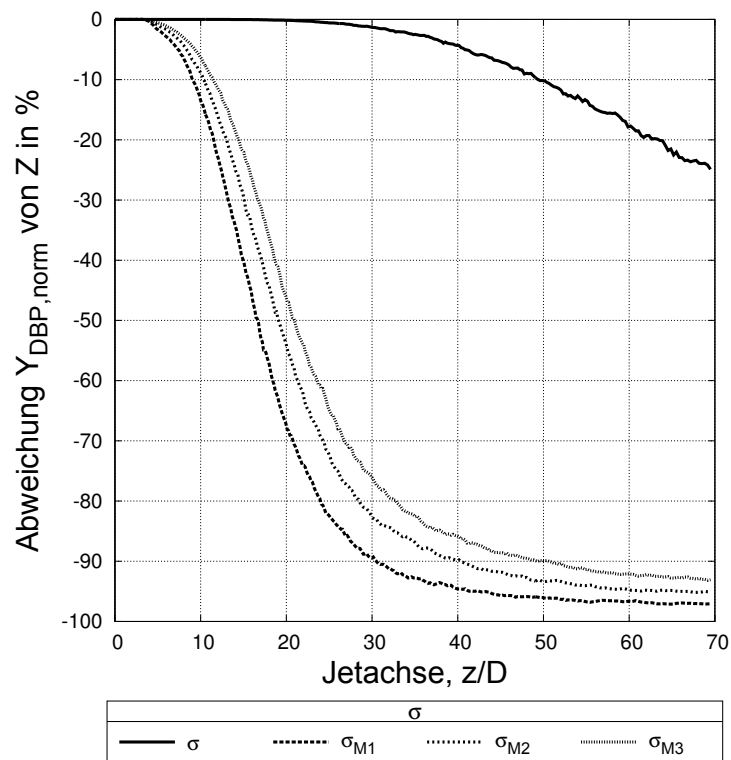
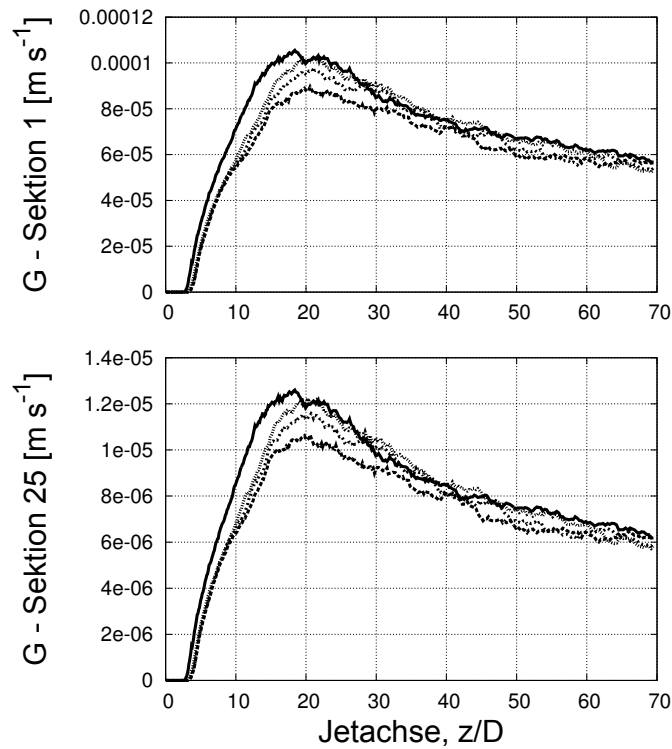


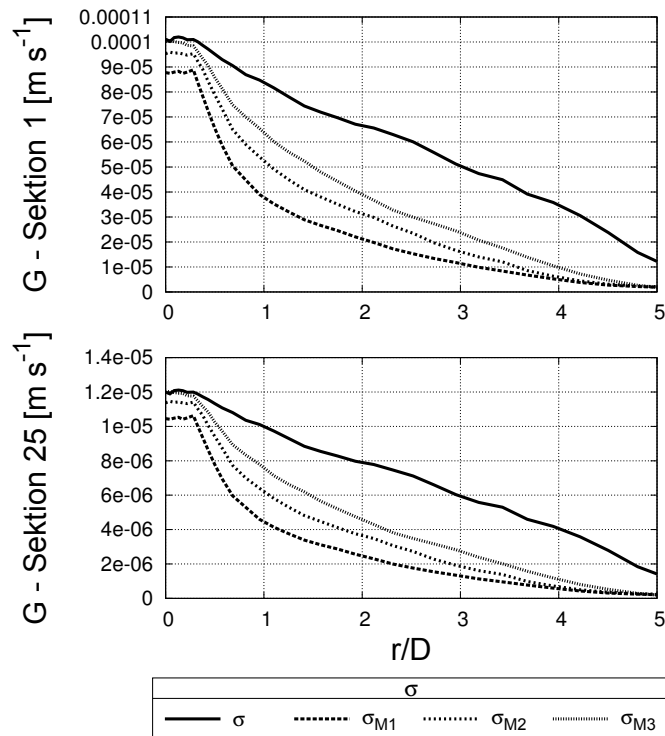
Abbildung 7.47: Prozentuale Abweichung des normierten Massenbruchs  $Y_{DBP}$  vom Mischungsbruch  $Z$  entlang der Jetachse für verschiedene  $\sigma$



Die Berechnung der Kondensationsrate nach Gleichung 3.20 geschieht ohne die Oberflächenspannung. Wie in Abbildung 7.48(a) dargestellt sind die Kurvenverläufe für die verwendeten Oberflächenspannungen  $\sigma$  und  $\sigma_{M_i}$  dennoch nicht identisch. Das unterschiedliche Verhalten der Kondensationsraten für die verwendeten Oberflächenspannungen ist durch die implizite Kopplung durch den Massenabzug zu erklären. In Abbildung 7.48(b) sind die Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion über dem Radius zu betrachten. Die Rechnung unter Verwendung von  $\sigma$  zeigt einen gleichmäßigen Abfall mit zunehmendem Abstand von der Jetachse. Die Verwendung der modifizierten Oberflächenspannungen  $\sigma_{M_i}$  führt zu einem Plateau auf der Jetachse für  $z/D < 0,5$ , welches von einem steilen Abfall der Kondensationsrate entlang des Radius begrenzt wird.



(a) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion entlang der Jetachse

(b) Kondensationsraten der 1. und 25. Sektion über  $r/D$  bei  $z/D = 20$ Abbildung 7.48: Sättigung und Nukleationsrate für verschiedene  $\sigma$  entlang der Jetachse und über dem Radius

Betrachtet man die Größenverteilung der Tropfen aus dem gesamten Rechengebiet in Abbildung 7.49, so ist zu erkennen, dass mit fallender Oberflächenspannung deutlich mehr Tropfen gebildet werden. Dies ist auch in der Darstellung des nullten Momentes entlang der Jetachse in Abbildung 7.48(b) zu erkennen, welches sich analog zu den bereits diskutierten Nukleationsraten verhält. Die Größenverteilung der Tropfen zeigt mehr kleinere Tropfen für niedrigere Oberflächenspannungen, was im Einklang mit den vorherigen Betrachtungen der Kondensationsraten steht. Die Unstetigkeiten der Kurve des nullten Momentes rühren von der erhöhten Sensitivität der Nukleationsrate her.

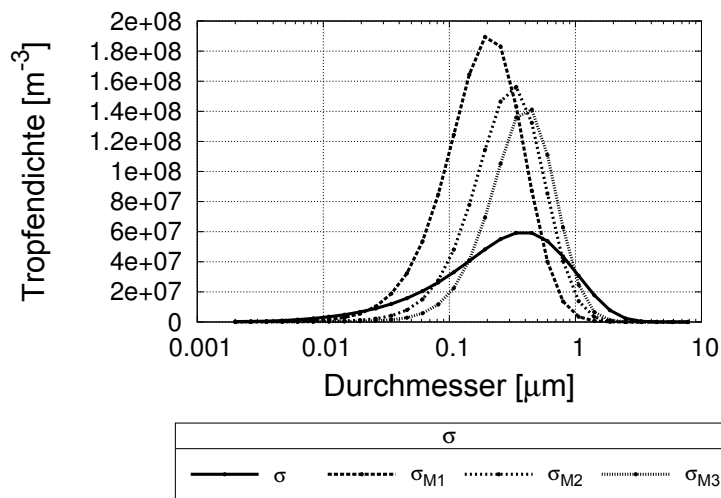


Abbildung 7.49: Größenverteilungsfunktion aus dem gesamten Rechengebiet für verschiedene  $\sigma$

Zusätzlich zu den aktuellen Simulationsdaten sind in Abbildung 7.50, in welcher das nullte Moment entlang der Jetachse zu sehen ist, die Simulationsergebnisse aus Rechnungen mit der „stochastic Fields“-Methode (SF) von [41] eingetragen. Es ist zu erkennen, dass mit sinkender Oberflächenspannung höhere Partikelzahlen erreicht werden. In den Simulationen von [41] wurde der Massenverlust der Gasphase nicht berücksichtigt, dieser Effekt ist in den aktuellen Simulationen für das starke Absinken der Nukleationsraten, nach einem Maximum nahe der Düse, und somit auch der Tropfendichte entlang der Jetachse verantwortlich. Die Unterschiede des nullten Momentes aus Simulationen von [41] und den Simulationen dieser Studie betragen mehrere Größenordnungen, was den unterschiedlichen Formulierungen der Nukleationsrate zuzuschreiben ist (siehe Abschnitt 3.3). Das Verhalten der Nukleationsraten und des nullten Momentes entspricht den Beobachtungen aus [41]. Die Verringerung der Oberflächenspannung führt zu höheren Nukleationsraten und einem früheren Einsetzen des Phasenübergangs. Die physikalischen Zusammenhänge werden somit erwartungsgemäß wiedergegeben.

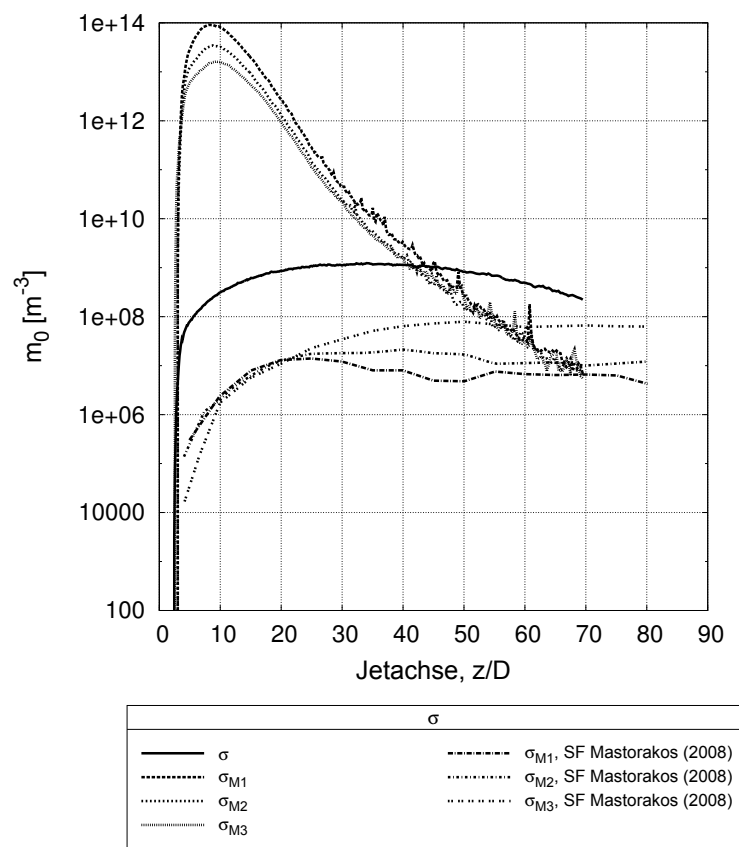


Abbildung 7.50: Nulltes Moment entlang der Jetachse für verschiedene  $\sigma$

# 8 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Abschnitt wird zunächst eine Zusammenfassung der vorliegenden Arbeit gegeben, bevor mit einem Ausblick abgeschlossen wird.

## 8.1 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine transportierte PBE-PDF-Methode unter Zuhilfenahme von MC-Partikeln zur Lösung der PBE unter Berücksichtigung kleinskaliger Turbulenz umgesetzt. Hierbei wurde das Strömungsfeld mit einer LES-Simulation berechnet, wobei das dynamische Smagorinsky-Modell zur Schließung verwendet wurde. Die Bewegungsgleichung der MC-Partikel wurde mit Hilfe des von der LES-Simulation bereit gestellten Geschwindigkeitsfelds gelöst. Die Eigenschaften der kleinskaligen Turbulenz wurden über statistische Prozesse abgebildet.

Ein wesentlicher Bestandteil der Arbeit ist die numerische Umsetzung mit dem Softwarepaket OpenFOAM. Die zur Modellierung der homogenen Nukleation und des Wachstums aufgrund von Kondensation nötigen, in der Literatur zur Verfügung stehenden mathematischen Formulierungen wurden analysiert und implementiert. Das Softwarepaket wurde um projektspezifische Funktionalität erweitert, welche die Berechnung der homogenen Nukleation, der Kondensationsraten, die Repräsentation der diskretisierten Größenverteilungsfunktion sowie gewichtete Filterungs- und Mittelungsoperationen beinhaltet. Im Rahmen dieser Arbeit wurde zudem ein Kontrollalgorithmus für die MC-Partikel-Zahl-Dichte entwickelt. Die gewichtete, räumliche Filterung und zeitliche, gewichtete Mittelung der stochastischen Realisierungen, welche durch die einzelnen MC-Partikel gegeben sind, wurde ebenfalls implementiert. Die aus Filterungs- und Mittelungsoperationen resultierenden Daten dienen als Grundlage der Analyse und Validierung. Gegenstand der Analyse sind Skalarverteilungen, die Nukleationsrate, die Kondensationsrate, die Größenverteilungsfunktion und ausgewählte Momente.

Die Analyse der Effekte der Kondensation zeigt eine weitreichende Kopplung aller relevanten Größen durch den Massenverlust der Gasphase. Die Unterschiede in der Nukleations-, Kondensationsrate und der Größenverteilungsfunktion mit und ohne Berücksichtigung des Massenverlusts sind signifikant. Die Rolle der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle hat sich bei der Durchführung einer LES-PDF-Simulation mit MC-Partikeln als essentieller Bestandteil erwiesen. In der Fachliteratur beschriebene Kontrollalgorithmen auf Ensemble-Ebene konnten aufgrund der Eigenschaften der LES und Anforderungen der Mischungsmodelle sowie begrenzter Computerressourcen nicht erfolgreich umgesetzt werden. Insbesondere die Konservierung der Information zu löschender MC-Partikel ohne künstliches Mischen stellt eine Herausforderung

dar, welche durch den im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Kontrollalgorithmus zufriedenstellend erfüllt werden konnte. Eine Unabhängigkeitsbetrachtung der Diskretisierung in verschiedenen Dimensionen führte zu Simulationsparametern, welche die Berechnung der untersuchten Größen mit geringst möglichem Einfluss, unter Berücksichtigung der Ressourcen, der Diskretisierung liefern. Der Vergleich der Ergebnisse mit früheren Forschungsarbeiten zeigt qualitativ übereinstimmendes Verhalten betrachteter Größen. Das Verhalten charakteristischer Größen bei Variation der Randbedingungen stimmt ebenfalls mit Ergebnissen früherer Arbeiten überein. Die Analyse des Einflusses der berücksichtigten zeitlichen und räumlichen Information turbulenter Strukturen auf die Rate der Sättigung, der homogenen Nukleation und der Kondensation verdeutlicht den großen Effekt auf den Prozess der Tropfenbildung und des Tropfenwachstums. Durch die nichtlineare Abhängigkeit des Prozesses von der zugrunde liegenden Skalarverteilung haben auch die kleinsten Fluktuationen einen großen Einfluss. Die zur Schließung der MC-Partikel-Gleichungen verwendeten Mischungsmodelle (IEM, MCD) zeigen in der Gegenüberstellung ein mit der Fachliteratur im Einklang stehendes Verhalten. Die aus den verwendeten Mischungsmodellen resultierenden unterschiedlichen WDF der Skalarverteilungen haben einen großen Einfluss auf die Prozesse der homogenen Nukleation und Kondensation. Die beobachteten Effekte unterschiedlicher Modellierungen der Oberflächenspannung stehen ebenfalls im Einklang mit Berichten der Fachliteratur.

Die numerische Umsetzung der LES-PDF-Methode schafft die Möglichkeit einer effizienten Berechnung der Größenverteilungsfunktion gebildeter Tropfen in turbulenten Strömungen. Die Validierung anhand vorliegender experimenteller und numerischer Ergebnisse früherer Forschungsarbeiten zeigt eine korrekte physikalische Umsetzung des Konzepts. Die zur Schließung des turbulenten Mischvorgangs der MC-Partikel verwendeten Mischungsmodelle können das Verhalten der Skalarverteilungen in Einklang mit der Fachliteratur wiedergeben. Der neu entwickelte MC-Partikel-Dichte-Kontroll-Algorithmus ermöglicht die Kontrolle der Anzahl der MC-Partikel pro LES-Zelle mit minimierten Mischungseffekten und Informationsverlust. Die Betrachtung des Einflusses der räumlichen und zeitlichen Information der kleinskaligen Turbulenz auf abhängende Größen verdeutlicht die Notwendigkeit selbige zu berücksichtigen.

## 8.2 Ausblick

Mit der Umsetzung der LES-PDF-Methode mit Hilfe von MC-Partikeln und einer Repräsentation der Größenverteilungsfunktion, ohne Annahmen bezüglich deren Form, ist die Voraussetzung für weitere Forschung im Bereich turbulenter, reaktiver Strömungen geschaffen. Die Verwendung einer PDF-Methode ermöglicht die Berechnung der Quellterme ohne Modellierung und ist somit ein wertvolles Werkzeug für die Berechnung von nicht linear von den Skalarverteilungen abhängenden Vorgängen. Die Kopplung mit einer LES ermöglicht die Erfassung instationärer Vorgänge in komplexen Strömungsfeldern und erschließt somit neue Anwendungsfelder. Für weitere Forschungsarbeiten sollte jedoch ein verbessertes Mischungsmodell verwendet werden. Hierbei wäre das MMC-Mischungsmodell besonders lohnenswert, welches

Rechnungen mit weniger MC-Partikeln als LES-Zellen ermöglicht. Durch die Lokalisierung des Mischvorgangs mittels einer weiteren Dimension kann der Vorgang über mehrere LES-Zellen stattfinden und mindert Anforderungen an den MC-Partikel-Zahl-Kontrollalgorithmus. In Abhängigkeit der Anforderungen zukünftiger Simulationen muss aber auch im Bereich der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle weitere Forschungsarbeit geleistet werden. Die Konservierung der Information zu löschender MC-Partikel ohne künstliches Mischen bei Algorithmen, welche auf den einzelnen Realisierungen basieren, stellt eine Herausforderung dar. Bei Kontrollalgorithmen welche auf Ensemble-Ebene arbeiten, stellt die Konservierung der Mittelwerte der transportierten Skalare noch nicht quantifizierte Anforderungen an die Anzahl der Repräsentanten im Verhältnis zur Größe des Ereignisraums. Die Auswirkungen auf die nichtlinear abhängigen Prozesse der Tropfenbildung und des Wachstums sollten auch Gegenstand zukünftiger Forschungsarbeiten sein. Des Weiteren sollte das Verhalten des Löser bei Variation der Reynolds-Zahl und Stromaufteilung mit den verfügbaren experimentellen Daten verglichen werden um die physikalische Konsistenz der Umsetzung weiter zu untersuchen und zukünftige Vorhersagen abzusichern.





## 9 Literaturverzeichnis

- [1] *Chemical Reaction and Reactor Engineering*. Chemical Industries. Taylor and Francis, 1986.
- [2] J. Akroyd. *Mean reaction rate closures for nanoparticle formation in turbulent reacting flow*. PhD thesis, University of Cambridge, 2012.
- [3] A. Alexandrescu. *C++ Design: Generic Programming and Design Patterns Applied*. C++ in-Depth Series. Adison-Wesley, 2001.
- [4] M. P. Anisimov, E. G. Fominykh, S. V. Akimov, and P. K. Hopke. Vapor-gas/liquid nucleation experiments: A review of the challenges. *Journal of Aerosol Science*, 40(9):733 – 746, 2009.
- [5] L. Arnold. *Stochastische Differentialgleichungen: Theorie u. Anwendung*. Oldenbourg R. Verlag GmbH, 1973.
- [6] M. Attarakih, M. Jaradat, M. Hlawitschka, H. J. Bart, and J. Kuhnert. Integral formulation of the population balance equation using the cumulative qmom. In E. N. Pistikopoulos, M. C. Georgiadis, and A. C. Kokossis, editors, *21st European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, volume 29 of *Computer Aided Chemical Engineering*, pages 81 – 85. Elsevier, 2011.
- [7] L. E. Baker and K. D. Luks. Critical point and saturation pressure calculations for multipoint system. *Society of Petroleum Engineers*, 1980.
- [8] J. Baldyga, L Makowski, and W. Orciuch. Double-feed semibatch precipitation: Effects of mixing. *Chemical Engineering Research and Design*, 85:745–752, 2007.
- [9] J. Baldyga and W. Orciuch. Closure problem for precipitation. *Chemical Engineering Research and Design*, 75:160–170, 1997.
- [10] J. Baldyga and W. Orciuch. Barium sulphate precipitation in a pipe. *Chemical Engineering Science*, 56:2435–2444, 2001.
- [11] R. J. Batterham, J. S. Hall, and G. Barton. Pelletizing kinetics and simulation of full-scale balling circuits. *3rd Int. symp. on Agglomeration, Nürnberg*, 1981.
- [12] R. Becker and W. Döring. Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen. *Annalen der Physik*, 416(8):719–752, 1935.

- [13] V. M. Bedanov, V. S. Vaganov, G. V. Gadiyak, G. G. Kodenev, and A. Rubakhin. Experimental determination of the number of molecules in a critical nucleus. test of the homogeneous nucleation theory. *Sov.J.Chem.Phys.*, 7(4):917–933, 1990.
- [14] P. J. Blatz and A. V. Tobolsky. Simultaneous polymerization–depolymerization. *Journal of Physical Chemistry*, 49:77, 1945.
- [15] U. Breymann. *C++.: Einführung und professionelle Programmierung. Für Leser und Leserinnen mit oder ohne Kenntnisse einer Programmiersprache. Entspricht dem internationalen C++-Standard ISO/IEC 14882.* Hanser Fachbuchverlag, 2001.
- [16] I. N. Bronštejn, G. Musiol, and H. Mühlig. *Taschenbuch der Mathematik.* Deutsch, 2008.
- [17] D. Browarzik and H. Kehlen. Continuous kinetics of reversible reactions in polydisperse mixtures. *Chemical Engineering Science*, 52:177, 1997.
- [18] R. R. Cao, H. Wang, and S. B. Pope. The effect of mixing models in {PDF} calculations of piloted jet flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1):1543 – 1550, 2007.
- [19] B. W. Carnow. *Health effects of aerosols emitted from an activated sludge plant.* Research reporting series: Environmental health effects research. 1979.
- [20] T. L. Chan, Y. H. Liu, and C. K. Chan. Direct quadrature method of moments for the exhaust particle formation and evolution in the wake of the studied ground vehicle. *Journal of Aerosol Science*, 41(6):553 – 568, 2010.
- [21] S. Chapman and T. G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases.* Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, 1970.
- [22] R. Clift, J.R. Grace, and M.E. Weber. *Bubbles, Drops, and Particles.* Academic Press, 1978.
- [23] J. M. Coulson, J. F. Richardson, and D. G. Peacock. *Chemical and Biochemical Reactors and Process Control.* Chemical Engineering Technical Series. Pergamon Press, 1994.
- [24] C.T. Crowe, J.D. Schwarzkopf, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows with Droplets and Particles, Second Edition.* Taylor & Francis, 2011.
- [25] J. W. Deardorff. The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. *Journal of Fluids Engineering*, 95, 1973.
- [26] W. Demtröder. *Experimentalphysik 1: Mechanik und Wärme.* Experimentalphysik / Wolfgang Demtröder. Springer-Verlag GmbH, 2012.

- 
- [27] D. Dietzel, D. Messig, F. Piscaglia, A. Montorfano, G. Olenik, O. T. Stein, A. Kronenburg, A., and C. Hasse. Evaluation of scale resolving turbulence generation methods for large eddy simulation of turbulent flows. *Computers and Fluids*, 93(0):116 – 128, 2014.
- [28] AIChE. (1997). DIPPR. (design institute for physical property data). thermodynamic database. newyork:american institute of chemical engineers., 1997.
- [29] C. Dopazo and E. E. O’Brien. An approach to the autoignition of a turbulent mixture. *Acta Astronaut*, 1:1239–1266, 1974.
- [30] R. L. Drake. A general mathematical survey of the coagulation equation. *Topics in Current Aerosol Research*, 3(2), 1972.
- [31] W. Dreyer and F. Duderstadt. On the becker döring theory of nucleation of liquid droplets in solids. *Journal of Statistical Physics*, 123(1):55–87, 2006.
- [32] J. K. Dukowicz. A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of Computational Physics*, 35(2):229 – 253, 1980.
- [33] F. Family, P. Meakin, and J. M. Deutch. Kinetics of coagulation with fragmentation: Scaling behavior and fluctuations. *Physical Review Letters*, 57:727, 1986.
- [34] R. Fan, D. L. Marchisio, and R. O. Fox. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas solid fluidized beds. *Powder Technology*, 139(1):7 – 20, 2004.
- [35] J. H. Ferziger and M. Peric. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer London, Limited, 2008.
- [36] S.K. Friedlander. *Smoke, Dust, and Haze: Fundamentals of Aerosol Dynamics*. Topics in chemical engineering. Oxford University Press, 2000.
- [37] J. Fröhlich. *Fröhlich LES*. Lehrbuch Maschinenbau. Teubner, 2006.
- [38] E. N. Fuller, K. Ensley, and J. C. Giddings. Diffusion of halogenated hydrocarbons in helium. the effect of structure on collision cross section. *Journal for Physical Chemistry*, 73:3679–3685, 1969.
- [39] E. Gamma. *Entwurfsmuster: Elemente wiederverwendbarer objektorientierter Software*. Professionelle Softwareentwicklung. Addison-Wesley, 2009.
- [40] C. Gardiner. *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences*. Springer Series in Synergetics. Springer, 2009.
- [41] A. Garmory and E. Mastorakos. Aerosol nucleation and growth in a turbulent jet using the stochastic fields method. *Chemical Engineering Science*, 63(4):4078–4089, 2008.

- [42] F. Gelbard and J. H. Seinfeld. Numerical solution of the dynamic equation for particulate systems. *J. Comp. Phys.*, 28:357, 1978.
- [43] M. Germano. Turbulence: the filterin approach. *J. Fluid Mech.*, 238:325–336, 1992.
- [44] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. Cabot. A dynamic subgrid scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids*, 3(7):1760–1765, 1991.
- [45] S. L. Girshick and C. P. Chiu. Kinetic nucleation theory a new expression for the rate of homogeneous nucleation from an ideal supersaturated vapor. *The Journal of Chemical Physics*, 93(2):1273–1277, 1990.
- [46] R. G. Gordon. Error bounds in equilibrium statistical mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 9:655–663, 1968.
- [47] W. Graebel. *Advanced Fluid Mechanics*. Elsevier Science, 2007.
- [48] K. Hämeri and M. Kulmala. Homogeneous nucleation in a laminar flow diffusion chamber: The effect of temperature and carrier gas on dibutyl phthalate vapor nucleation rate at high supersaturations. *Journal of Chemical Physics*, 105:7696–7704, 1996.
- [49] D. Hänel. *Molekulare Gasdynamik: Einföhrung in Die Kinetische Theorie Der Gase und Lattice-Boltzmann-Methoden*. Springer, 2006.
- [50] W.C. Hinds. *Aerosol technology: properties, behavior, and measurement of airborne particles*. Wiley-Interscience. Wiley, 1999.
- [51] M. J. Hounslow, R. L. Ryall, and V. R. Marshall. A discretized population balance for nucleation, growth, and aggregation. *AIChE Journal*, 34(11):1821–1832, 1988.
- [52] H. M. Hulburt and S. Katz. Some problems in particle technology: A statistical mechanical formulation. *Chemical Engineering Science*, 19(8):555 – 574, 1964.
- [53] H. M. Hulburt and S. Katz. Some problems in particle technology: A statistical mechanical formulation. *Chem. Eng. Sci.*, 19, 1964.
- [54] M. Hull and D. Bowman. *Nanotechnology Environmental Health and Safety: Risks, Regulation and Management*. Micro and Nano Technologies. Elsevier Science, 2009.
- [55] K. Hämeri, M. Kulmala, E. Krissinel’, and G. Kodyonov. Homogeneous nucleation in a laminar flow diffusion chamber: The operation principles and possibilities for quantitative rate measurements. *The Journal of Chemical Physics*, 105(17), 1996.
- [56] M. Z. Jacobson. *Fundamentals of Atmospheric Modeling*. Cambridge University Press, 1999.

- [57] J. Janicka, W. Kolbe, and W. Kollmann. Closure of the transport equation for the probability density function of turbulent scalar fields. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 4(0), January 1979.
- [58] V. John. *Large Eddy Simulation of Turbulent Incompressible Flows: Analytical and Numerical Results for a Class of Les Models*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer Berlin Heidelberg, 2004.
- [59] D. Kashchiev. *Nucleation*. Elsevier Science, 2000.
- [60] A. Kempf, M. Klein, and J. Janicka. Efficient generation of initial- and inflow-conditions for transient turbulent flows in arbitrary geometries. *Flow, Turbulence and Combustion*, 74(1):67–84, 2005.
- [61] A. Kronenburg, R. W. Bilger, and J. H. Kent. Modeling soot formation in turbulent methane air jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, 121:24–40, 2000.
- [62] T. S. Kuan and R. P. Lindstedt. Transported probability density function modeling of a bluff body stabilized turbulent flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):767 – 774, 2005.
- [63] S. Kumar and D. Ramkrishna. On the solution of population balance equations by discretization. *Chemical Engineering Science*, 51:1311–1332, 1996.
- [64] P. L. C. Lage. Comments on the analytical solution to continuous population balance equation with coalescence and breakage—the special case with constant number of particles. *Chemical Engineering Science*, 57:4253–4254, 2002.
- [65] E. Laurien and H. Oertel jr. *Numerische Strömungsmechanik: Grundgleichungen und Modelle - Lösungsmethoden - Qualität und Genauigkeit*. Studium Technik. Vieweg+Teubner Verlag, 2011.
- [66] J. R. Lead and E. Smith. *Environmental and Human Health Impacts of Nanotechnology*. Wiley, 2009.
- [67] A. Leonard. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. *Advances in Geophysics*, 18:237, 1974.
- [68] M. Lesieur, O. Métais, and P. Comte. *Large-Eddy Simulations of Turbulence*. Cambridge University Press, 2005.
- [69] T. K. Lesniewski. *Particle Nucleation and Growth in Turbulent Jets*. PhD thesis, 1997.
- [70] T. K. Lesniewski and S. K. Friedlander. The effect of turbulence on rates of particle formation by homogeneous nucleation. *Aerosol Science and Technology*, 23:174–182, 1995.

- [71] T. K. Lesniewski and S. K. Friedlander. *Proceedings of the Royal Society London A*, (454):2477–2504, 1998.
- [72] D. K. Lilly. A proposed modification of the gemano subgrid scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics (1989-1993)*, 4(3):633–635, 1992.
- [73] R. P. Lindstedt, S. A. Louloudi, H. Pitsch, and J. P. Gore. Joint-scalar transported pdf modeling of soot formation and oxidation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30:775–783, 2005.
- [74] J. D. Lister, D. J. Smit, and M. J. Hounslow. Adjustable discretized population balance for growth and aggregation. *AIChE Journal*, 41(3):501 – 603, 1995.
- [75] L. B. Loeb. *The Kinetic Theory of Gases*. Dover phoenix editions. Dover Publications, 2004.
- [76] R. Löhner. *Applied Computational Fluid Dynamics Techniques: An Introduction Based on Finite Element Methods*. Wiley, 2008.
- [77] E Loth. Numerical approaches for motion of dispersed particles, droplets and bubbles. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26(3):161–223, 2000.
- [78] T. S. Lundgren. Distribution functions in the statistical theory of turbulence. *Physics of Fluids*, 10:969, 1967.
- [79] P. Marchal, R. David, J. P. Klein, and J. Villermaux. Crystallization and precipitation engineering. i: An efficient method for solving population balance in crystallization with agglomeration. *Chem. Eng. Sci.*, 43, 1988.
- [80] D. L. Marchisio, J. T. Piktorna, R. O. Fox, R. D. Vigil, and A. A. Barresi. Quadrature method of moments for population-balance equations. *AIChE Journal*, 49(5):1266–1276, 2003.
- [81] D. L. Marchisio, R. D. Vigil, and R. O. Fox. Implementation of the quadrature method of moments in {CFD} codes for aggregation–breakage problems. *Chemical Engineering Science*, 58(15):3337 – 3351, 2003.
- [82] D. L. Marchisio, R. D. Vigil, and R. O. Fox. Quadrature method of moments for aggregation–breakage processes. *Journal of Colloid and Interface Science*, 258(2):322 – 334, 2003.
- [83] F. Mayinger and B. Giernoth. *Transient phenomena in multiphase and multicomponent systems*. Forschungsbericht (Deutsche Forschungsgemeinschaft). Wiley-VCH, 2000.
- [84] B. J. McCoy and G. Madras. Analytical solution for a population balance equation with aggregation and fragmentation. *Chemical Engineering Science*, 58:3049–3051, 2003.

- 
- [85] R. McGraw. Description of aerosol dynamics by the quadrature method of moments. *Aerosol Science and Technology*, 27:255–265, 1997.
- [86] D. W. Meyer. A new particle interaction mixing model for turbulent dispersion and turbulent reactive flows. *Physics of Fluids (1994-present)*, 22(3):–, 2010.
- [87] D. W. Meyer and R. Deb. Modeling molecular mixing in a spatially inhomogeneous turbulent flow. *Physics of Fluids (1994-present)*, 24(2):–, 2012.
- [88] D. W. Meyer and P. Jenny. A mixing model for turbulent flows based on parameterized scalar profiles. *Physics of Fluids (1994-present)*, 18(3):–, 2006.
- [89] D. W. Meyer and P. Jenny. An improved mixing model providing joint statistics of scalar and scalar dissipation rate. *Combustion and Flame*, 155:490–508, 2008.
- [90] D. W. Meyer and P. Jenny. Micromixing models for turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 228(4):1275–1293, 2009.
- [91] D. W. Meyer and P. Jenny. Micromixing models for turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 228:1275–1293, 2009.
- [92] D. W. Meyer and P. Jenny. A mixing model providing joint statistics of scalar and scalar dissipation rate. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32:1613–1620, 2009.
- [93] S. Mitarai, J. J. Riley, and G. Kosály. Testing of mixing models for monte carlo probability density function simulations. *Physics of Fluids (1994-present)*, 17(4):–, 2005.
- [94] G. E. Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*, 38(8), April 1965.
- [95] J. B. Moss. Modelling soot formation for turbulent flame prediction. *Chemical Physics*, 5:551, 1995.
- [96] J. B. Moss, C. D. Stewart, and K. J. Syed. Flowfield modelling of soot formation at elevated pressure. *Symposium (International) on Combustion*, 2:413, 1989.
- [97] M. E. Mueller, G. Blanquart, and H. Pitsch. Hybrid method of moments for modeling soot formation and growth. *Combustion and Flame*, 156(6):1143 – 1155, 2009.
- [98] H. Muhr, R. David, and J. Villermaux. Crystallization and precipitation engineering—vi. solving population balance in the case of the precipitation of silver bromide crystals with high primary nucleation rates by using the first order upwind differentiation. *Chemical Engineering Science*, 51:309–319, 1996.

- 
- [99] M. Nicmanis and M. J. Hounslow. Finite-element methods for steady-state population balance equations. *AIChE Journal*, 44:2258–2272, 1998.
- [100] P. A. Nooren, H. A. Wouters, T. W. J. Peeters, D. Roekaerts, U. Maas, and D. Schmidt. Monte carlo pdf modelling of a turbulent natural-gas diffusion flame. *Combustion Theory and Modelling*, 1(1):79–96, 1997.
- [101] L. B. Okuñ. *Energy and Mass in Relativity Theory*. World Scientific Publishing Company, Incorporated, 2009.
- [102] G. Olenik. Implementation and validation of a diffusion based inflow generation method for openfoam. 2012.
- [103] A. R. Paschedag. Modeling of mixing and precipitation using cfd and population balances. *Chemical Engineering and Technology*, 27(3):232–236, 2004.
- [104] D. P. Patil and J. R. G. Andrews. An analytical solution to continuous population balance model describing oc coalescence and breakage—a special case. *Chemical Engineering Science*, 53:599, 1998.
- [105] I. Pesmazoglou, A.M. Kempf, and S. Navarro-Martinez. Aerosol nucleation in a turbulent jet using large eddy simulations. *Chemical Engineering Science*, 116(0):383 – 397, 2014.
- [106] G. Peter. *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. SpringerLink: Springer e-Books. Springer, 2005.
- [107] M. Pietsch. *Die Industrielle Revolution: von Watts Dampfmaschine zu Automation und Atomkernspaltung*. Herder-Bücherei. Herder, 1961.
- [108] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R. T. Edwards Incorporated, 2001.
- [109] S. B. Pope. personal communication.
- [110] S. B. Pope. A monte carlo method for the pdf equations of turbulent reactive flow. *Combustion Science and Technology*, 25(5-6):159–174, 1981.
- [111] S. B. Pope. Transport equation for the joint probability density function of velocity and scalars in turbulent flow. *Physics of Fluids*, 24:588–596, April 1981.
- [112] S. B. Pope. An improved turbulent mixing model. *Combustion Science and Technology*, 28(3-4):131–145, 1982.
- [113] S. B. Pope. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 11(119), 1985.
- [114] S. B. Pope. Mapping closures for turbulent mixing and reaction. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 2(5-6):255–270, 1991.



- 
- [115] S. B. Pope. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows. *Annual Reviews in Fluid Mechanics*, 1994.
- [116] S. B. Pope. Ten questions concerning the large eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6(35), 2004.
- [117] S.B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [118] M. Potin-Gautier, P. Grenier, and J. Bonastre. Nouvelle application analytique de la methode de determination des pressions de vapeur par saturation un gaz inerte. *Analytical Letters*, 15(17):1431–1448, 1982.
- [119] S.E. Pratsinis. Simultaneous nucleation, condensation and coagulation in aerosol reactors. *Journal of Colloid and Interface Science*, 124(2):416–427, 1988.
- [120] P. K. Yeung R. O. Fox. Improved lagrangian mixing models for passive scalars in isotropic turbulence. 158:961–985, 2003.
- [121] V. Raman, H. Pitsch, and R. O. Fox. Hybrid large-eddy simulation/Lagrangian filtered-density-function approach for simulating turbulent combustion. 143(1-2):56–78+, 2005.
- [122] D. Ramkrishna. The status of population balances. *Rev. Chem. Eng*, 49(3), 1985.
- [123] D. Ramkrishna. *Population Balances: Theory and Applications to Particulate Systems in Engineering*. Elsevier Science, 2000.
- [124] D. Ramkrishna and A. W. Mahoney. Population balance modeling. promise for the future. *Chemical Engineering Science*, 57:595–606, 2002.
- [125] A. Ranodolph and M. A. Larson. *Theory of Particulate Processes*. Academic Press, 1972.
- [126] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, and B. E. Poling. *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill series in chemical engineering. McGraw-Hill, 1987.
- [127] R. C. Reid, J. M. Prausnitz, and T. K. Sherwood. *The properties of gases and liquids*. McGraw-Hill chemical engineering series. McGraw-Hill, 1977.
- [128] J. A. Riddick and W. B. Bunger. Organic solvents, third edition (techniques of chemistry, volume 2). 1971.
- [129] S. Rigopoulos. Pdf method for population balance in turbulent reactive flow. *Chemical Engineering Science*, 62(23):6865 – 6878, 2007.
- [130] S. Rigopoulos. Population balance modelling of polydispersed particles in reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(4):412 – 443, 2010.

- 
- [131] S. Rigopoulos and A. G. Jones. Finite-element scheme for solution of the dynamic population balance equation. *AIChE Journal*, 49(5):1127–1139, 2003.
- [132] J. C. Rotta. *Turbulente Strömungen: eine Einführung in die Theorie und ihre Anwendung*. Göttinger Klassiker der Strömungsmechanik. Univ.-Verlag Göttingen, 2010.
- [133] V. Sabel'nikov and O. Souldard. rapidly decorrelating velocity-field model as a tool for solving one-point fokker-planck equations for probability density functions of turbulent reactive scalars. *R. Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 72:1–22, 2005.
- [134] J. Schechter and A. H. Fariborz. *High energy physics: the 25th annual Montreal–Rochester–Syracuse–Toronto Conference on High Energy Physics : MRST 2003 : a tribute to Joe Schechter : Syracuse, New York 13-15 May 2003*. American Institute of Physics, 2003.
- [135] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly Weather Review*, 91, 1963.
- [136] E. A. Soltysik, Lawrence Radiation Laboratory, and Berkeley. Lawrence Radiation Laboratory University of California. *Magnetohydrodynamic flow*. Lawrence Radiation Laboratory, 1959.
- [137] D. Stirzaker. *Stochastic Processes and Models*. Oxford University Press, 2005.
- [138] S. Subramaniam and D. C. Haworth. A probability density function method for turbulent mixing and combustion on three-dimensional unstructured deforming meshes. *International Journal of Engine Research*, 1:171–190, 2000.
- [139] S. Subramaniam and S. B. Pope. Mixing model for turbulent flows based on euclidian minimum spanning trees. *Combustion and Flame*, 115:487–514, 1998.
- [140] S. Subramaniam and S. B. Pope. A mixing model for turbulent reactive flows based on euclidean minimum spanning trees, 1998.
- [141] K. J. Syed, C. D. Stewart, and J. B. Moss. Modelling soot formation and thermal radiation in buoyant turbulent diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, 23:1533, 1991.
- [142] H. Tennekes and J. L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. Pe Men Book Company, 1972.
- [143] S. R. Tieszen, D. W. Stamps, and T. J. O'Hern. A heuristic model of turbulent mixing applied to blowout of turbulent jet diffusion flames. *Combust. Flame*, 106:422, 1996.
- [144] S. R. Turns. *An introduction to combustion: concepts and applications*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, 1996.

- 
- [145] L. Valino. Field monte carlo formulation for calculating the probability density function of a single scalar in a turbulent flow. *Flow, Turbulence and Combustion*, 60:157–172, 1998.
- [146] N. G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland Personal Library. Elsevier Science, 2011.
- [147] M. Vanni. Discretization procedure for the breakage equation. *AIChE Journal*, 45(4):916–919, 1999.
- [148] H. Vehkamäki. *Classical Nucleation Theory in Multicomponent Systems*. Springer, 2006.
- [149] G. Y. Di Veroli. *Stochastic modelling of particle formation in turbulent flows via the transported population balance-PDF method*. PhD thesis, Manchester, 2009.
- [150] G. Y. Di Veroli and S. Rigopoulos. *Physics of Fluids*, 23(4):043305, 2011.
- [151] J. Villiermaux and J. C. Devillon. Representation de la coalescence et de la redispersion des domaines de segregation dans un fluide par un modele d’interaction phenomenologique. *Second International Symposium on Chemical Reaction Engineering*, 1972.
- [152] B. Wan, T. A. Ring, K. M. Dhanasekharan, and J. Sanyal. Comparison of analytical solutions for cmsmpr crystallizer with {QMOM} population balance modeling in fluent. *China Particuology*, 3(4):213 – 218, 2005.
- [153] J. T. Wang. *Nonequilibrium Nondissipative Thermodynamics: With Application to Low-Pressure Diamond Synthesis*. Lecture Notes in Computer Science. Springer, 2002.
- [154] L. Wang and R. O. Fox. Application of in situ adaptive tabulation to {CFD} simulation of nano-particle formation by reactive precipitation. *Chemical Engineering Science*, 58(19):4387 – 4401, 2003.
- [155] L. Wang, A. S. Wexler, and Y. Zhou. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. i. zero-inertia case. *Physics of Fluids*, 10:266–276, 1998.
- [156] L. Wang, A. S. Wexler, and Y. Zhou. Statistical mechanical descriptions of turbulent coagulation. *Physics of Fluids*, 10:2647–2651, 1998.
- [157] L. Wang, A. S. Wexler, and Y. Zhou. Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 415:117–153, 2000.
- [158] A. Y. Watson, R. R. Bates, D. Kennedy, and H.E. Institute. *Air Pollution, the Automobile, and Public Health*. National Academy Press, 1988.

- 
- [159] K. Wieghardt. *Theoretische Strömungslehre*. Göttinger Klassiker der Strömungsmechanik. Univ.-Verlag Göttingen, 2005.
- [160] M. Wilck, K. Hämeri, F. Stratmann, and M. Kulmala. Determination of homogeneous nucleation rates from laminar flow diffusion chamber data. *Journal for Aerosol Science*, 29:899–911, 1998.
- [161] Y. Xiong and S. E. Pratsinis. Formation of irregular particles by coagulation and sintering. *J. Aerosol Sci.*, 22:199–202, 1991.
- [162] C. Yuan and R. O. Fox. Conditional quadrature method of moments for kinetic equations. *Journal of Computational Physics*, 230:8216–8246, 2011.
- [163] L. Zaichik, V.M. Alipchenkov, and E.G. Sinaiski. *Particles in Turbulent Flows*. John Wiley & Sons, 2008.
- [164] Kun Zhou and Tat Leung Chan. Simulation of homogeneous particle nucleation in a free turbulent jet. *Aerosol Science and Technology*, 45(8):973–987, 2011.
- [165] A. Zucca, D. L. Marchisio, A. A. Barresi, and R. O. Fox. Implementation of the population balance equation in {CFD} codes for modelling soot formation in turbulent flames. *Chemical Engineering Science*, 61(1):87 – 95, 2006.

## 10 Erratum

Bei der Aufarbeitung der Korrekturen, nach Abhalten des Rigorosums, kam in Abschnitt 7.4 eine Inkonsistenz zutage, welche in diesem Erratum erörtert wird. In Abbildung 7.37 ist der Verlauf des Mischungsbruches entlang der Jetachse und über dem Radius für  $z/D = 20$  dargestellt. Beim Vergleich der Kurvenverläufe aus den Simulationen mit dem IEM-Modell, dem MCD-Modell und der LES-Rechnung, können folgende Beobachtungen gemacht werden. Entlang der Jetachse sind die Kurvenverläufe zunächst identisch. Der Mischungsbruch bei Verwendung des IEM-Modells fällt ab  $z/D = 3$  stärker ab, als der Mischungsbruch aus der LES-Rechnung. Der Mischungsbruch bei Verwendung des MCD-Modells gleicht bis  $z/D = 30$  dem Mischungsbruch aus der LES-Rechnung. Für  $z/D > 30$  weicht auch dieser zunehmend vom Verlauf aus der LES-Rechnung ab und gleicht sich bis  $z/D = 70$  dem Verlauf aus dem MCD-Modell an. Die Betrachtung der Kurvenverläufe über dem Radius bei  $z/D = 20$  offenbart, dass ein unphysikalischer Skalarverlust stattfindet, da die Integrale der Kurvenverläufe nicht identisch sind. Die These für diese Inkonsistenz sieht einen Fehler in der Implementierung der MC-Partikel-Zahl-Kontrolle als Ursache. Aufgrund der in diesem Abschnitt beschriebenen Inkonsistenz ist davon auszugehen, dass alle Ergebnisse, welche mit dem MCD-Modell generiert wurden, mit einem Fehler behaftet sein werden. Daher sind diese Ergebnisse mit Vorsicht zu interpretieren.

## 10.1 Ursache der Inkonsistenz

Die Ursache des mischungsmodellabhängigen Skalarverlustes findet sich in der wechselseitigen Abhängigkeit, unterschiedlicher Module der Implementierung, mit den transportierten Eigenschaften der MC-Partikel. Das in Abschnitt 4.1.3 beschriebene Partikelmanagement erhält das Gewicht der MC-Partikel nach Gleichung 4.1, sowie den gewichteten Mittelwert aller intensiven Skalare nach Gleichung 4.2. Bei einem Übertrag der Information auf MC-Partikel mit identischen intensiven Skalaren, wurde die Masse des zu löschenden MC-Partikels auf das verbleibende MC-Partikel übertragen. Da der Übertrag der Information und die dafür nötige Lösung der Gleichungen aus Abschnitt 4.1.3 aufwendig ist, wurden MC-Partikel mit einer Temperaturdifferenz kleiner 0,1K als MC-Partikel mit identischem intensiven Skalar betrachtet und das Gewicht übertragen. Für den Übertrag wurde der untere nächste Nachbar im Mischungsbruchraum verwendet. Der Verlust des transportierten Skalars wird durch den Abstand im Mischungsbruchraum der MC-Partikel und deren Massendifferenz bestimmt. Bei vollständiger Durchmischung der MC-Partikel eins und zwei gilt für den neuen Skalarwert  $\Phi^*$  die Gleichung  $\Phi^* = \frac{w_1 \cdot \Phi_1 + w_2 \cdot \Phi_2}{w_1 + w_2}$ . Wird die Masse von Partikel eins auf Partikel zwei übertragen, so ergibt sich der Skalarverlust zu  $\Delta\Phi = \frac{w_1 \cdot (\Phi_2 - \Phi_1)}{w_1 + w_2}$ . Mit  $\Phi_1 > \Phi_2$  ergibt sich  $\Delta\Phi < 0$ . Wie in Abschnitt 7.4 gezeigt wurde, ist die Verteilung des Mischungsbruches je nach Mischungsmodell stark unterschiedlich. Betrachtet man in Abbildung 7.33 die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung des Mischungsbruches aus Rechnungen mit dem IEM-Mischungsmodell und MCD-Mischungsmodell bei  $z/D = 10$ , so zeigen sich signifikante Unterschiede. Das IEM-Modell hat im mittleren Mischungsbruchbereich eine Besetzungswahrscheinlichkeit nahe Null. Das MCD-Modell zeigt hier eine größere Besetzungswahrscheinlichkeit. Daraus resultieren stärkere Gradienten der Besetzungswahrscheinlichkeit beim IEM-Modell im Vergleich zum MCD-Modell. Wird ein unterer nächster Nachbar im Mischungsbruchraum beim Löschvorgang gesucht, so ergibt sich beim IEM-Modell eine höhere Wahrscheinlichkeit für einen größeren Abstand im Mischungsbruchraum als beim MCD-Modell. Durch diesen Mechanismus ergibt sich ein Einfluss des Mischungsmodells auf den Massenverlust durch die Populationskontrolle. Der Einfluss des Gradienten der Verteilungsfunktion wird durch seine Steilheit und Ausdehnung im Mischungsbruchraum bestimmt. In Abbildung 7.33 zeigt das IEM-Mischungsmodell bei  $z/D = 10$  deutlich steilere Gradienten der Besetzungswahrscheinlichkeit des Mischungsbruches als das MCD-Modell. Mit zunehmendem Abstand von der Düse wird die Besetzungswahrscheinlichkeit im Mischungsbruchraum für das IEM-Modell steiler, die Ausdehnung im Mischungsbruchraum nimmt jedoch stark ab. Vergleicht man die Besetzungswahrscheinlichkeit in Abbildung 7.35 bei  $z/D = 30$ , so ergibt sich beim MCD-Modell eine ähnliche Steilheit der Besetzungswahrscheinlichkeit, wie beim MCD-Modell, jedoch mit größerer Ausdehnung im Mischungsbruchraum. Für Abstände  $z/D > 30$  tritt daher ein höherer Skalarverlust bei Verwendung des MCD-Modells auf, als beim IEM-Modell. Dadurch kann die in Abbildung 7.37 zu beobachtende Annäherung der Mischungsbruchverläufe entlang der Jetachse vom MCD-Modell an das IEM-Modell erklärt werden. Durch den beschriebenen Mechanismus kann das Auftreten, sowie das räumliche Verhalten

---

des Skalarverlustes für die betrachteten Mischungsmodelle qualitativ erklärt und die  
Eingangs gestellte These begründet werden.





# 11 Anhang

## 11.1 Feynman-Kac Theorem

Es sei  $X(t)$  die Lösung einer stochastischen Differentialgleichung.

$$dX = \mu(t, X)dt + \sigma(t, X)dW, \quad 0 \leq t \leq T$$

$F(t, x)$  erfülle die partielle Differentialgleichung. Mit der Randbedingung  $F(T, x) = K(x)$ .

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mu(t, x) \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(t, x) \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = 0 \quad 0 \leq t \leq T \quad (11.1)$$

Die Berücksichtigung des Prozesses  $Y(s) = F(s, X)$  im Zeitintervall  $t \leq s \leq T$  ergibt für das Ito-Formular in der integrierten Form Gleichung 11.2. Hierbei wird verwendet, dass  $F$  Gleichung 11.1 im Intervall  $[0, T]$  erfüllt.

$$\begin{aligned} F(T, X(T)) - F(t, X(t)) &= \int_t^T \frac{\partial F}{\partial s} + \mu(s, X) \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(s, X) \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} ds \\ &+ \int_t^T \sigma^2(s, X) \frac{\partial F}{\partial x} dW(s) = \int_t^T \sigma(s, X) \frac{\partial F}{\partial x} dW(s) \end{aligned} \quad (11.2)$$

Mit der Annahme, dass gilt  $E(\sigma(\frac{\partial F}{\partial x}))^2 < \infty$  (wobei  $E$  den Erwartungswert darstellt), ist das verbleibende Integral in Gleichung 11.2 ein Martingale mit dem Mittel Null, daher kann der Erwartungswert konditioniert auf  $X(t) = x$  genutzt werden, um Gleichung 11.3 zu erhalten.

$$E(F(T, X(T)) | X(t) = x) = F(t, x) \quad (11.3)$$

Mit der Randbedingung  $F(T, x) = K(x)$  ergibt sich die Feynman-Kac-Darstellung der Lösung  $F(t, x)$  der Gleichung 11.1 nach Gleichung 11.4.

$$F(t, x) = E(K(X(T)) | X(t) = x) \quad (11.4)$$

Die Grundlagen der Herleitung können der verwendeten Quelle [137] entnommen werden.

## 11.2 Erweiterung der OpenFOAM-Vektorklasse

Für die numerische Behandlung der diskretisierten Größenverteilungsfunktion muss für jedes MC-Partikel jede Stützstelle repräsentiert werden. Dies könnte mit einer entsprechenden Anzahl einzelner Skalare („doubles“) geschehen. OpenFOAM nutzt ein „Field“, um Objekte mit Datentypen zu verknüpfen. Im Falle des LES-Netzes wird z. B. mit einem „scalarField“ jedem Netzpunkt (Objekt) ein Skalar (Datentyp) zugewiesen. Die Dimension des Feldes ist  $N_{zellen} \cdot 1$ . Für ein „vectorField“ ist die Dimension  $N_{zellen} \cdot 3$ . Die „cloud“ behandelt die Gesamtheit der Partikel wie ein „Field“. Für ein Skalar in der Partikel-Klasse wird somit eine Datei auf der Festplatte angelegt, deren Zeilenzahl mit der Anzahl der Instanzen der Partikel-Klasse korrespondiert. Die Dimension ist für ein Skalar (z.B. die Temperatur) somit  $N_{Partikel} \cdot 1$ . Für einen Vektor ist die Dimension der Datei  $N_{Partikel} \cdot 3$ . Möchte man die Größenverteilungsfunktion z. B. mit 50 Stützstellen durch einzelne Skalare repräsentieren, so werden 50 Dateien benötigt. Es ist möglich über diese Dateien zu iterieren und deren Anzahl zur Laufzeit festzulegen. Für parallele Rechnungen ist jedoch eine Zerlegung in Prozessorordner erforderlich. Rechnet man mit 500 Prozessoren, so werden  $500 \cdot 50$  (25000) Dateien angelegt. Möchte man den Mittelwert und die Varianz der Größenverteilungsfunktion berechnen, so verdreifacht sich die Anzahl der Dateien (75000). Benötigt man z. B. 10 Speicherpunkte so wächst die Zahl der Dateien bereits auf 750000. Im Hochleistungsrechner HERMIT liegt die erlaubte Anzahl von Dateien pro Nutzergruppe standardmäßig bei  $10^6$ . Somit führt die Repräsentation der Größenverteilungsfunktion mit einzelnen Skalaren zu massiven Speicherproblemen.

Eine weitere Möglichkeit der Datenspeicherung ist eine Liste mit „double“ Elementen. Wie bereits erwähnt, verwendet OpenFOAM einen Feld-Typ, um einzelne Attribute festen Raumpunkten (LES-Netz) oder den Partikeln zuzuordnen und mit dem IO zu verknüpfen. Für die Nutzung von Templates muss der Datentyp der in einem Feldtemplate genutzt werden soll, spezifiziert werden. Z. B. für einen Vektor „Field< vector >“. Diese Notwendigkeit schließt die Liste als Option aus, da deren Länge variabel ist und zur Kompilierzeit nicht festgelegt werden kann.

Um alle notwendigen Anforderungen erfüllen zu können, wurde daher die Vektor-Klasse von OpenFOAM von drei Elementen auf  $N_k = 30, 40$  oder  $50$  erweitert. Alle Eigenschaften der Vektorklasse bleiben hierbei erhalten. Zur eindeutigen Benennung wurde der Begriff `superVector` verwendet. In Abbildung B0 ist das Vererbungsschema der IO-Fähigkeit, sowie die Spezialisierung der „Field“-Klasse und die Beziehung zu dem neuen Datentyp `superVector` gezeigt. Durchgezogene Pfeile stellen eine „ist ein“ Beziehung in umgekehrter Pfeilrichtung dar. Gleichmäßig gestrichelte Pfeile stellen eine Template-Spezifizierung in umgekehrter Pfeilrichtung dar. Der lang gestrichene Pfeil mit Punkten stellt eine Inkludierung in Pfeilrichtung dar (engl. „is part of“). Das Diagramm beschreibt somit von links nach rechts die Vererbungshierarchie.

In der unteren Hälfte wird die Vererbung der IO-Fähigkeit an die Field-, Cloud- und Partikelklasse beschrieben. In der oberen Hälfte werden die Inkludierung der `superVector`-Klasse und Template-Spezifizierungen beschrieben. Links oben ist die

Template-Spezifizierung von „Field“ mit dem neuen Datentyp `superVector` zu sehen. Rechts daneben die Spezifizierung des `IOFields` mit dem `superVectorField`. Weiter rechts sind exemplarisch die Spezifizierungen für die Partikel und Templateklassen dargestellt. Bei der Spezifizierung der „cloud“ und „particle“-Klassen zu `myParticleClass` und `myCloudClass` werden die projektspezifischen Funktionen und nötige Datentypen ergänzt (z. B. die Nukleationsfunktion und der Datentyp `superVector` etc.).

Die „ObjectRegistry“ ist ein „regIOObject“ (`registeredIOObject`), in welchem alle „regIOObjects“ eingetragen werden. Hierüber kann der IO-Vorgang gesteuert werden. Die Cloud ist eine „ObjectRegistry“, in welcher alle Partikel, welche vom Typ „regIOObject“ sind, eingetragen und verwaltet werden. Die Partikel (Objekte) werden von der Cloud mit deren Datentyp `superVector` zu einem `superVectorIOField` zusammen gefasst, welches ein „regIOObject“ ist. Der IO-Vorgang kann somit verwaltet werden. Die Datei, die aus dem `superVectorIOField` im Schreibvorgang resultiert, hat die Dimension  $N_{Partikel} \cdot N_k$ .

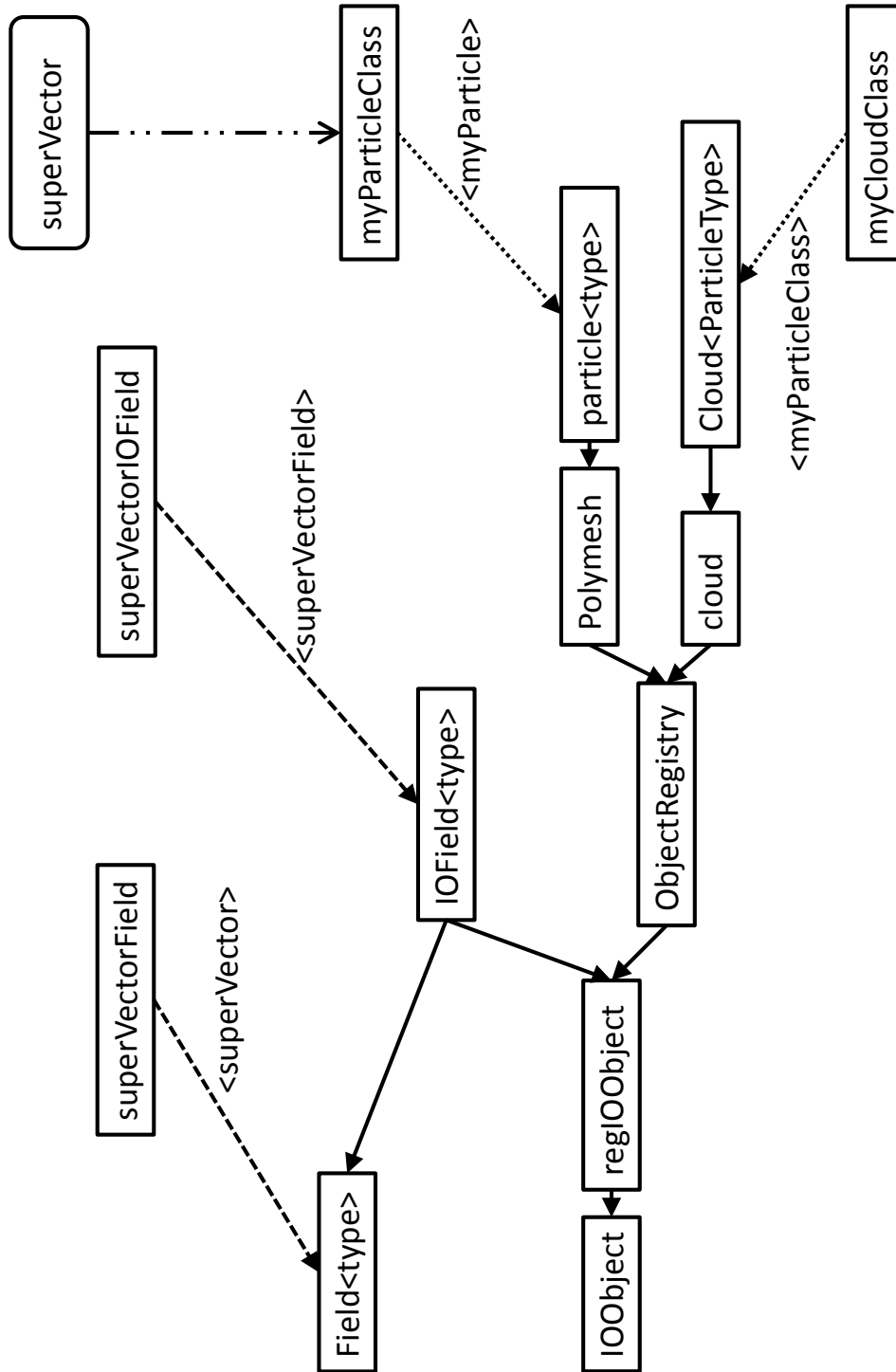


Abbildung B0: Vererbungsschema für „super Vektoren“, „filedTypes“ und IO-Fähigkeit

### 11.3 Kondensationsrate der 25. Sektion des Referenzfalls

In Abbildung C0 ist die Kondensationsrate der 25. Sektion der diskretisierten Größenverteilungsfunktion entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$  des Referenzfalls F1 zu betrachten. Der Tropfendurchmesser der 25. Sektion beträgt  $d_{25} = 4,015019 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ .

Die Kondensationsrate steigt entlang der Jetachse im Bereich von  $3 < z/D < 20$  steil an, findet ein Maximum bei  $z/D \approx 22$  und fällt bis zum Ende der Rechen-domain gleichmäßig ab. Der radiale Verlauf bei  $z/D = 10$  zeigt ein Maximum auf der Jetachse und fällt bis  $r/D \approx 4$  auf Null ab. Betrachtet man die Entwicklung der radialen Verläufe der Kondensationsrate stromab, so findet sich stets ein Maximum auf der Jetachse. Die Amplitude nimmt jedoch stetig ab und der Bereich hoher Wachstumsraten verbreitert sich radial.

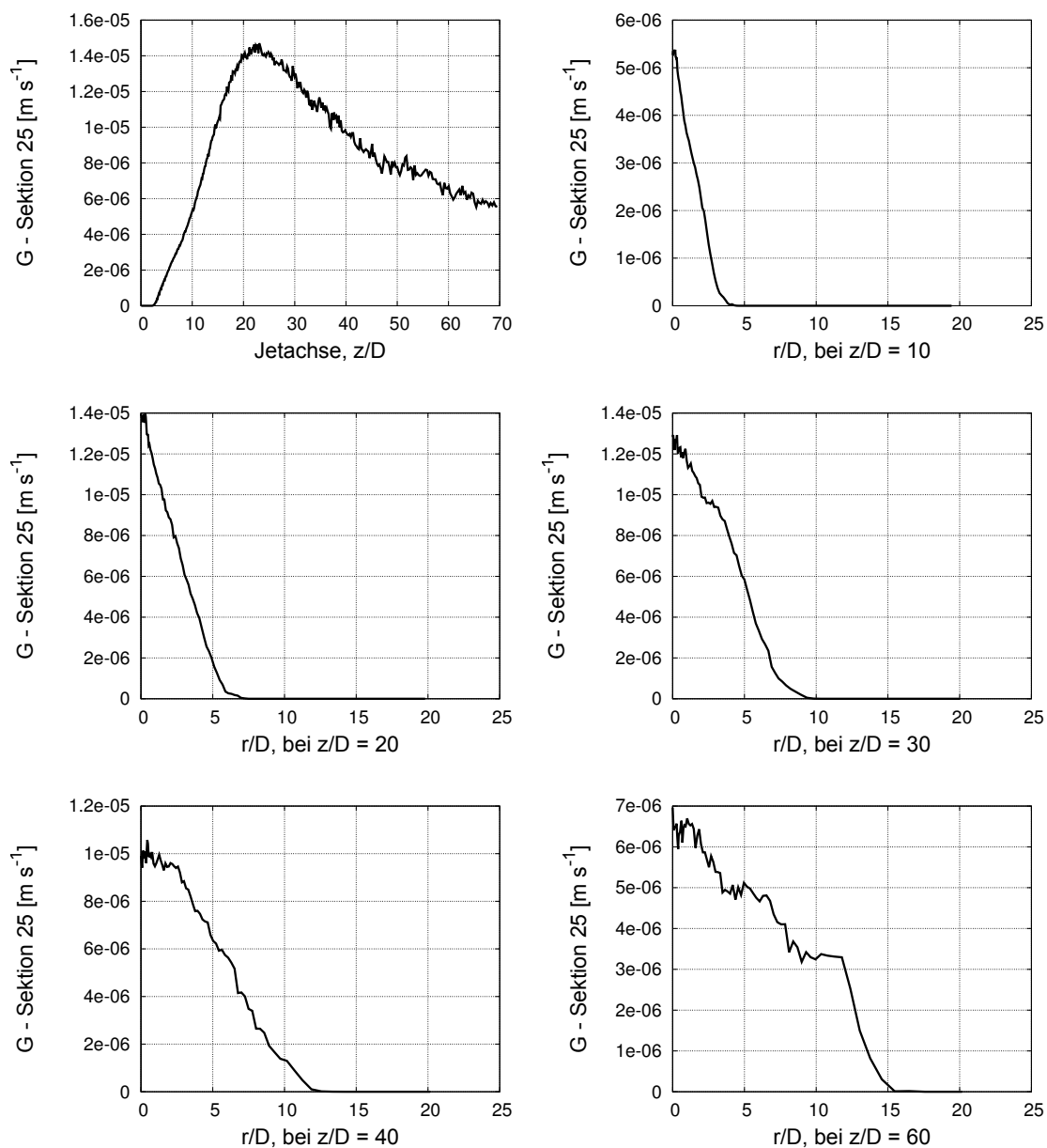


Abbildung C0: Kondensationsrate der 25. Sektion entlang der Jetachse und über dem Radius bei  $z/D = 10$ ,  $z/D = 20$ ,  $z/D = 30$ ,  $z/D = 40$  und  $z/D = 60$