

Schriftenreihe

Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik

**Numerische und experimentelle Untersuchungen  
zur Aerosolbildung aus binären Dampfgemischen  
von Wasser und Glycerin**

**Xinze Zhen**



**UNIVERSITÄT PADERBORN**  
*Die Universität der Informationsgesellschaft*

**Band**

**7**

# **Numerische und experimentelle Untersuchungen zur Aerosolbildung aus binären Dampfgemischen von Wasser und Glycerin**

Zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)  
an der Fakultät für Maschinenbau  
der Universität Paderborn

genehmigte  
DISSERTATION

von  
M. Sc. Xinze Zhen  
aus Dezhou / VR. China

Tag des Kolloquiums: 19.06.2019

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Hans-Joachim Schmid
2. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Jadran Vrabec

Schriftenreihe

Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik

# Numerische und experimentelle Untersuchungen zur Aerosolbildung aus binären Dampfgemischen von Wasser und Glycerin

Xinze Zhen



**UNIVERSITÄT PADERBORN**  
*Die Universität der Informationsgesellschaft*

Band

7



Schriftenreihe Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik

Band 7

**Xinze Zhen**

**Numerische und experimentelle Untersuchungen  
zur Aerosolbildung aus binären Dampfgemischen  
von Wasser und Glycerin**

D 466 (Diss. Universität Paderborn)

Shaker Verlag  
Düren 2020

**Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek**

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2019

Copyright Shaker Verlag 2020

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-7213-6

ISSN 2198-1302

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren

Telefon: 02421 / 99 0 11 - 0 • Telefax: 02421 / 99 0 11 - 9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • E-Mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand in den Jahren 2010 bis 2016 während meiner Tätigkeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik der Universität Paderborn.

Mein besonderer Dank gilt an erster Stelle meinem Doktorvater Prof. Dr.-Ing. Hans-Joachim Schmid für sein persönliches Engagement und seine hervorragende Unterstützung und Betreuung. Er hat die Arbeit mit begleitet und auf unterschiedliche Art und Weise konstruktive Anmerkungen und hilfreiche Anregungen gegeben. Die Diskussionen mit ihm waren jedes Mal sehr produktiv und zielführend. Lieber Hajo, als Mutter von zwei Kinder bedanke ich mich herzlichst für dein Verständnis; du hast eine sehr entspannte Arbeitsatmosphäre geschaffen und sodass ich eine gute Balance zwischen Arbeit und Familie finden konnte.

Ich möchte mich zudem sehr herzlich bei Prof. Dr. -Ing. Jadran Vrabec für die freundliche Übernahme des Zweitgutachtens bedanken.

Ebenso gilt mein Dank den freundlichen Kollegen, die mit mir zusammengearbeitet haben. Hier möchte ich besonders unsere „Lehrstuhl Mutter“ Ulrike Herrmann, Nadine Kirchhoff, Dr. Stefan Rösenberg, Dr. Josef Noeke, Dr. Phillip Grimm, Dr. Michael Dörmann, Dr. Sascha Schiller, Dr. Steffen Jesinghausen, Lena Tigges, Dr. Sven Pieper, und Zhongning Wei erwähnen. Ich war sehr glücklich, mit euch zusammenarbeiten zu können. Es war eine unvergessliche Zeit für mich. Und die tatkräftige Unterstützung unserer Labortechniker Ilona Stastny, Norbert Temborius und Norbert Krause, wären die Versuche im Labor nicht zu realisieren gewesen und dafür meinen besonderen Dank!

Ich bedanke mich bei Herrn Heiner Hasse und Herrn Eduard Hohmann für das Korrekturlesen.

Im Folgenden möchte ich meinen Eltern Dank sagen für die finanzielle Unterstützung und insbesondere auch für ihren Ansporn und ihr Vertrauen. Besonders in Stresssituationen konnte ich jederzeit meine Eltern in China anrufen. Ihr Zuspruch hat mich jedes Mal ermutigt alle anstehenden Probleme wieder in Ruhe anzugehen.

Ich bin besonders dankbar für die Hilfe meiner Schwiegereltern. Ohne ihre fortlaufende Unterstützung bei der Betreuung unserer beiden Söhne wäre es mir nicht möglich gewesen, meine Arbeit so konzentriert durchzuführen.

Danke Mein lieber Ehemann Zhen, dass du mein Leben so extrem bereicherst! Ohne deine Geduld bei deiner Begleitung meine Arbeit wäre vieles viel schwieriger gewesen. Schließlich bin ich meinen Kindern Yuanshu und Yuanmo sehr dankbar. Obwohl ihre Geburten die gesamte Promotionszeit verlängert haben, haben sie unserer Leben sehr bereichert und viel Freund gemacht!

Abschließend danke ich herzlich Prof. Dr.-Ing. Reiner Numrich, dass er mir nach dem Abschluss der Promotion Tätigkeit in meinem bevorzugten Arbeitsfeld ermöglicht hat.

Paderborn, Dezember 2019

Xinze Zhen





## Zusammenfassung

Der Schwerpunkt dieser Arbeit ist die numerische und experimentelle Untersuchung der Aerosolbildung aus einem binären Dampfgemisch. Der Aerosolbildungsprozess wird in die drei Schritte homogene Keimbildung, Wachstum und Koagulation unterteilt.

Für die numerische Untersuchung mit Hilfe der kommerziellen Software Parsival erfolgt die Aufstellung eines 1D Modelles. Damit kann die Partikelgrößenverteilung analysiert werden, aber die Verteilung der Stoffzusammensetzung der Partikeln ist nicht zu ermitteln. Deshalb wird ein 2D Modell mit der Monte-Carlo Simulation entwickelt. Um das MC-Modell effizient auszuführen, werden zwei Maßnahmen durchgeführt. Eine ist die Entwicklung einer Klassenmethode für die Koagulation. Die zweite Maßnahme ist, dass die Keimbildung und Koagulation als Ereignisse und das Wachstum als kontinuierlicher Prozess betrachtet werden. Beide Maßnahmen und die Anwendung der „Stepwise Constant Volume“ Methode gestalten die Simulation effizient und ohne Genauigkeitsverlust.

Bei den experimentellen Untersuchungen wird ein „Heated Capillary Aerosol Generator“ verwendet. Die Bestimmung der Partikeleigenschaft wird mittels Lichtstreuungsmessung mit zwei Messgeräten, einem Goniometer und einem Weißlichtspektrometer durchgeführt. Die experimentellen Ergebnisse und die Resultate der Simulation werden verglichen.

## Summary

The focus of this work is the numerical and experimental investigation of the formation of aerosols from a binary vapor mixture. The aerosol formation process is divided into the three steps homogeneous nucleation, growth and coagulation.

For the numerical analysis using the commercial software Parsival a 1D model is established, which allows to analyze the particle size distribution, whereas the concentration of the individual particles is difficult to calculate. For precisely this purpose a 2D model with the Monte Carlo simulation will be developed. To perform the MC method efficiently, two measures have been applied. One is the development of a class method for coagulation. The second measure is that throughout the simulation, nucleation and coagulation are regarded as events and growth as a continuous process. Both measures and the application of the Stepwise-Constant-Volume method make the simulation efficient and without loss of accuracy.

In the experimental studies, a „Heated Capillary aerosol generator“ is used. The experimental setup is described in detail. The light scattering measurement to determine the particle size is carried out with two instruments. The experimental results and the results of the simulation are compared.



## Liste der Vorveröffentlichungen

### Veröffentlichungen und Konferenz-Proceedings

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Simulation and validation of binary aerosol droplet formation.** Proceeding: International Congress on Particle Technology (PARTEC), Nürnberg, Deutschland (2016)

### Vorträge und Poster

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Simulation and validation of binary aerosol droplet formation.** International Congress on Particle Technology (PARTEC), Nürnberg, Deutschland (2016)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Highly efficient Monte Carlo simulation of binary aerosol droplet formation.** Aerosol Technologie (GAef), Karlsruhe, Deutschland (2014)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Measurement of binary aerosol droplet formation.** Aerosol Technologie (GAef), Karlsruhe, Deutschland (2014)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Highly efficient Monte Carlo simulation of binary aerosol droplet formation.** The 7<sup>th</sup> World Congress on Particle Technology (WCPT7), Beijing, China (2014)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Measurement of binary aerosol droplet formation.** The 7<sup>th</sup> World Congress on Particle Technology (WCPT7), Beijing, China (2014)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Simulation und Experiment of binary aerosol droplet formation.** European Aerosol Conference (EAC), Prague, Czech (2013)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Binary aerosol droplet formation .** International Congress on Particle Technology (PARTEC), Nürnberg, Deutschland (2013)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Simulation of binary aerosol droplet formation.** European Aerosol Conference (EAC), Manchester, Great Britain (2011)

Zhen, X.; Schmid, H.-J.: **Simulation of binary aerosol droplet formation.** International Aerosol Conference (IAC), Helsinki, Finland (2010)



---

## Inhaltsverzeichnis

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

---

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