1 Einführung

Die Zerstäubung von Flüssigkeiten ist ein Verfahren, das in vielen Bereichen der Industrie und des täglichen Lebens weit verbreitet ist. Bekannte Prozesse sind z.B. die Kraft- bzw. Brennstoffeinspritzung in Motoren von Kraftfahrzeugen oder in Heizungsanlagen, die Sprühtrocknung und die Sprühlackierung. Selbstverständlich ist das wissenschaftliche Interesse an der Untersuchung solch eines vielseitig eingesetzten Verfahrens groß, da nur gute Kenntnisse die optimale Gestaltung des Prozesses ermöglichen. Diese wiederum führt wegen des Einsatzes der richtigen Menge des zu versprühenden Stoffes meist zu einer Kostenreduktion und zu einer Verbesserung des gesamten Prozessablaufs. Im Falle der Brennstoffeinspritzung kommt außerdem noch der umweltschutztechnische Gesichtspunkt dazu, da die optimale Prozessgestaltung mit einem geringeren Schadstoffausstoß verbunden ist. So ist es nicht verwunderlich, dass der Zerfall von Flüssigkeitsstrahlen schon sehr lange wissenschaftlich untersucht wird. Der Bereich der eigentlichen Zerstäubung und hierbei besonders das Gebiet des dichten Sprays werden jedoch auch heute noch nicht vollständig verstanden und sind deshalb mit theoretischen Modellen oder numerischen Berechnungen nur unzureichend beschreibbar.



Abb. 1 Schematische Darstellung der verschiedenen Bereiche eines mit Hilfe einer Einstoffdüse erzeugten Sprays

Bei der Zerstäubung von Flüssigkeiten handelt es sich um einen Mehrphasenprozess, der immer dann auftritt, wenn eine hinreichend hohe Relativgeschwindigkeit zwischen der Flüssigkeit und dem umgebenden Gas besteht. Die zu zerstäubende Flüssigkeit wird über ein Zuführsystem zu einer Düse geleitet. Bereits dort können zwei getrennte Phasen vorliegen. Dies ist für alle kavitierenden Düsen der Fall, die besonders bei hohen Einspritzdrücken, wie sie bei der Kraftstoffeinspritzung auftreten, eingesetzt werden. Nach dem Austritt der Flüssigkeit aus der Düsenöffnung kommt es zu Wechselwirkungen mit dem umgebenden Gas. Im Falle von Zweistoffdüsen ist der umhüllende Gasstrahl nicht in Ruhe, sondern hat eine deutlich höhere Geschwindigkeit als der Flüssigkeitsstrahl, was die Zerstäubung weiter fördert. Im sogenannten Düsennahbereich liegen unabhängig von der Düsenart zunächst zwei deutlich voneinander getrennte Fluide vor. Daran schließen sich der Bereich eines sehr dichten und dann der Bereich eines verdünnten Sprays an. In Abb. 1 sind schematisch die Bereiche dargestellt, die bei der Zerstäubung mit einer Einstoffdüse auftreten.

Neben experimentellen Untersuchungen des Strahlzerfalls, die eine lange wissenschaftliche Tradition haben, werden neuerdings verstärkt numerische Berechnungen zur Vorhersage der Zerstäubung verwendet. Sie haben den Vorteil, dass vergleichsweise schnell und kostengünstig der Einfluss der zahlreichen charakteristischen Größen auf den Zerstäubungsprozess überprüft werden kann. Dazu zählen z.B. die Geometrie der Düse, die Stoffdaten und die Umgebungsbedingungen. Außerdem ist es möglich, eine Vielzahl relevanter Parameter im gesamten Strömungsgebiet zu bestimmen. Das erfordert bei Experimenten einen großen Aufwand und ist im Bereich sehr hoher Tropfenkonzentrationen zum Teil sogar ausgeschlossen. Die numerischen Berechnungsmethoden müssen jedoch ebenfalls gewissen Anforderungen genügen. Einerseits sollten möglichst genaue Modelle eingesetzt werden. Andererseits dürfen die Rechenzeiten nicht zu lang sein, um die Wirtschaftlichkeit des Verfahrens nicht zu gefährden.

Prinzipiell gibt es zwei Möglichkeiten, um Zweiphasenströmungen wie die Zerstäubung zu modellieren: das Euler-Lagrange- und das Euler-Euler-Verfahren, auch Zweifluidmodell genannt. In beiden Fällen wird die kontinuierliche fluide Phase mit der Eulerschen Betrachtungsweise beschrieben. Diese geht von einem ortsfesten Koordinatensystem aus und ermöglicht die Berechnung der Feldgrößen der betrachteten Phase in jedem Kontrollvolumen zu jedem Zeitschritt. Für die disperse Phase wird entweder ebenfalls dieser Ansatz (quasikontinuierliche Betrachtung) oder eine Lagrangesche Betrachtungsweise (Verfolgung vieler Partikeltrajektorien) verwendet. Bei letzterer werden die tatsächlich vorhandenen Partikeln zu numerischen Paketen zusammengefasst, die Partikeln mit gleichen Eigenschaften (Größe, Geschwindigkeit, ...) enthalten. Die Pakete werden durch das Berechnungsgebiet verfolgt, das Koordinatensystem bewegt sich mit ihnen mit. Diese Methode ist besonders für verdünnte Zweiphasenströmungen geeignet, bei denen der Volumenanteil der dispersen Phase gering ist und sphärische Tropfen vorliegen. In unmittelbarer Nähe von Zerstäubungsdüsen treten größere Flüssigkeitsfragmente auf, die stark von der Kugelform abweichen. Außerdem kann ein intakter Flüssigkeitskern existieren. In diesem Bereich ist das Euler-Lagrange-Verfahren nicht mehr anwendbar, da die Nichtsphärizität der Tropfen nur mit erheblichem Mehraufwand berücksichtigt werden kann. Im Düsennahbereich bietet sich somit die Verwendung des Zweifluidmodells an. In diesem Fall sind die für beide Phasen zu lösenden Erhaltungsgleichungen im Aufbau ähnlich. Im Vergleich zum Euler-Lagrange-Verfahren ist zusätzlich die Berechnung des Volumenanteils einer Phase (meist der dispersen) notwendig, wofür die Kontinuitätsgleichung verwendet wird.

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms "Fluidzerstäubung und Sprühvorgänge". Ziel ist es, ein kombiniertes Berechnungsverfahren zu entwickeln, dass die Beschreibung des gesamten Zerstäubungsprozesses ausgehend von der Düseninnenströmung bis zum Bereich des verdünnten Sprühnebels ermöglicht. Dabei wird das Euler-Euler-Verfahren zur Berechnung der Düseninnenströmung und des Düsennahbereichs eingesetzt. Mit ihm werden die Turbulenzeigenschaften, die mittleren Geschwindigkeiten und die Volumenanteile beider Phasen ermittelt. Für das verdünnte Spray in einiger Entfernung vom Düsenaustritt wird das Euler-Lagrange-Verfahren verwendet. Für die Kopplung beider Ansätze ist die Vorhersage der Tropfengrößenverteilung und die Bestimmung der Übergabegrenze notwendig. Für die Berechnung der Tropfengrößenverteilung kommt ein Modell zum Einsatz, das mit Hilfe des Maximum-Entropie-Ansatzes hergeleitet und von Hartmann [51] erstmals vorgestellt wird. Die Ergebnisse der mit dem neuen Modell durchgeführten numerischen Berechnungen werden mit verschiedenen experimentellen Daten verglichen und validiert. Dazu dienen sowohl in der Literatur dokumentierte Versuchsergebnisse als auch durch eigene Messungen bestimmte experimentelle Werte.

2 Strahlzerfall von Flüssigkeiten an Düsen

2.1 Einteilung in Zerfallsregime und Entwicklung der Zerfallskurve

Die ersten Veröffentlichungen zum Strahlzerfall beschäftigen sich mit dem Bereich des Zertropfens. Um 1830 untersucht Savart als einer der ersten diesen Prozess experimentell [100]. Er führt bei konstantem Druck verschiedene Versuche zum Verhalten von Flüssigkeitsstrahlen durch, die aus der Bodenöffnung eines Behälters austreten, und diskutiert die sich ausbildenden Einschnürungen und Verdickungen der Strahlen sowie das anschließende Zertropfen. Außerdem überprüft er, wie sich das Verhalten der Strahlen unter Einwirkung von akustischer Anregung und bei Vibrationen ändert, um die Ursache des Zerfalls herauszufinden. Weiterhin beschreibt er einige Experimente mit horizontalen und aufwärts gerichteten Strahlen und vergleicht die dabei erhaltenen Ergebnisse mit denen der abwärts gerichteten Strahlen.

Erste theoretische Überlegungen für diesen einfachen Fall des Zertropfens folgen dann ca. 50 Jahre später. Rayleigh [88], [89] entwickelt die lineare Stabilitätsanalyse, mit der es möglich ist, die Stabilität zertropfender Strahlen zu berechnen. Ausgehend von einfachen geometrischen Überlegungen leitet Rayleigh [88] Gleichungen für die Beschreibung der Strahlstabilität her. Neben einem Stabilitätskriterium gibt er sowohl für den zwei- als auch dreidimensionalen Fall eine Gleichung zur Berechnung der Störung an, die am schnellsten wächst und somit zum Zerfall des Strahls führt. In einem späteren Artikel [89] beschreibt er Versuche anderer Autoren zu angeregten Strahlen und eigene Experimente, bei denen er vor allem die Wellenlängen bestimmt, mit denen die Strahlen schwingen. Für unterschiedliche Versuchsbedingungen stellt er für diese Wellenlängen, ausgehend von einer Dimensionsanalyse, halbempirische Gleichungen auf. Außerdem erweitert er seine Gleichung aus [88] zur Beschreibung der Strahlen.

Eine genauere, quantitative Beschreibung des Strahlzerfalls stammt von Weber [130]. Ausgehend von den Bilanzgleichungen (Kontinuitäts- und Navier-Stokes-Gleichungen) und Überlegungen zur Oberflächenspannung eines von der Zylinderform abweichenden Strahls leitet er eine exakte und eine Näherungslösung zur Berechnung der Wachstumsrate der Störungen her. Mit Hilfe dieser beiden Beziehungen beschreibt er das Zertropfen (Bestimmung von Zerfallslänge und Zerfallszeit) von zähen und nichtzähen Flüssigkeiten. Durch Berücksichtigung des Einflusses der umgebenden Luft gelingt ihm eine verbesserte Beschreibung des Zertropfens und des Zerwellens. Außerdem gibt Weber den ersten, linearen Teil der Zerfallskurve (intakte Strahllänge als Funktion der Strahlgeschwindigkeit) wieder.

Im Laufe der Zeit wurden von verschiedenen Autoren zahlreiche experimentelle Untersuchungen durchgeführt, um die theoretischen Ansätze für die Zerfallskurve zu bestätigen und auf andere Regime zu erweitern. Eine umfassende Übersicht über die frühen experimentellen und theoretischen Arbeiten zum Strahlzerfall findet man bei Grant & Middleman [50]. Neben der Beschreibung eigener Experimente modifizieren die Autoren außerdem die Webersche Theorie, um eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Werten zu erreichen. Zusätzlich erweitern sie die Zerfallskurve um turbulente Strahlen. Dadurch vergrößert sich der Bereich, in dem schon eine recht genaue Beschreibung des Strahlzerfalls bei den verschiedenen Geschwindigkeiten möglich ist.



Abb. 2 Darstellung der Zerfallsregime nach Bower et al. [15], a) Rayleigh-Zerfall, b) laminar turbulenter Übergang, c) turbulenter Strahl (geringe Flüssigkeitsviskosität, kurze Oberflächenwellen), d) turbulenter Strahl (viskose Flüssigkeit, lange Oberflächenwellen), e) Zerstäubung

Eine Darstellung der Zerfallsformen und die vollständige Zerfallskurve findet man bei Bower et al. [15] (Abb. 2 und Abb. 3). Die Einteilung der Regime erfolgt nach der auftretenden Zerfallslänge, wie das in der englischsprachigen Literatur häufig der Fall ist. Dadurch entstehen vier Regime. Das Rayleigh-Regime umfasst im ersten Teil der Zerfallskurve das Abtropfen (A-B) und den eigentlichen Bereich des Rayleigh-Zerfalls (B-C). Dieser ist durch eine nahezu lineare Abhängigkeit der Zerfallslänge von der Strahlgeschwindigkeit gekennzeichnet. Als nächstes folgt der Bereich des Übergangs von laminaren zu turbulenten Instabilitäten (C-E), auch "first-wind-induced"-Regime genannt. Hier sinkt die Zerfallslänge mit zunehmender Strahlgeschwindigkeit. Es schließt sich das turbulente Zerfallsregime (E-F) an, "second-windinduced"-Regime genannt, in welchem die Zerfallslänge erneut ansteigt. Bei hinreichend hohen Strahlgeschwindigkeiten tritt Zerstäubung auf. Die Zerfallslänge sinkt nun bis auf Null (= Länge der intakten Oberfläche) oder einen niedrigen Wert (= Länge des intakten Kerns), je nachdem, wie die Zerfallslänge definiert wird. Die Grenzen zwischen den Regimen werden in der auch heute allgemein üblichen Darstellung mit dimensionslosen Kennzahlen angegeben.



Abb. 3 Zerfallskurve (Zerfallslänge eines Flüssigkeitsstrahls als Funktion der Strahlgeschwindigkeit) nach Bower et al. [15]

Kennzahl	Symbol	Definitionsgleichung	Bedeutung
Weber-Zahl	We	$We = \frac{\rho_d u_c^2 l_c}{\sigma}$ $l_c = D, d; u_c = u_{rel}, u$	Trägheitskraft Oberflächenspannungskraft
Reynolds-Zahl	Re	$Re = \frac{u_c l_c}{v}$ $l_c = D, d; u_c = u_{rel}, u$	Trägheitskraft Reibungskraft
Ohnesorge- Zahl	Oh	$Oh = \frac{\eta}{\sqrt{\rho_d \sigma D}}$	$Reibungskraft \ \sqrt{Tr\"agheitskraft \cdot Oberfl\"achenspannungskraft}$
Bond-Zahl	Во	$Bo = \frac{D^2 \rho_d g}{\sigma}$	Gewichtskraft Oberflächenspannungskraft
geometrischer Faktor	l_D/D		Länge der Düse Düsendurchmesser

 Tabelle 1
 Definition der für die Zerstäubung relevanten Ähnlichkeitskennzahlen nach Wetzler [131]

Die Zerfallskurve verdeutlicht anschaulich, dass bei verschiedenen Austrittsbedingungen einer Flüssigkeit aus einer Düse unterschiedliche Strömungszustände auftreten. Die entscheidenden Einflussgrößen bei moderaten Betriebsbedingungen sind die Strömungsgeschwindigkeit und der Düsendurchmesser bzw. die mit ihnen gebildeten Ähnlichkeitskennzahlen (siehe Tabelle 1). Sie bestimmen hauptsächlich, welches Regime auftritt. Auch andere Größen haben

einen Einfluss auf das Strömungsverhalten. Dieses sind unter anderem die Eigenschaften der verwendeten Flüssigkeit (Viskosität, Dichte, ...), die Konstruktion der Düse, bei Zweistoffdüsen die Eigenschaften des Zerstäubergases sowie die Eigenschaften des Mediums, in das die Flüssigkeit eingespritzt wird. Letztere haben einen besonders großen Einfluss, wenn die Bedingungen stark von denen eines idealen Gases abweichen.



Abb. 4 Klassifizierung der Zerfallsbereiche nach von Ohnesorge [75], Messwerte als Punkte; I Bereich des Rayleigh-Zerfalls, II Bereich des Zerwellens, III Bereich der Zerstäubung

Ein Kriterium zur Einteilung der Zerfallsregime auf der Grundlage zweier Ähnlichkeitskennzahlen wird durch v. Ohnesorge [75] vorgeschlagen. Er beobachtet das Verhalten von Flüssigkeitsstrahlen für verschiedene Versuchsbedingungen und Einsatzstoffe und definiert im Gegensatz zu [15] nur drei Zerfallsregime: den Rayleigh-Zerfall, das Zerwellen und die Zerstäubung. Er verwendet die mit dem Düsendurchmesser und den Eigenschaften der Flüssigkeit definierte Reynolds-Zahl und eine andere dimensionslose Zahl, die später Ohnesorge-Zahl genannt wird, um diese Bereiche zu charakterisieren. Trägt man *Oh* in einem doppelt logarithmischen Diagramm über *Re* auf, erhält man Geraden, welche die Grenzen zwischen den einzelnen Bereichen markieren (vgl. Abb. 4). Der Übergang zwischen dem Zerwellen und der Zerstäubung wird durch folgende Gleichung beschrieben

$$Oh = 1000 \cdot Re^{-1.25}$$
 (1)

Später führt Miesse [72] weitere Experimente mit Wasser und flüssigem Stickstoff sowie verschiedenen Düsentypen durch. Er gibt eine andere Grenze zwischen dem Bereich des Zerwellens und der Zerstäubung an. Die Bestimmungsgleichung für die geänderte Grenze lautet

$$Oh = 100 \cdot Re^{-0.92}$$
 . (2)

Ein Diagramm mit beiden oben genannten Bestimmungsgleichungen ist bei Lefebvre [68] zu finden (siehe Abb. 5 a)). Durch die kombinierte Auftragung würde es sich besonders für weitere Vergleiche anbieten. Die Überprüfung zeigte jedoch, dass die darin eingezeichneten Linien nicht mit den originalen Gleichungen übereinstimmen. Aus diesem Grund ist eine weitere Verwendung nicht zu empfehlen und dafür Abb. 5 b) zu verwenden.



Abb. 5 Klassifizierung der Zerfallsbereiche nach Lefebvre [68], a) Originaldiagramm, b) korrigierte Darstellung

Die beiden vorher erwähnten Veröffentlichungen enthalten nur Experimente, die bei atmosphärischen Bedingungen, d.h. bei atmosphärischem Druck für die umgebende Luft, in welche die Flüssigkeit injiziert wird, durchgeführt werden. Während der letzten Jahre erscheinen jedoch immer mehr Untersuchungen zum Einspritzen in Druckräume, wobei das umgebende Gas nicht Luft sein muss. Diese Messungen sind besonders relevant für Kraftstoffeinspritzdüsen, die z.B. in Motoren zum Einsatz kommen. Bei diesen Bedingungen sind die vorher festgelegten Grenzen zwischen den Zerfallsbereichen nicht länger gültig. Deshalb schlagen Czerwonatis & Eggers [29] eine neue dimensionslose Ähnlichkeitskennzahl Z^{**} vor

$$Z^{**} = Oh\sqrt{We}\sqrt{\frac{\eta}{\mu}} = \frac{\eta v}{\sigma}\sqrt{\frac{\rho}{\rho_d}}\sqrt{\frac{\eta}{\mu}} \quad . \tag{3}$$

In Abhängigkeit von der Reynolds-Zahl *Re* wird eine neue, zum Ohnesorge-Diagramm ähnliche Darstellung zur Beschreibung der unterschiedlichen Zerfallsregime entwickelt, wobei Z^{**} als Ordinatenvariable verwendet wird (Abb. 6). Genauso wie die vorherigen Diagramme (Abb. 4, Abb. 5) gilt es für Einstoffdüsen, ist jedoch darauf beschränkt, dass die Dichten der Flüssigkeit und der Gasphase in der gleichen Größenordnung liegen.



Abb. 6 Klassifizierung der Zerfallsbereiche nach Czerwonatis & Eggers [29]

Die Grenzen zwischen den Bereichen sind wie folgt angegeben:

- Übergang zwischen dem Bereich des Zertropfens (Rayleigh-Zerfall) und des Zerwellens

$$Z^{**} = 10^{3.9} \cdot Re^{-1.66} \quad , \tag{4}$$

- Übergang zwischen dem Bereich des Zerwellens und der Zerstäubung

$$Z^{**} = 10^5 \cdot Re^{-1.73} \quad . \tag{5}$$

Eine gute Übersicht über die möglichen Regime findet man ebenfalls bei Walzel [129]. Seine Einteilung unterscheidet sich von den bis jetzt beschriebenen, da sie anhand der phänomenologischen Betrachtung des Strahlzerfalls erfolgt. Damit definiert Walzel fünf Strömungszustände, deren Übergänge durch eine etwas andere Kombination von Ähnlichkeitskennzahlen charakterisiert werden. Die Regime sind im Einzelnen das Auslaufen, das Abtropfen, das Zertropfen, das Zerwellen und das Zerstäuben (siehe Abb. 7). Sie werden von ihm wie folgt beschrieben: Auslaufen tritt immer dann auf, wenn der Düsendurchmesser hinreichend groß ist ($\sqrt{Bo} > 5,3$) und die Geschwindigkeit eine gewisse Grenzgeschwindigkeit unterschreitet. In diesem Fall bleibt das Innere der Düse nicht vollständig mit Flüssigkeit gefüllt (Abb. 7 a). Sind die Bedingungen für das Auslaufen nicht mehr erfüllt, setzt bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten allgemein (d.h. sowohl an Düsen als auch an waagerechten Flächen oder Abströmkanten) das Abtropfen der Flüssigkeit ein (Abb. 7 b). Die Größe der Tropfen wird durch das Kräftegleichgewicht aus Kapillar- und Schwerkraft bestimmt. Die entsprechenden Gleichungen sind bei Walzel [129] angegeben.