# Numerische Untersuchung des stoßinduzierten Tropfenzerfalls

Diplomarbeit im Fach Meteorologie

vorgelegt von

Kai Jellinghaus

Institut für Meteorologie und Klimaforschung Universität Karlsruhe (TH) / Forschungszentrum Karlsruhe

Oktober 2005

## Inhaltsverzeichnis

| 1  | Einleitung 1   |   |  |  |  |
|----|--|---|--|--|--|
| 2  | Physikalische Beschreibung der Stoßwechselwirkung zwischen Tropfen         2.1       Definitionen und Begriffe         2.2       Koagulation         2.3       Spontaner Zerfallsprozess         2.4       Stoßinduzierter Zerfallsprozess         2.4.1       Beschreibung der verschiedenen Zerfallsarten         2.4.2       Bruchstückdichtefunktion                                     | 5<br>6<br>17<br>22<br>25<br>29                      |  |  |  |
| 3  | Numerische Untersuchung         3.1       Das FS3D-Modell         3.2       Beschreibung der Simulationen mit FS3D         3.2.1       Vorgehen bei der Auswertung   | <b>31</b><br>31<br>34<br>30                         |  |  |  |
|    | 3.2.1 Vorgenen bei der Auswertung  | 39<br>40  |  |  |  |
|    | und List   | 42<br>44<br>48<br>50                                |  |  |  |
| 4  | Eine an die Simulationsdaten angepasste Parametrisierung des stoßindu-   |   |  |  |  |
|    | zierten Zerfalls4.1Parametrisierung der Koaleszenzeffizienz4.2Parametrisierung der mittleren Bruchstückanzahl4.3Parametrisierung der mittleren Bruchstückverteilung4.3.1Parametrisierung im Bereich der kleinsten Fragmente (Bereich a)4.3.2Parametrisierung im Zwischenbereich (Bereich b)4.3.3Parametrisierung im Bereich c4.3.4Parametrisierung im Bereich d4.3.5Gesamte Parametrisierung | <b>57</b><br>59<br>61<br>65<br>67<br>69<br>72<br>74 |  |  |  |
| 5  | Einfluss der Exzentrizität auf das Kollisionsresultat - ein Beispiel   | 81  |  |  |  |
| 6  | Zusammenfassung und Ausblick   | 89  |  |  |  |
| Ar | Anhang   |   |  |  |  |

| Α                    | Para | Parametrisierungen nach Low und List 9 |     |  |  |  |
|----------------------|------|--|-----|--|--|--|
|                      | A.1  | Filament-Breakup bei Low und List      | 95  |  |  |  |
|                      | A.2  | Sheet-Breakup bei Low und List         | 98  |  |  |  |
|                      | A.3  | Disk-Breakup bei Low und List          | 100 |  |  |  |
|                      | A.4  | Gesamter Breakup                       | 102 |  |  |  |
| Literaturverzeichnis |      |  |     |  |  |  |

## 1 Einleitung

Das Verständnis der Mikrophysik des Regens ist für viele Bereiche der Umweltwissenschaften von großer Bedeutung. So können neben Verbesserungen der Niederschlagsvorhersagen durch eine genauere Kenntnis der Struktur der Regentropfengrößenverteilungen auch Fortschritte auf dem Gebiet der Regenradarmessungen, Wolkenchemie und Erosionsforschung gemacht werden.

Welche Regentropfengrößenverteilung sich im jeweiligen Fall ausbildet, wird durch die Wechselwirkungen und Umwandlungsmechanismen zwischen den drei Phasen von  $H_2O$  in Form von Wasserdampf, Tropfen und Eispartikeln und die Umwandlungsmechanismen innerhalb der festen (Eispartikel) und flüssigen Phase (Tropfen) bestimmt.

Betrachtet man das Größenwachstum von Tropfen, so beginnt es mit dem Kondensationswachstum, das Folge der Wasserübersättigung in ihrer Umgebung ist. Bei hinreichend großen Tropfen kommt es dann jedoch vermehrt zu Kollisionen der Tropfen untereinander, in deren Folge die beteiligten Tropfen zusammenfließen (Koagulation). Das reine Kondensationswachstum verliert somit mit zunehmender Größe der Tropfen an Bedeutung und wird durch das Koagulationswachstum abgelöst. Werden Regentropfen sehr groß (Durchmesser ca. 5 mm), werden zwei Prozesse bedeutsam, die dem weiteren Wachstum entgegenwirken und die Maximalgröße der Tropfen nach oben begrenzen: Dies ist zum einen der hydrodynamische Zerfallsprozess, zum anderen der stoßinduzierte Zerfall. Der hydrodynamische Zerfall beruht auf einer Instabilität der fallenden Tropfen im Strömungsfeld aufgrund der Deformationen, die sich durch die mit ansteigender Größe zunehmenden Reibungs- und Druckkräfte ergeben. Diese Deformationen (es bilden sich regelrechte "Fallschirme") führen dazu, dass schließlich die Oberflächenspannung überwunden wird und der Tropfen zerfällt. Der zweite Prozess, der stoßinduzierte Zerfall, besteht darin, dass als Ergebnis eines Stoßprozesses von zwei Tropfen nicht ein einzelner - größerer -Tropfen entsteht, sondern entweder zwei oder mehrere kleine Tröpfchen. Auch durch das Schmelzen von Eispartikeln oder das Aufschmelzen von Hagelkörnern können Regentropfen entstehen, die ihrerseits in die Regenregion einer Wolke transportiert werden können und somit den dort stattfindenden Umwandlungsprozessen unterliegen.

Die vorliegende Arbeit wird sich auf die Untersuchung eines Prozesses innerhalb des komplexen an der Niederschlagsbildung beteiligten Prozessgefüges beschränken: den stoßinduzierten Tropfenzerfall.

Er wurde für relativ große Tropfen experimentell von McTaggart-Cowan und List (1975) im folgenden als MTL75 abgekürzt - und Low und List (1982a) - im folgenden LL82a - untersucht. Dabei wurden jedoch nur Stöße von insgesamt zehn Tropfenpaaren betrachtet, bei denen der Radius des größeren Tropfens zwischen 1.8 und 4.6 mm variierte und der des kleineren zwischen 0.395 und 1.8 mm. Ein Einfluss der Stoßexzentrizität wurde nicht berücksichtigt. Auf Basis dieser experimentellen Daten wurde erstmals eine Parametrisierung für die Anzahl und Größenverteilung der beim stoßinduzierten Zerfall entstehenden Bruchstücke entwickelt (Low und List, 1982b - im folgenden LL82b).

In den folgenden Jahren wurden - vor allem für kleine Regentropfen - weitere Experimente unternommen (Ochs et al., 1986; Czys und Ochs, 1988). Auch diese Untersuchungen stützten sich jedoch nur auf vier verschiedene Tropfenpaare (Radius des größeren Tropfens zwischen 275 und 425  $\mu$ m, des kleineren zwischen 190 und 300  $\mu$ m). Der Einfluss der Exzentrizität wurde diesmal mitberücksichtigt. Anhand dieser Daten entwickelten Beard und Ochs (1995) eine Parametrisierung für die Koaleszenzeffizienz und die Anzahl der Bruchstücke.

Mit diesen Experimenten als Grundlage wurden eine Vielzahl von Untersuchungen zur Theorie der Niederschlagsbildung und numerische Simulationen durchgeführt (z.B. Pruppacher und Klett (1997) und Hu und Srivastava (1995)). Es sollte erwähnt werden, dass dabei meistens die Parametrisierung nach LL82b verwendet wurde und Hu und Srivastava (1995) aus ihren Berechnungen folgern, dass eben diese Parametrisierung den Effekt des stoßinduzierten Tropfenzerfalls überschätzt.

Studien aus den Achtzigern und Neunzigern des 19. Jahrhunderts (Brown, 1986; Tzivion et al., 1989; List und McFarquhar, 1990) beschränken sich auf Einzelphänomene, z.B. der Entwicklung der Regentropfengrößenverteilung unterhalb der Wolkenuntergrenze. Diese Studien lassen einen eindeutigen Einfluss des stoßinduzierten Zerfalls auf die gemessenen Regentropfenspektren (Zawadski und de Agostinho, 1988; Kunz et al., 1998) vermuten.

Auch Erwähnung finden soll hier die Tatsache, dass stoßinduzierter Zerfall nicht nur unterhalb der Wolken, sondern auch innerhalb der Wolken eine Rolle spielt. Reisin et al. (1998) zeigten anhand numerischer Berechnungen, dass im Fall typischer konvektiver Wolkensysteme über Hawaii (sogenannter "warmer Wolken" - da sich innerhalb der Wolken keine Eispartikel finden lassen) stoßinduzierter Zerfall großer Tropfen die Niederschlagsbildung entscheidend beeinflusst. Experimentelle Ergebnisse für tropische Wolken (Kobayashi und Adachi, 2001) stützen diese Hypothese.

Darüber hinaus wird vermutet, dass auch in Wolken, in denen alle Wasserphasen vorkommen, stoßinduzierter Zerfall die Niederschlagsbildung beeinflusst (Cotton und Anthes, 1989). Das liegt daran, dass in unterkühlten Mischphasenwolken vor allem im Zentrum des Aufwindbereiches Koagulation ein wichtiger Prozess bei der Bildung besonders großer Tropfen ist, und diese wiederum durch den stoßinduzierten Zerfall reguliert wird. Auch Seifert et al. (2005) haben dazu in jüngster Zeit eine Sensitivitätsstudie durchgeführt, die ergab, dass auch während der Entwicklung konvektiver Mischwolken mittlerer Breiten der Effekt durch stoßinduzierten Zerfall einen starken Einfluss auf die Entstehung von Regen und dessen Tropfengrößenverteilung hat. Seifert et al. zeigten zudem anhand umfangreicher Distrometer-Messungen in Karlsruhe, dass man, wenn man die bisherigen Parametrisierungen des stoßinduzierten Zerfalls verwendet, Regentropfenspektren erhält, die nicht mit den Messungen in Einklang zu bringen sind - die Parametrisierungen scheinen den Zerfall großer Tropfen durch stoßinduzierten Zerfall zu überschätzen.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass der stoßinduzierte Zerfall die Niederschlagsbildung maßgeblich beeinflusst, die Datengrundlage bisheriger numerischer Berechnungen zu diesem Thema aber aufgrund der geringen Anzahl an experimentell untersuchter Tropfenkombinationen größtenteils rudimentär ist.

Gleichzeitig wurden jedoch im Bereich technischer Anwendungen neue theoretische und experimentelle Methoden entwickelt, die die Beschreibung und Untersuchung von Tropfenzweierstößen inklusive des dabei auftretenden Zerfalls ermöglichen.

So auch am Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt der Universität Stuttgart, wo seit mehr als 15 Jahren die Kollision von Tropfenströmen detailliert experimentell untersucht wird. Dort wurde zudem ein Programmpacket (FS3D) entwickelt, dass die direkte numerische Simulation von freien Oberflächen in Zweiphasenströmungen erlaubt. Schelkle et al. (1999) zeigen, dass sich mit diesem Packet Tropfenkollisionen erfolgreich simulieren lassen. Dabei wurden Stöße mit verschiedenen Exzentrizitäten und verschieden großen Tropfen berechnet. Diese Berechnungen zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentell gewonnenen Daten.

In der vorliegenden Arbeit wird FS3D verwendet, um erstmals einen Vergleich von aus direkten numerischen Simulationen gewonnenen Daten mit den Parametrisierungen des

stoßinduzierten Tropfenzerfalls nach LL82b durchzuführen und Unterschiede zwischen den Ergebnissen herauszustellen. Im Gegensatz zu den Experimenten von LL82a und MTL75 erlauben die Berechnungen zudem die Untersuchung des Einflusses der Exzentrizität auf den Zerfallsprozess. Die numerischen Berechnungen wurden insgesamt für 18 Tropfenpaare (die zehn Tropfenpaare von LL82a und MTL75, sowie acht weitere) durchgeführt. Dabei wurden je Tropfenpaar Berechnungen zu elf Exzentrizitätswerten vorgenommen. Die einzelnen Berechnungen werden mit Tropfen in Sphäroidnäherung (Halbachsenverhältnis nach Beard und Chuang, 1987) gestartet, die mit einer nach Beard (1976) berechneten Geschwindigkeit im Schwerefeld der Erde fallen. Auf den numerischen Ergebnissen aufbauend wird eine einfache Parametrisierung des stoßinduzierten Zerfalls entwickelt. Darüber hinaus wird auf die grundsätzlichen Unterschiede zwischen numerischen Simulationen und Experimenten zur Untersuchung dieses Prozesses eingegangen und der Bezug zu in realen Wolkensystemen stattfindendem stoßinduziertem Tropfenzerfall kritisch beleuchtet.

## 2 Physikalische Beschreibung der Stoßwechselwirkung zwischen Tropfen

### 2.1 Definitionen und Begriffe

Zunächst wird genauer auf einige wichtige Begriffe und Definitionen, die im Zusammenhang mit der Stoßwechselwirkung zweier Tropfen wichtig sind, eingegangen. Betrachtet man den Kollisionsvorgang näher, so lässt sich die in Abb.2.1 schematisch dargestellte konzeptionelle Vorstellung gewinnen. Demnach müssen vor einem möglichen Stoß die sich einander annähernden Tropfen verschiedene abstoßende Effekte überwinden. Dabei muss zunächst einmal das zwischen den Tropfen befindliche Luftpolster verdrängt werden, wodurch es sich also bei der Stoßwechselwirkung zweier Tropfen nicht ausschließlich um ein gewöhnliches Zweikörperproblem handelt, da der Luftfilm zwischen ihnen als dritter Körper agiert. Darüber hinaus muss die von der Orientierung der Oberflächenmoleküle herrührende elektrostatische Abstoßung überwunden werden. Es gibt daher zwei Möglichkeiten (siehe Abb.2.1): Ist die Kollisionsenergie zu gering, um die abstoßenden Effekte zu überwinden, so haben die Oberflächen keinen Kontakt, und die Tropfen prallen lediglich voneinander ab ("Rebound"). Bei ausreichender Kollisionsenergie hingegen kommen die Tropfen in Kontakt, und sie können zu einem Tropfen zusammenfließen ("Koaleszenz"). Welches der beiden Resultate sich bei einer Kollision einstellt, ist abhängig von der Oberflächenenergie (und damit Größe) der Tropfen und der verfügbaren Kollisionsenergie.

Bei geglückter Koaleszenz wird das kollidierte Tropfenpaar nur noch von einer einzigen Luft-Wasser-Grenzfläche umschlossen. Der Prozess aus Kollision und Koaleszenz wird als Koagulation (oder auch Kollektion) bezeichnet. Oft ist die Koaleszenz nur von kurzer Dauer (einige Mikrosekunden), in diesem Fall spricht man von temporärer Koaleszenz. Sie tritt auf, wenn das koaleszierte System die überschüssige Kollisionsenergie - also die Verformungsenergie - nicht schnell genug über Oszillation und Deformation dissipieren kann und die Oberflächenspannung nicht ausreicht, um den Tropfen zusammenzuhalten (siehe Abbildung 2.2). In der Folge kommt es zu einem durch die Kollision ausgelösten



permanente Koaleszenz stoßinduzierter Zerfall (Breakup)

Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der möglichen Stoßwechselwirkung zweier Tropfen. Ob es zu permanenter Koaleszenz, zu temporärer Koaleszenz mit anschließendem Zerfall oder zum Abprallen kommt, hängt im wesentlichen von der Deformationsenergie, der Stoßgeometrie und den Tropfenradien (Oberflächenenergie) ab. (nach Mayer,2000)

Zerfallsereignis, dem sogenannten stoßinduzierten Breakup-Prozess, bei dem das System im allgemeinen in eine Vielzahl von Fragmenten zerbricht.

Da das Abprallen (Rebound) von Tropfen in der Literatur bisher kaum theoretisch behandelt wurde, wird in dieser Arbeit angenommen, dass jedes Tropfenpaar, dass nicht permanent koalesziert, auseinanderbricht. Dadurch werden alle Abprallereignisse Zerfallsereignissen zugeordnet, bei denen stets zwei Fragmente entstehen, auch wenn die Grundvoraussetzung für einen Zerfall, nämlich die temporäre Koaleszenz, nicht gegeben ist. Der stoßinduzierte Zerfallsprozess (kollisionaler Breakup) soll also als das Ergebnis einer Kollision zweier Tropfen aufgefasst werden, in deren Folge nicht nur ein Tropfen entsteht, sondern mindestens zwei Fragmente registriert werden können.

## 2.2 Koagulation

Bei Koagulation handelt es sich, wie bereits erläutert, um einen kombinierten Prozess, der sich aus der Kollision zweier Tropfen und ihrem anschließenden Zusammenfließen (Koaleszenz) zusammensetzt.

Um die Bedeutung des Koagulationsprozesses zu erkennen, gehen wir von der spektralen



Abbildung 2.2: Eine exzentrische Kollision zweier Tropfen kann entweder zu einem permanent koaleszierenden Tropfensystem führen, das über Schwingungen und Deformation die überschüssige Kollisionsenergie (=Verformungsenergie) dissipieren kann und somit stabil bleibt (a) oder zu einem zunächst temporär koaleszierten Tropfensystem, das aber aufgrund seiner Instabilität bereits nach kurzer Zeit unter der Erzeugung von Satellitentropfen zerfällt (b bis d).

(nach Brenn und Frohn, 1990)

Bilanzgleichung für die Anzahldichteverteilungsfunktion  $f(m, \vec{r}, t)$  aus (Pruppacher und Klett, 1997). Sie lautet

$$\frac{\partial f(m)}{\partial t} = -\nabla \cdot [f(m)\vec{v}] - \frac{\partial}{\partial m} [\dot{m}f(m)] + \sigma_f$$
(2.1)

Darin gibt die Anzahldichteverteilungsfunktion f(m) dm (im folgenden nur Anzahldichtefunktion genannt und aus Lesbarkeitsgründen ohne explizites Aufführen der Orts- und Zeitabhängigkeit) die Anzahl von Tropfen pro Volumeneinheit in einem Massenintervall [m, m + dm] an, und trägt so dem polydispersen Charakter der Tropfen Rechnung. Die linke Seite beschreibt die zeitliche Änderung der Anzahldichtefunktion an einem festen Ort, die durch einen Transport mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  zustande kommt, sowie durch individuelle Massenänderungen (Kondensation, Verdunstung, allg. Phasenübergänge) und Divergenzeffekte, die rechte Seite umfasst Erzeugungs- und Verlustterme durch Stoßwechselwirkungen.

Schließen wir alle Divergenzeffekte aus, so ändert sich die Anzahldichtefunktion nur durch den Erzeugungs- und Verlustterm

$$\frac{\partial f(m)}{\partial t} \bigg|_{Koag} = \sigma_f \qquad . \tag{2.2}$$

Der Term  $\sigma_f$  beinhaltet alle Vorgänge, die mit Zweierstößen zwischen Tropfen einhergehen (Koagulation, Zerfallsprozesse). Von echten Erzeugungstermen wie Keimbildung werde abgesehen. Geht man nun analog zur Gaskinetik von einer kontinuierlichen Beschreibung des Vorgangs über zu einer diskreten, so müssen zuerst die Begriffe der Koagulationswahrscheinlichkeit und der Koagulationshäufigkeit in Hinblick auf Zweierstöße eingeführt werden. Die Wahrscheinlichkeit W, dass zwei Tropfen der Masse x und y zu einem neuen Tropfen der Masse m in der Volumeneinheit dV am Ort  $\vec{r}$  pro Zeiteinheit dt koagulieren, ist definiert als

$$W(m; x, y) \begin{cases} \neq 0 & \text{für } x + y = m \\ & & , \\ = 0 & \text{für } x + y \neq m \end{cases}$$
(2.3)

wobei W in x und y symmetrisch und positiv definit ist.

Die Anzahl der Koagulationen pro Volumeneinheit dV und Zeiteinheit dt, die einen Tropfen der Masse m ergeben, ist dann gegeben durch

$$H(m) dm = \left[ \int_0^\infty \int_0^\infty W(m; x, y) f(x) f(y) dx dy \right] dm$$
$$= \left[ \int_0^\infty \int_0^\infty C(x, y) \delta(x + y - m) f(x) f(y) dx dy \right] dm$$
(2.4)

Die Koagulationswahrscheinlichkeit W wurde in dieser Gleichung schon durch eine in xund y symmetrische Koagulationsfunktion C ausgedrückt. Die Dirac'sche  $\delta$ -Funktion

$$\delta(x+y-m) = \begin{cases} \infty & \text{für } m = x+y \\ 0 & \text{für } m \neq x+y \end{cases}$$
(2.5)

gewährleistet, dass nur Beiträge gezählt werden, die der Massenrelation m = x + y entsprechen. Die Anzahldichte der Tropfen der Masse m kann sich durch zwei Mechanismen ändern:

- Erzeugung von Tropfen der Masse m durch Koagulation der Tropfen mit Masse x und y, wobei gilt x, y < m
- Velust von Tropfen der Masse m durch Koagulation der Tropfen mit Masse m und x, wobei sowohl x < m als auch x > m möglich ist.

Die Anzahl der Koagulationen, die sich aus Tropfen der Masse x aus dem Intervall [x, x + dx] und Tropfen der Masse y aus dem Intervall [y, y + dy] pro Zeiteinheit im Volumen dV am Ort  $\vec{r}$  zur Zeit t ergeben, wird durch die Koagulationshäufigkeit  $d^2H(m; x, y)$  beschrieben:

$$d^{2}H(m;x,y) = C(x,y)\,\delta(x+y-m)\,f(x)\,f(y)\,dx\,dy$$
(2.6)

Der Quellterm  $\sigma_{f,Koag}$  in Gleichung 2.2 lässt sich nun unter Verwendung der Koagulationshäufigkeit  $d^2H(m;x,y)$  aufspalten in einen Gewinn- und einen Verlustterm. Der Gewinnterm ist

$$\sigma_{f,G} = \frac{1}{2} \int_{x=0}^{\infty} \int_{y=0}^{\infty} d^2 H(x, y, m)$$
(2.7)

Der Faktor 1/2 tritt auf, weil aus zwei Tropfen ein einziger entsteht. Der Verlustterm ist  $\ell^{\infty}$   $\ell^{\infty}$ 

$$\sigma_{f,V} = -\int_{x=0}^{\infty} \int_{y=0}^{\infty} d^2 H(m, x, y) \qquad , \tag{2.8}$$

wobei m + x = y ist.

Zusammenfassend lässt sich also für den Term  $\sigma_{f,Koag}$  schreiben:

$$\sigma_{f,Koag} = \sigma_{f,G} + \sigma_{f,V} = \frac{1}{2} \int_{x=0}^{\infty} \int_{y=0}^{\infty} C(x,y) f(x) f(y) \delta(x+y-m) dx dy - \int_{x=0}^{\infty} \int_{y=0}^{\infty} C(m,x) f(m) f(x) \delta(m+x-y) dx dy$$
(2.9)

Unter Ausnutzung der Integraleigenschaften der  $\delta$  -Funktion

$$\int_{a}^{b} f(\beta) \,\delta(\alpha - \beta) \,d\beta = f(\alpha)$$

$$\int_{a}^{b} f(\alpha) \,\delta(\alpha - \beta) \,d\alpha = f(\beta)$$
(2.10)

schreibt sich Gleichung (2.2) schließlich zu

$$\frac{\partial f(m)}{\partial t} \bigg|_{Koag} = \sigma_{f,Koag} = \mathcal{C}(m) = \frac{1}{2} \int_0^m C(x,m-x) f(x) f(m-x) dx$$
$$-f(m) \int_0^\infty C(m,x) f(x) dx \qquad . \tag{2.11}$$

Der erste Term auf der rechten Seite der Gleichung beschreibt die Erzeugung, der zweite den entsprechenden Verlust von Tropfen der Masse m. Diese Gleichung wird auch stochastische Koagulationsgleichung oder kinetische Gleichung genannt. Es wird noch erwähnt, dass gilt

$$\int_0^\infty \sigma_{f,Koag} \, dm \neq 0 \text{ , aber } \int_0^\infty m \, \sigma_{f,Koag} \, dm = 0 \tag{2.12}$$

was bedeutet, das sich zwar die Gesamtanzahldichte, nicht aber die Gesamtmassendichte durch Koagulation ändert, wie es auch anschaulich einleuchtend ist.

Die entscheidende Größe für die Beschreibung der Koagulation ist also die Koagulationsfunktion C. Diese muss noch genauer spezifiert werden.

Kollision und Koaleszenz von zwei Tropfen können durch zwei verschiedene Mechanismen zustande kommen:

1.: Tropfen mit Radien  $r \lesssim 10 \,\mu$ m (kleine Wolkentropfen) können als Teilchen angesehen werden, die sich diffusiv (statistisch ungerichtet im Raum) bewegen. Die Koagulations-

funktion lässt sich dann schreiben als (Pruppacher und Klett, 1997)

$$C(r_x, r_y) \equiv C_{dif}(r_x, r_y) = 4\pi \left( r_x + r_y \right) \left[ D(r_x) + D(r_y) \right] , \qquad (2.13)$$

mit den Radien  $r_x$  und  $r_y$  der zwei Tropfen und dem Diffusionskoeffizienten D, der den Effekt der zufälligen Bewegung der Tröpfchen, verursacht durch Stoßwechselwirkungen mit den Luftmolekülen (Brown'sche Bewegung), beschreibt. D ist eine Funktion der Temperatur und der Partikelbeweglichkeit. Je höher die Temperatur und je größer die Beweglichkeit, desto größer ist D. Eine detailliertere Betrachtung findet sich bei Beheng (1993).

2.: Mit zunehmender Größe tritt die diffusive Bewegung der Tropfen zugunsten einer am Erdschwerefeld ausgerichteten Fallbewegung in den Hintergrund. Die Kollision kann dann erfolgen, wenn größere Tropfen kleinere Tropfen mit einer entsprechend geringeren Fallgeschwindigkeit einfangen. Diese durch das Schwerefeld der Erde bedingte Koagulation wird auch Schwerekoagulation genannt. Wie effizient das "Aufsammeln" der kleineren Tropfen ist, hängt sowohl vom Kollisionsquerschnitt, als auch von den sich überlagernden Strömungsfeldern der beiden Tropfen ab. Zum Beispiel können kleine Tropfen mit dem Radius  $r_x$ , die sich zunächst im Kollisionsquerschnitt  $\pi(r_x + r_y)^2$  befinden, aufgrund ihrer geringen Masse und der Struktur der Strömungsfelder um den großen Tropfen mit Radius  $r_y$  herumgeführt werden, und es kommt nicht zur Kollision.

Erst wenn der Stoßparameter  $\epsilon$ , bzw. der Abstand a der Bahnen der Tropfenmitten im Unendlichen, die über

$$\epsilon = \frac{a}{r_x + r_y} \tag{2.14}$$

zusammenhängen, einen gewissen kritischen Wert unterschreitet, findet eine Kollision statt (siehe Abb.2.3). Wird gerade der kritische Wert erreicht, spricht man von einer streifenden Kollision.

Ein zum Herumführen entgegengesetzter Effekt tritt durch die Ausbildung von Leewirbeln am großen Tropfen auf. Durch sie kann es dazu kommen, dass kleinere Tropfen rückseitig eingefangen werden, obwohl sie sich anfänglich nicht im Kollisionsquerschnitt befanden. Für die theoretische Betrachtung der Schwerekoagulation werden zunächst folgende Annahmen getroffen werden:

- laminare Strömungsverhältnisse,
- die Umgebung befindet sich in Ruhe,
- die Trajektorien der Tropfen verlaufen geradlinig und werden nicht durch die



Abbildung 2.3: Schematische Darstellung einer streifenden Kollision unter der Berücksichtigung der die Tropfen umgebenden Strömungsfelder. Tropfen mit dem Radius  $r_x$ , deren Abstand der Bahnen der Partikelmitten unterhalb von  $a_{max}$  bzw. dem zugehörigen Stoßparameter  $\epsilon_{max}$  liegen, werden von dem Kollektortropfen mit Radius  $r_y$  aufgesammelt (nach Wallace und Hobbs, 1977).

(Um-)Strömungsfelder beeinflusst,

- die Tropfen fallen mit unbeschleunigter Endfallgeschwindigkeit,
- der größere Tropfen (Fängertropfen, Kollektor) mit Radius  $r_y$  sammelt alle kleinen Tropfen mit Radius  $r_x$  auf, die in seinem Fallweg liegen (= ideale Aufsammeleffektivität),
- elektrische Effekte (Coulomb-Effekte, äußeres elektrisches Feld) seien vernachläsigt.

Somit sammelt der Fängertropfen alle Tropfen, die sich in einem Kreiszylinder mit dem Volumen  $dV = \pi (r_x + r_y)^2 d\ell$  befinden, auf. Die Länge  $d\ell$  ist proportional der Relativgeschwindigkeit:  $d\ell(r_x, r_y) = |v_T(x) - v_T(y)| dt$ .

Wenn die Anzahldichte der kleinen Tropfen im Kreiszylindervolumen f(x) dx beträgt , folgt für die Koagulationshäufigkeit pro Zeiteinheit eines einzelnen Fängertropfens der Masse y

$$dH(x,y) = \pi (r_x + r_y)^2 |v_T(x) - v_T(y)| f(x) dx \qquad (2.15)$$

Da die Anzahldichte der Fängertropfen f(y) dy ist, beträgt die gesamte Koagulationshäufigkeit

$$d^{2}H(m;x,y) = \pi(r_{x}+r_{y})^{2} |v_{T}(x)-v_{T}(y)| \ \delta(x+y-m) f(x) f(y) \, dx \, dy \qquad (2.16)$$

Der Vergleich mit Gleichung (2.6) liefert schließlich die ideale Koagulationsfunktion

$$C_{ideal}(x,y) = \pi (r_x + r_y)^2 |v_T(x) - v_T(y)| \qquad (2.17)$$

Da unter atmosphärischen Bedingungen allerdings keine geradlinig verlaufenden Trajektorien vorkommen, muss die obige Koagulationsfunktion aufgrund der sich überlagernden Strömungsfelder entsprechend korrigiert werden. Hierzu wird Gleichung (2.17) mit der Kollektionseffizienz E multipliziert, die als das Verhältnis von "wahrer" zu "idealer" Koagulationsfunktion definiert ist.

$$C(x,y) = \pi (r_x + r_y)^2 |v_T(x) - v_T(y)| E \qquad .$$
(2.18)

Über die Einführung der Kollektionseffizienz E sind alle Effekte enthalten, die in Abweichung zur obigen Idealvorstellung in der Realität auftreten.

Die Kollektionseffizienz kann man noch in Kollisionswirkung  $E_{coll}$  (Kollisionseffizienz) und Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}$  zerlegen, da sich der Prozess der Kollektion aus Kollision und Koaleszenz zusammensetzt:

$$E = E_{coll} \times E_{coal} \tag{2.19}$$

Die Kollisionseffizienz  $E_{coll}$  trägt dabei der Tatsache Rechnung, dass kleine Tropfen um den Kollektortropfen herumgeführt werden können und im Lee eingefangen werden können. Sie wird theoretisch bestimmt, indem die vollständige Navier-Stokes-Gleichung für zwei sich nähernde Sphären numerisch integriert wird. Derartige Berechnungen (siehe Abb.2.4) wurden zum Beispiel von Davis und Sartor (1967), Klett und Davis (1973) sowie Lin und Lee (1975) durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass  $E_{coll}$  umso kleiner ist, je kleiner die aufzusammelnden Tropfen sind, was verständlich ist, da gerade diese Tropfen aufgrund ihrer geringen Massenträgheit um den Kollektortropfen herumgeführt werden können. Relevante Werte für  $E_{coll}$  treten erst dann auf, wenn der Radius des Kollektortropfens etwa  $30 \,\mu$ m überschreitet und die kleinen Tropfen einen Radius oberhalb von etwa 8  $\mu$ m aufweisen.

Die Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}$  (oder auch Koaleszenzwirksamkeit) berücksichtigt die Tatsache, dass - wie zuvor bereits erwähnt - nicht jede Kollision zu einer permanenten Ko-



Abbildung 2.4: Berechnete Werte für die Kollisionseffizienz in Abhängigkeit des eingefangenen Tropfens mit Radius  $r_x$  und verschiedener Kollektortropfen mit Radius  $r_y$  in  $\mu m$ . Die gestrichelten Linien deuten Bereiche unzureichender Genauigkeit an.  $E_{coll}$  ist umso kleiner, je kleiner die aufzusammelnden Tropfen und der Kollektortropfen sind. Relevante Werte für  $E_{coll}$  treten erst dann auf, wenn der Radius des Fängertropfens einen Wert von  $30\mu m$  überschreitet (nach Klett und Davis, 1973).

aleszenz führt, was daran liegt, dass es auch zum Abprallen oder lediglich zur temporären Koaleszenz mit anschließendem Zerfall kommen kann. Da in der Literatur bislang keine Effizienzen für den Abpralleffekt zweier kollidierender Tropfen angegeben werden, wird angenommen, dass jedes kollidierende Tropfenpaar, das nicht koalesziert, in einem Zerfallsereignis endet. Mit dieser Annahme lässt sich nun auch die stoßinduzierte Zerfallseffizienz (Breakup-Effizienz)  $E_{bkp}$  definieren als

$$E_{bkp} = 1 - E_{coal} \qquad (2.20)$$

Die Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}$  hängt von der Verformungsenergie CKE und der Differenz  $\Delta S_{\sigma}$  zwischen der Oberflächenenergie der ursprünglichen Tropfen und der Oberflächenenergie des koaleszierten Tropfenpaares ab. Die Verformungsenergie kann aus dem Energie- und Impulssatz (für den inelastischen Stoß) gemäß

|                  | vor dem Stoß  | nach dem Stoß  |
|------------------|---|--|
| Energieerhaltung | $E_{kin,x} = \frac{m_x}{2} v_x^2$ $E_{kin,y} = \frac{m_y}{2} v_y^2$ | $E_{kin,nach} = \frac{m_x + m_y}{2} v_m^2 + CKE$   |
| Impulserhaltung  | $ec{p_x} = m_x  ec{v_x}$<br>$ec{p_y} = m_y  ec{v_y}$                | $\vec{p}_m = (m_x + m_y) \vec{v}_m = m_x \vec{v}_x + m_y \vec{v}_y$ $\rightarrow  \vec{v}_m = \frac{m_x \vec{v}_x + m_y \vec{v}_y}{m_x + m_y}$ |

$$zu \qquad CKE = \frac{2\pi}{3} \rho_w \frac{r_x^3 r_y^3}{r_x^3 + r_y^3} \left[ v_T(x) - v_T(y) \right]^2 \tag{2.21}$$

abgeleitet werden. Zahlenwerte für die CKE für verschiedene Tropfenkombinationen liefert Abbildung 2.5.

Die Differenz der Oberflächenenergien  $\Delta S_{\sigma}$  ist

$$\Delta S_{\sigma} = S_T - S_c = 4 \pi \sigma \left( r_x^2 + r_y^2 - r_m^2 \right) \qquad , \tag{2.22}$$

wobei  $S_T$  die Oberflächenenergie der Ausgangstropfen und  $S_c$  die Oberflächenenergie

$$S_c = 4\pi\,\sigma\,r_m^2\tag{2.23}$$

des koaleszierten Systemes bezeichnen. Die Konstante  $\sigma$  ist die Oberflächenspannung von Wasser ( $\sigma \approx 7.3 \times 10^{-1} \text{ Nm}^{-1}$  bei 20 °C),

$$r_m = \left(r_x^3 + r_y^3\right)^{1/3} \tag{2.24}$$

bezeichnet den sphärischen Äquivalentradius des koaleszierten Systems.

Die Gesamtenergie  $E_T$ , die bei einer Tropfenkollision zunächst in andere Energieformen umgesetzt wird, setzt sich aus der überschüssigen Kollisionsenergie und der durch die Verringerung der Oberfläche überschüssigen Oberflächenenergie zusammen:

$$E_T = CKE + \Delta S_\sigma \tag{2.25}$$

Wird diese nicht in Deformationen und Oszillationen umgesetzt, so bricht das temporär koaleszierte System wieder auseinander.



Abbildung 2.5: Überschüssige Kollisionsenergie CKE in  $\mu J$  als Funktion des kleinen Tropfendurchmessers  $D_s$  in cm für verschieden große Fängertropfendurchmesser  $D_L$  in cm. Die Punkte geben die im Laborexperiment von LL82a und MTL75 verwendeten Tropfenpaare an (nach LL82a).

Aus Laborexperimenten bestimmten Low und List (1982a,b) die Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}$  als Funktion von  $E_T$  und  $S_c$  zu

$$E_{coal} = \begin{cases} \alpha \gamma_g \exp\left(-b \sigma \frac{E_T^2}{S_c}\right) & \text{für } E_T \le 5 \,\mu\text{J} \\ \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$
(2.26)

 $E_{coal}$  wird hierbei auch durch den geometrischen Faktor  $\gamma_{g}$ , definiert über

$$\gamma_g = \left[1 + \frac{r_x}{r_y}\right]^{-2} \qquad \text{mit } r_x \le r_y \tag{2.27}$$

und durch Größen in der Exponentialfunktion bestimmt, die nur von der Größe der kollidierenden Tropfen und von Materialkonstanten abhängig sind. Die Konstanten nehmen dabei folgende Werte an:  $\alpha = 0,778$  und  $b = 2,61 \times 10^6 \text{ J}^{-2} \text{ m}^2$ . In Abbildung 2.6 ist die Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}$  in einer Isoliniendarstellung als Funktion von  $D_s$  und  $D_L$  an-



Abbildung 2.6: Isoliniendarstellung der nach Low und List parameterisierten Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}$  als Funktion von  $D_L$  und  $D_S$ , jeweils in cm. Die Punkte geben die im Laborexperiment verwendeten Tropfenpaare an. Im schraffierten Bereich ist  $E_{coal} = 0$ . Auf der Geraden  $D_S = D_L$  hat  $E_{coal}$  den Wert 0,19 (nach Low und List, 1982a).

gegeben. Demnach existiert der Parametrisierung nach Low und List (1982b) ein relativ großer Bereich von Durchmesserkombinationen, für die die Koaleszenzeffizienz 0 ist, maximale Werte werden für Kollisionen sehr kleiner mit sehr großen Tropfen erreicht, und für gleichgroße Tropfen ist  $E_{coal} = 0.19$ . In der Atmosphäre gibt es noch andere Faktoren, die die Koaleszenzeffizienz deutlich beeinflussen können. Die wichtigsten sind elektrostatische Aufladung (Ochs und Czys, 1987, 1988), Schadstoffe und Verunreinigungen (Pruppacher und Klett, 1997) sowie die relative Feuchte (Ochs et al., 1995). Außerdem ergab ein Vergleich mit Ergebnissen von Beard und Ochs (1995), dass der von Low und List angegebene Ausdruck für  $E_{coal}$  für Fängertropfen mit einem Radius unterhalb von  $100 \,\mu$ m keine mit ihren experimentellen Ergebnissen übereinstimmende Werte liefert und somit in diesem Bereich mit Vorsicht zu verwenden ist.

## 2.3 Spontaner Zerfallsprozess

Tropfen können höchstens einen volumenäquivalenten Radius von etwa 4,5 mm haben, sind sie größer, so zerfallen sie immer spontan. Den Nachweis für diesen Zerfall bzw. die Instabilität größerer Tropfen lieferten Fournier d'Albe und Hidayetulla (1955), Blanchard und Spencer (1970) sowie Pruppacher und Pitter (1971) in Laborexperimenten. Der kleinste volumenäquivalente Radius, ab dem instabile Tropfen auftreten können, wurde ebenfalls in Laborexperimenten bestimmt. Er liegt bei 2,0 mm (nach Blanchard (1948,1950,1962), Kombayasi et al.(1964), Cotton und Gokhale(1967)).

Tropfen, deren Radius unter 140  $\mu$ m liegt, sind beim Fallen fast ideal kugelförmig und werden in guter Näherung von einem laminaren Strömungsfeld umgeben. Auf sie wirkt die Stokes'sche Reibungskraft (oder Reibungswiderstand)  $W_R$ 

$$W_R = 6\pi \,\mu \, r \, v_T \tag{2.28}$$

 $\mu$  bezeichnet hier die dynamische Viskosität der Luft und  $v_T$  die Endfallgeschwindigkeit des Tropfens. Bereits ab einem Radius von etwa 500  $\mu$ m beginnen sich dagegen Leewirbel abzulösen (siehe Abb.2.7). Sie induzieren Tropfenoszillationen, deren Amplitude mit dem Tropfenradius stark anwächst. Ab einem kritischen Radius werden Tropfen aufgrund der aerodynamisch induzierten Zirkulation derart instabil, dass die Oberflächenspannungskräfte nicht mehr ausreichen, um sie zusammenzuhalten, was schließlich zum Auseinanderplatzen in viele kleine Fragmente führt. Dieser Prozess wird als spontaner Zerfall (spontaner Breakup) bezeichnet. Um den kritischen Radius abzuschätzen, ab dem spontaner Zerfall auftritt, setzt man die auf den Tropfen wirkende Newton'sche Reibungskraft  $W_p$  (Druckwiderstandskraft) gleich der durch die Oberflächenspannung  $\sigma$  bewirkte Kraft  $F_{\sigma}$ 

$$W_p = \frac{1}{2} \rho_l v_T^2 A c_w = p_i A = F_\sigma \qquad , \qquad (2.29)$$

da diese einander entgegen wirken. Hierbei wurde der Newton'schen Reibungsansatz verwendet,  $\rho_i$  bezeichnet die Luftdichte, A die Querschnittsfläche des Tropfens,  $c_w$  den Widerstandsbeiwert und  $p_i$  den Druck im Tropfen mit

$$p_i = \frac{2\sigma}{r} \qquad . \tag{2.30}$$

Nun lässt sich der kritische Radius berechnen, indem man  $p_i$  in Gleichung (2.29) einsetzt und nach dem Tropfenradius r auflöst. Mit typischen Zahlenwerten ( $c_w = 0.85$  für eine Form zwischen Kugel und Scheibe,  $\sigma = 74.45 \times 10^{-3} N/m$  für Wasser bei  $10^{\circ}C$  und  $v_T = 10m/s$ ) erhält man

$$r \equiv r_{krit} = \frac{4}{c_w} \frac{\sigma}{\rho_l v_T^2} \approx 2.9 \,\mathrm{mm} \qquad (2.31)$$

Der so abgeschätzte kritische Radius liegt im Bereich der experimentell gewonnenen Werte. Das Ergebnis aus Gleichung (2.31) lässt sich zudem über eine dimensionslose Maßzahl,



Abbildung 2.7: (a) Bis zu einem Radius von  $r < 140 \,\mu\text{m}$  werden Tropfen näherungsweise von einem laminaren Strömungsfeld umgeben.  $W_R$  bezeichnet die Stokes'sche Reibungskraft,  $v_T$  die Endfallgeschwindigkeit des Tropfens. (b) Ab einem Tropfenradius von  $r > 500 \,\mu\text{m}$  beginnen sich Leewirbel abzulösen. Dadurch werden auf der Tropfenoberfläche Oszillationen induziert. Statt der Stokes'schen Reibungskraft wirkt nun eine Druckwiderstandskraft  $W_p$ , die sich besser durch den Newton'schen Reibungsansatz beschreiben lässt. (nach Kneubühl, 1990).

die Weberzahl W, ausdrücken. Die hier verwendete Weberzahl (Achtung: später wird eine andere Definition verwendet) setzt den dynamischen Druck und den Tropfeninnendruck  $p_i$  ins Verhältnis

$$W = \frac{2\rho_l v_T^2}{\sigma/r} \qquad (2.32)$$

Setzt man nun für r den aus Gleichung (2.31) erhaltenen kritischen Radius  $r_{krit}$  ein, so erhält man

$$W_{krit} = \frac{8}{c_w} \qquad . \tag{2.33}$$

Der  $c_w$ -Wert ist eine Funktion der Reynoldszahl  $R_e$ , der Tropfengeometrie und einer Reihe anderer Variabler (Oberflächenrauhigkeit etc.). Bei  $R_e \approx 10^3$  liegt der  $c_w$ -Wert zwischen  $c_w \approx 0.4$  (für eine Kugelform) und  $c_w \approx 1.2$  (für eine Scheibenform). Damit liegt  $W_{krit}$ für den spontanen Tropfenzerfall im Bereich von

$$6.7 \le W_{krit} \le 20$$
 . (2.34)

Eine andere Ableitung des kritischen Radius stammt von Chandrasekhar (1961) und Komabayasi et al. (1964). Sie zeigen, daß der spontane Breakup auf eine Rayleigh-Taylor-Instabilität für zwei sich überlagernde Flüssigkeiten im Schwerefeld zurückzuführen ist. Für die sich auf der Tropfenoberfläche ausbreitenden Oberflächenwellen geben sie eine kritische Wellenzahl  $k_{krit}$  von

$$k_{krit} = \left[\frac{\left(\rho_w - \rho_l\right)g}{\sigma}\right]^{1/2} \approx 3.5 \,\mathrm{cm}^{-1} \tag{2.35}$$

an, ab der eine beliebig kleine Störung exponentiell anwächst. Hierin bezeichnen  $\rho_l$  die Luftdichte,  $\rho_w$  die Dichte von Wasser und g die Erdbeschleunigung. Daraus läßt sich nun eine kritische Wellenlänge  $\lambda_{krit}$  und ein kritischer Radius  $r_{krit}$  bestimmen, mit

$$r_{krit} = O\left(\frac{\lambda_{krit}}{4}\right) \approx 2.5 \,\mathrm{mm}$$
 (2.36)

Der spontane Zerfall eines Tropfens ist in Abbildung 2.8 schematisch dargestellt und der photographischen Erfassung der letzten Phase des Zerfalls gegenüber gestellt. Zunächst wird der Tropfen durch die angreifenden Kräfte immer stärker deformiert, so dass die Tropfenbasis von einer konvexen in eine konkave From übergeht. Im weiteren Verlauf verformt sich der Tropfen infolge der Druckdifferenz an den Staupunkten zu einer Art Torus mit einer darüber gespannten sehr dünnen Wasserhaut. Diese wird immer weiter gedehnt. Schließlich sind die Kräfte durch die Oberflächenspannung nicht mehr in der Lage den deformierenden Kräften das Gleichgewicht zu halten, so dass die Wasserhaut immer dünner wird und letztlich zerreißt. Dabei zerfällt sie in viele kleine Bruchstücke. Der übriggebliebene Torus zerbricht wenig später auch in einige wenige große Bruchstücke.

Berücksichtigt man in der Bilanzgleichung für die Anzahldichtefunktion der Tropfenverteilung nur den Mechanismus des spontanen Breakups, so erhält man folgende Form

$$\frac{\partial f(m)}{\partial t}\bigg|_{sBp} = \sigma_{f,sBp} = \int_0^\infty f(x) Q(m,x) \Psi(x) dx - f(m) \Psi(m) \qquad (2.37)$$

Der erste Term auf der rechten Seite gibt den Gewinn an Tropfenfragmenten der Masse man, die aus einem spontanen Breakup des Tropfens mit der Masse x > m entstanden sind. Die Funktion  $\Psi(x)$  bezeichnet die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit für einen spontanen Breakup eines Tropfens der Masse x. Die Größe Q(m, x) stellt hierbei die Bruchstückverteilungsfunktion dar, die durch das Zerplatzen des Tropfens der Masse x bestimmt ist. Der zweite Term auf der rechten Seite gibt den Verlust von Tropfen der Masse m an, die



Abbildung 2.8: (a) Schematische Darstellung des spontanen Zerfallsprozesses in verschiedenen Phasen (nach Matthews und Mason, 1964). (b) Die letzte Phase des spontanen Zerfalls eines im Labor erzeugten Tropfens mit einem Durchmesser von 10 mm (nach Magarvey und Taylor, 1956).

mit der Wahrscheinlichkeit  $\Psi(m)$  zerplatzen.

Kombayashi et al. (1964) haben die Wahrscheinlichkeit für einen spontanen Breakup als Funktion der Tropfengröße und das dabei erzeugte Zerfallstropfenspektrum untersucht. Aus Labordaten ermittelten sie für  $\Psi(r_m)$  die folgende Exponentialfunktion

$$\Psi(r_m) = k_1 \exp\left(k_2 r_m\right) \qquad (2.38)$$

Die Größen  $k_1 = 2.9 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$  und  $k_2 = 34 \text{ cm}^{-1}$  sind empirisch bestimmte Konstanten.  $\Psi(r_m) dt$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Tropfen mit Radius  $r_m$  in der Zeit dtspontan zerfällt. Srivastava (1971) leitete aus den Daten von Kombayashi et al. (1964) die folgende Bruchstückverteilungsfunktion  $Q(r_m, r_x)$  ab

$$Q(r_m, r_x) = \frac{\alpha b}{r_m} \exp\left(-b \frac{r_x}{r_m}\right) \qquad (2.39)$$

Hierin gibt  $Q(r_m, r_x) dr_x$  die Anzahl der Fragmenttropfen mit Radien im Intervall  $[r_x, r_x + dr_x]$ an, die bei einem spontanen Zerfall des Tropfens mit Radius  $r_m$  entstehen. Die Konstanten b = 7 und  $\alpha = 623$  wurden empirisch bestimmt und gewährleisten eine hinreichend gute Erfüllung der Massenerhaltung.

Da jedoch Tropfen unter atmosphärischen Bedingungen nur selten einen Radius über 2 mm erreichen, gilt es als eher unwahrscheinlich, dass der spontane Breakup-Prozess eine entscheidende Rolle für die Regentropfenverteilung spielt. Diese Vermutung bestärkt Srivastava (1971), indem er zeigt, dass die Regentropfenverteilungen, die sich alleine aus einem Gleichgewicht zwischen Koagulation und spontanem Breakup einstellen, zu flach verlaufen und nicht den erwarteten Charakter einer Exponentialfunktion zeigen. Er vermutet, dass dies an der Nichtberücksichtigung von Kondensationsprozessen und kollisionalem Breakup liegen könnte.

Auch Modellrechnungen von Young (1975) zeigen, daß der Einfluß des spontanen Breakup gegenüber dem des kollisionalen Breakup auf die Entwicklung des Tropfenspektrums vernachlässigbar ist.

### 2.4 StoBinduzierter Zerfallsprozess

Will man die Entwicklung einer Tropfenpopulation durch Stoßwechselwirkungen beschreiben, so muss man sich vor allem zwei Fragestellungen zuwenden:

- Welches Resultat liefert eine Kollision? (Es sollen, wie bereits erwähnt, nur Kollisionen betrachtet werden, die entweder in einer permanenten Koaleszenz oder einem stoßinduzierten Zerfall enden.)
- Wie oft kollidieren Tropfen einer gegebenen Größe miteinander also wie groß ist die Kollisionsrate?

Das Resultat einer Kollision lässt sich über die mittlere Anzahl  $\chi(m; x, y)$  von produzierten Tropfen, die pro Kollision und pro Massenintervall [m, m + dm] durch zwei Ausgangstropfen mit Massen aus den Intervallen [x, x + dx] bzw. [y, y + dy] erzeugt werden, folgendermaßen beschreiben

$$\chi(m; x, y) = E_{bkp}(x, y) P(m; x, y) + E_{coal}(x, y) \,\delta(m - x - y) - \delta(m - x) - \delta(m - y)$$
(2.40)

Der erste Term auf der rechten Seite beschreibt die Produktion von Tropfen im Massenintervall [m, m + dm] pro Kollision durch Breakup. Hierin ist P(m; x, y) die Bruchstückdichtefunktion. Für P(m; x, y) gilt dabei aus Gründen der Massenerhaltung

$$P(m; x, y) \begin{cases} \geq 0 & \text{für } m \leq x + y \\ & & \\ = 0 & \text{für } m > x + y \end{cases}$$

$$(2.41)$$

Nicht jede Kollision führt zu einem Breakup-Ereignis, daher muss die Bruchstückdichtefunktion mit einem "Wirkungsgrad", der schon in Gleichung (2.20) eingeführten Breakup-Effizienz  $E_{bkp}$ , definiert als

$$E_{bkp}(x,y) = 1 - E_{coal}(x,y) = \frac{\text{Anzahl der Kollisionen, die zu einem Breakup führen}}{\text{Anzahl aller Kollisionen}}$$
(2.42)

multipliziert werden. Die Bruchstückdichtefunktion wurde in Laborexperimenten von MTL75 und LL82a empirisch bestimmt, LL82b leiteten daraus anschließend eine Parametrisierungen ab. Diese Parametrisierung wird in der vorliegenden Arbeit durch umfangreiche Berechnungen überprüft.

Wird in der spektralen Bilanzgleichung für die Anzahldichteverteilungsfunktion  $f(m, \vec{r}, t)$ (Gl.2.1) neben dem Prozess der Koagulation auch der stoßinduzierte Zerfallsprozess berücksichtigt, so muss der Term  $\sigma_f$  auch die Vorgänge durch den stoßinduzierten Zerfall enthalten. Dies lässt sich wie folgt erreichen:

$$\sigma_{f}(m) = \sigma_{f,Zerfall}(m) + \sigma_{f,Koag}(m)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{x} f(x) f(y) B(x,y) P(m;x,y) dy dx + \sigma_{f,Koag}(m)$$

$$= \frac{1}{2} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{x} f(x) f(y) B(x,y) P(m;x,y) dy dx$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{0}^{m} f(x) f(m-x) K(x,m-x) E_{coal}(x,m-x) dx$$

$$- \int_{0}^{\infty} f(x) f(m) K(x,m) dx \qquad (2.43)$$

Die Größe B(x, y) wird Breakup-Funktion (Breakup Kernel) genannt. Sie ist definiert durch

$$B(x,y) = C(x,y) \left[ 1 - E_{coal}(x,y) \right]$$
(2.44)

(zur Definition von C(x, y) siehe Gl.2.18)

Der erste Term in Gleichung (2.43) beschreibt die Erzeugung von Tropfen der Masse m durch Breakup, der zweite die Erzeugung durch Koaleszenz. Der dritte Term entzieht die Ausgangstropfen der Tropfenpopulation und gewährleistet so die Massenerhaltung. Will man den Verlust von Tropfen durch Breakup- und den Tropfenverlust durch Koaleszenzprozesse voneinander trennen, so muss man im dritten Term der Gleichung (2.43) die Normierungsbedingung (=Massenerhaltung)

$$\frac{1}{m+y} \int_{0}^{m+y} x P(x;m,y) \, dx = 1 \qquad , \tag{2.45}$$

für eine Kollision von Tropfen der Masse m und der Masse y, die Bruchstücke der Masse x liefert, einfügen und um den Ausdruck  $[1 - E_{coal}(m, y) + E_{coal}(m, y)]$  erweitern. Man erhält

$$\int_{0}^{\infty} f(x) f(m) C(x,m) dx = \int_{0}^{\infty} \frac{f(y) f(m) B(m,y)}{m+y} \int_{0}^{m+y} x P(x;m,y) dx dy + \int_{0}^{\infty} f(x) f(m) C(x,m) E_{coal}(x,m) dx$$
 (2.46)

Zusammenfassend lässt sich damit die spektrale Bilanzgleichung für die Anzahldichteverteilungsfunktion (Gl.2.1) unter Berücksichtigung der Gleichung (2.46) in Gleichung (2.43) schreiben als

$$\frac{\partial f(m)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\vec{v} f(m)\right] + \frac{\partial}{\partial m} \left[\dot{m} f(m)\right] = \mathcal{C}(m) + \mathcal{B}(m) \qquad , \qquad (2.47)$$

wobei  $\mathcal{C}(m)$  den Koaleszenzanteil durch

$$\mathcal{C}(m) = \frac{1}{2} \int_0^m f(x) f(m-x) K(x,m-x) E_{coal}(x,m-x) dx$$
  
-  $\int_0^\infty f(x) f(m) K(x,m) E_{coal}(x,m) dx$  (2.48)

und  $\mathcal{B}(m)$  den entsprechenden Breakupanteil mit

$$\mathcal{B}(m) = \frac{1}{2} \int_0^\infty \int_0^x f(x) f(y) B(x, y) P(m; x, y) \, dy \, dx$$
  
- 
$$\int_0^\infty \frac{f(y) f(m) B(m, y)}{m + y} \int_0^{m + y} x P(x; m, y) \, dx \, dy \qquad (2.49)$$

beschreibt. Diese Gleichung wird auch als stochastische Breakup-Gleichung bezeichnet. Die Gewinnterme der Gleichung (2.48) und (2.49) geben die Produktion von Tropfen der Masse m durch die Kollision zweier Ausgangstropfen der Masse x und y wieder. Die entsprechenden Verlustterme hingegen beschreiben den Abbau von Tropfen der Masse m durch Beteiligung an einem Kollisionsprozess mit einem Tropfen der Masse x bzw. der Masse y.

#### 2.4.1 Beschreibung der verschiedenen Zerfallsarten

Um das Kollisionsverhaltens von Tropfen zu guantifizieren, führten MTL75 und LL82a umfangreiche Laborexperimente durch. Trotz des großen experimentellen Aufwandes mit einer großen Anzahl an Einzelexperimenten sind jedoch insgesamt nur (zahlreiche) Stöße mit zehn unterschiedlichen Tropfenpaarkonstellationen (siehe Abb.3.2) untersucht worden. Die verwendeten Druchmesserbereiche liegen bei MTL75 zwischen 0,039 und 0,44 cm, bei LL82a zwischen 0,1 und 0,46 cm. In ihren Experimenten verwenden sie den in Abb.2.9 schematisch dargestellten Aufbau. Der kleine Tropfen wird im elektrischen Feld auf seine zuvor berechnete Endfallgeschwindigkeit beschleunigt, wohingegen der große Tropfen auf "normalem Wege" im Schwerefeld der Erde seine Endfallgeschwindigkeit erreicht. Laut LL82a weisen die so beschleunigten Tropfen Schwingungen mit einer Frequenz von etwa 50 Hz auf. Einmal auf Endfallgeschwindigkeit gebracht, soll die Kollision durch seitliches Einblasen des kleinen Tropfens in den Fallweg des großen Tropfens erreicht werden. Durch diese von außen aufgeprägte horizontale Geschwindigkeitskomponente wird der kleine Tropfen etwa 9° aus der Lotrechten abgelenkt. Insgesamt führen allerdings nur etwa zehn Prozent dieser Kollisionsversuche auch zu einer Kollision. Gleichzeitig werden jedoch pro Tropfenpaar mindestens 100 Kollisionen erreicht - sie bilden die Grundlage für die statistische Untersuchung des stoßinduzierten Tropfenzerfalls durch MTL75 und LL82ab. Da sich die Exzentrizitäten der Stöße nicht steuern oder messen lassen, gehen MTL75 und LL82ab davon aus, dass die Stöße ähnlich wie in der Realität über die Tropfenoberfläche verteilt sind. Kommen die beiden Tropfen in den für die Kollision kritischen Bereich, so



Abbildung 2.9: Schemazeichnung des von MTL75 und LL82a verwendeten Laboraufbaus zur experimentellen Untersuchung von Tropfenkollisionen.

wird eine Serienbildaufnahme gestartet. Anschließend werden die Bilder auf Kollisionstyp, Bruchstückanzahl und Bruchstückgrößen hin ausgewertet. Die Größe der kleinsten detektierbaren Bruchstücke ist durch die Auflösung der Kamera vorgegeben. MTL75 konnten nur Bruchstücke mit Durchmessern größer als 0.5 mm auflösen, LL82a erreichten eine Auflösung von 0.1 mm.

Aus diesen empirischen Daten leiten sie analytische Interpolationsfunktionen für die Bruchstückdichtefunktion P(m;x,y) und die Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}$  in Abhängigkeit der Durchmesser der beteiligten Tropfen ab. Diese Interpolationsfunktionen erlauben es, die Koaleszenzeffizienz und die Bruchstückdichtefunktion auch für Tropfenpaarkollisionen zwischen den gemessenen Größenkombinationen auf der durch die Tropfendurchmesser aufgespannten Parameterebene abzuschätzen.

In nahezu allen Modellen der letzten Jahre, die Breakup berücksichtigen, sind die Lowund List-Funktionen implementiert. Leider enthalten diese Funktionen einige Unsicherhei-



Abbildung 2.10: Die unterschiedlichen Bedingungen (Stoßparameter, Deformationsenergie, Tropfengröße etc.), unter denen die Stoßwechselwirkungen ablaufen, schlagen sich in charakteristischen geometrischen Formen des temporär koaleszierten Systems nieder. Die Hauptformen (nach LL82a und MTL75) zu Beginn des Auseinanderbrechens sind vergrößert im oberen Teil der Abbildung dargestellt. Im unteren Teil sind nicht maßstabsgetreu die anschließend entstandenen Bruchstücke dargestellt. Näheres siehe Abschnitte 2.4.1.1 bis 2.4.1.4.

ten, die vor allem durch die Ableitung der Interpolationsfunktionen aus nur zehn unterschiedlichen Tropfenpaarkonstellationen zustande kommen. Desweiteren unterliegen empirisch gewonnene Formeln natürlich stets Mess- und Interpolationsfehlern. Die Analyse der Messdaten von Low und List ergibt aber deutlich, dass sich sämtliche Kollisionen mit anschließendem Breakup danach klassifizieren lassen, welche typische geometrische Form das temporär koaleszierte Tropfensystem aufweist, bevor es in eine unterschiedlich große Anzahl von Fragmenten zerbricht (siehe Abbildung 2.10). Dabei kann man unterscheiden zwischen dem sogenannten "Sheet-", dem "Filament-", dem "Disk-" und dem "Bag"-Breakup. Diese verschiedenen Arten sollen in den nächsten Abschnitten kurz beschrieben werden.

#### 2.4.1.1 Filament-Breakup

Fängt der größere Tropfen den kleineren streifend ein (stark exzentrische Kollision, z.B. Stoßparameter  $\epsilon = 0.9$  - Definition des Stoßparameters siehe Gl.2.14), so tritt ein fadenbzw. faserartiger Zerfallsprozess auf. Bei den Experimenten trat diese Zerfallsart am häufigsten auf. Die Ausgangstropfen lassen sich nach dem Zerfall mit kaum veränderten Massen noch identifizieren. Daneben wurden noch bis zu 8 Satellitentropfen registriert. Die Zahl der Fragmente steigt dabei mit steigender Deformationsenergie CKE. Liegt die Deformationsenergie unter einem Schwellenwert von etwa 0,9  $\mu$ J, so wurde in den Experimenten für die betreffende Tropfenkombination nur dieser Zerfallsprozess festgestellt.

#### 2.4.1.2 Sheet-Breakup

Sheet-Breakup ist die in den Experimenten am zweithäufigsten aufgetretene Zerfallsart. Sie tritt auf, wenn der kleine Tropfen näher am Zentrum des großen eingefangen wird (z.B. Stoßparameter  $\epsilon = 0.6$ ). Dabei bricht der kleine Tropfen aus dem großen ein blattartiges Fragment heraus, das anschließend je nach Deformationsenergie in 2 bis 15 Satellitentropfen zerbricht. Nach dem Zerfall ist üblicherweise der kleine Tropfen unter den Fragmenten nicht mehr zu identifizieren, wohingegen der große Ausgangstropfen zwar stark deformiert wurde, aber dennoch weiterhin erkennbar ist.

#### 2.4.1.3 Disk-Breakup

Diese Zerfallsart tritt bei nahezu zentrischer Kollision (z.B. Stoßparameter  $\epsilon = 0.1$ ) auf. Der kleine Tropfen beult dabei den großen Tropfen derart aus, dass ein scheibenförmiges Gebilde entsteht. Aufgrund der größeren Widerstandskräfte, die auf diese strömungstechnisch betrachtet ungünstigere Form wirken, formt sich das koaleszierte Tropfensystem weiter zu einem Teller aus, dessen Durchmesser bis auf etwa den dreifachen Ausgangsdurchmesser anwächst. Schon während dieses Dehnungsprozesses beginnen sich fortlaufend Fragmente aus dem System zu lösen, schließlich zerbricht es insgesamt in eine Vielzahl kleiner Fragmente (etwa 20 bis 30 Stück). Ist die Deformationsenergie sehr niedrig, so lösen sich nur sehr wenige Fragmente ab, und die verbleibende Tropfenscheibe zieht sich wieder zu einem großen Tropfen zusammen.

#### 2.4.1.4 Bag-Breakup

Diese Zerfallsart wurde nur sehr selten beobachtet. Es handelt sich um eine zentrische Kollision (Stoßparameter  $\epsilon \approx 0$ ), bei der sich nach dem Zusammenstoß ein taschenförmiges Gebilde ausbildet, das anschließend in viele kleine Fragmente und einige große Bruchstücke zerfällt. Diese Zerfallsart ist dem spontanen Zerfall ähnlich.

#### 2.4.2 Bruchstückdichtefunktion

Eine Aussage über das mittlere Resultat einer Kollision eines großen Tropfens mit Durchmesser  $D_L$  mit einem kleinen Tropfen mit Durchmesser  $D_S$  kann die Bruchstückdichtefunktion  $P(D; D_L, D_S)$  liefern (im folgenden wird aus Übersichtlichkeitsgründen abkürzend P(D) verwendet). Im Gegensatz zu den Ausführungen in Abschnitt 2.4 werden hier statt der Massen m, x, y der Tropfen deren zugehörigen Durchmesser  $D, D_L, D_S$  aufgeführt, da sich alle Betrachtungen bei Low und List (1982a,b) nicht auf die Masse, sondern stets auf den Durchmesser beziehen.

Da P(D) ein Wahrscheinlichkeit für das Vorhandensein von Fragment-Tropfen des Durchmessers D nach dem Zerfall angibt, gilt

$$\int_0^\infty P(D) \, dD = \overline{F} \qquad , \tag{2.50}$$

wobei  $\overline{F}$  die mittlere Anzahl an Fragment-Tropfen nach dem Zerfall bezeichnet.

Will man experimentell gewonnene Kollisionsdaten aus C Kollisionen der Bruchstückverteilung nach auswerten, so teilt man die Durchmesserachse in Klassen  $\Delta D_i$  ein (da man nur in diskreten Klassen messen kann). Summiert man in jeder Klasse über alle C Ereignisse, so erhält man die Gesamtzahl an Bruchstücken  $N_i$ , die in die jeweilige Klasse fallen.

Es gilt:

$$\frac{N_i}{C} = \int_{D_i - \frac{\Delta D_i}{2}}^{D_i + \frac{\Delta D_i}{2}} P(D) \, dD \tag{2.51}$$

Über den Mittelwertsatz der Integralrechnung erhält man dann für die mittlere Bruchstückdichte im Intervall [ $D_i \pm \Delta D_i/2$ ]

$$P_i(D_i) = \frac{N_i}{C} \frac{1}{\Delta D_i}$$
(2.52)

Betrachtet man die einzelnen Zerfallsarten getrennt, so gilt für die Bruchstückdichtefunktionen für Filament-, Sheet und Disk-Breakup (Index 'f', 's' und 'd')

$$\int_{0}^{\infty} P_{f}(D) \, dD = N_{f,0} \tag{2.53}$$

$$\int_{0}^{\infty} P_{s}(D) \, dD = N_{s,0} \tag{2.54}$$

2 Physikalische Beschreibung der Stoßwechselwirkung zwischen Tropfen

$$\int_{0}^{\infty} P_d(D) \, dD = N_{d,0} \qquad , \tag{2.55}$$

bzw. diskret formuliert

$$P_{fi}(D_i) = \frac{N_{fi}}{C_f} \frac{1}{\Delta D_i} = \frac{N_{fi\Delta}}{C_f} \quad \text{mit} \quad N_{fi\Delta} = \frac{N_{fi}}{\Delta D_i}$$
(2.56)

$$P_{si}(D_i) = \frac{N_{si}}{C_s} \frac{1}{\Delta D_i} = \frac{N_{si\Delta}}{C_s}$$
(2.57)

$$P_{di}(D_i) = \frac{N_{di}}{C_d} \frac{1}{\Delta D_i} = \frac{N_{di\Delta}}{C_d} \qquad (2.58)$$

Die Gesamtbruchstückdichte durch Breakup (Index 'b') setzt sich additiv aus den Einzelbruchstückdichten zusammen

$$P_b(D) = P_f(D) + P_s(D) + P_d(D)$$
(2.59)

und lässt sich somit diskret schreiben als

$$P_{bi}(D_i) = \frac{N_{bi}}{C_b} \frac{1}{\Delta D_i} = \frac{N_{fi} + N_{si} + N_{di}}{C_b} \frac{1}{\Delta D_i} =$$
$$= \frac{C_f}{C_b} \frac{N_{fi\Delta}}{C_f} + \frac{C_s}{C_b} \frac{N_{si\Delta}}{C_s} + \frac{C_d}{C_b} \frac{N_{di\Delta}}{C_d} \qquad (2.60)$$

Unter Verwendung der Gleichungen (2.56-2.58) und Formulierung einer Funktion  $R_j$ (mit j = f, s, d) für die relative Anzahl von Kollisionen einer bestimmten Art an der Gesamtzahl der Kollisionen  $C_j/C_b$  ergibt sich für Gleichung (2.60)

$$P_{bi}(D_i) = R_f P_{fi}(D_i) + R_s P_{si}(D_i) + R_d P_{di}(D_i)$$
(2.61)

## 3 Numerische Untersuchung

Die Experimente, die LL82ab und MTL75 vorgenommen haben, sind die umfassendsten, die zur Tropfenkollision durchgeführt wurden. Daher wird ihre auf diesen Daten aufbauende Parametrisierung des stoßinduzierten Tropfenzerfalls in den meisten Wolkenmodellen, die den Tropfenzerfall berücksichtigen, verwendet. Allerdings fußt auch diese Parametrisierung nur auf den Kollisionsresultaten zehn verschiedener Tropfenpaare, enthält also vor allem in den Bereichen außerhalb der getroffenen Auswahl noch große Unsicherheiten. Außerdem berücksichtigt diese Parametrisierung nicht die statistische Repräsentation verschiedener Exzentrizitäten, da diese bei den Messungen nicht erfasst - geschweige denn kontrolliert - werden konnten. Als weiterer Schwachpunkt ist zu nennen, dass die Parametrisierung nach LL82b nicht vollständig massenerhaltend ist. Brown (1997) führte diesbezüglich einige Verbesserungsmöglichkeiten an.

Mittlerweile existieren Computermodelle, die in der Lage sind, Tropfenkollisionen direkt numerisch zu simulieren. Mit ihnen lassen sich einfache virtuelle Experimente durchführen, die die realen Abläufe unter kontrollierten Bedingungen mit guter Genauigkeit nachbilden. Dies eröffnet also die Möglichkeit, zunächst einen Vergleich der Ergebnisse der Experimente von Low und List und McTaggart-Cowan und List mit gleichwertigen Simulationen durchzuführen, und anschließend eine Erweiterung im Parameterraum vorzunehmen, um im Idealfall eine mit weniger Unsicherheiten behaftete Parametrisierung zu gewinnen. Dabei kann im Gegensatz zu den oben genannten Experimenten der Stoßparameter im Unendlichen vorgegeben werden. In dieser Arbeit wird somit der Ansatz des Einsatzes virtueller Experimente, dort wo reale Experimente zu aufwendig oder nur schwer zu realisieren wären, verfolgt, um ein besseres Verständnis des stoßinduzierten (Regen-)Tropfenzerfalls zu erreichen.

## 3.1 Das FS3D-Modell

Das Programm FS3D (Free Surface 3D) wurde am Institiut für Thermodynamik der Luftund Raumfahrt (ITLR) an der Universität Stuttgart entwickelt. Es ermöglicht die direkte numerische Simulation (DNS) inkompressibler Zweiphasenströmungen und wurde bereits bei entsprechenden Fragestellungen im Bereich der Automobil- und Flugzeugindustrie, der Landwirtschaft, der Ölförderindustrie und der Medizin angewendet. Die direkte numerische Simulation erlaubt die Auflösung aller bei inkompressiblen Zweiphasenströmungen auftretender Prozesse auf allen Längenskalen. Die einzige Beschränkung stellt dabei die gewählte Gittergröße und -auflösung dar. Grundidee der direkten numerischen Simulation ist die Lösung der Navier-Stokes-Gleichung, ohne auf eine Turbulenzparametrisierung zurückgreifen zu müssen.

Inkompressible Zweiphasenströmungen (für Geschwindigkeiten  $|\vec{u}|$  deutlich unterhalb der Schallgeschwindigkeit ist auch Luft in guter Näherung inkompressibel) mit freien Oberflächen lassen sich der Massen- und Impulsbilanz folgend über

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \tag{3.1}$$

und

$$\rho \left[ \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{S} + \vec{f}_s - \rho g \vec{k}$$
(3.2)

beschreiben.

In der Impulsbilanzgleichung (3.2) steht  $\vec{f_s}$  für die Oberflächenspannungskraft

$$\vec{f_s} = a_{int} \sigma \kappa \vec{n} \delta(|\vec{x} - \vec{x}_s|) \tag{3.3}$$

worin  $a_{int}$  für die Grenzflächendichte (den Flächeninhalt der freien Grenzflächen pro Volumen,  $[m^{-1}]$ ) steht,  $\sigma$  für die Oberflächenspannung,  $\kappa$  für die Krümmung der Ober- bzw. Grenzfläche und  $\delta(|\vec{x} - \vec{x_s}|)$  die Dirac'sche Deltafunktion bezeichnet, für die gilt:

$$\delta(|\vec{x} - \vec{x}_s|) = \begin{cases} \infty & \text{falls } \vec{x} \text{ zugehörig zu Grenzfläche, d.h. } \vec{x} = \vec{x}_s \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$
(3.4)

Was bedeutet, dass der Term  $\vec{f_s}$  in Gl.3.2 nur an Grenzflächen auftritt.

Desweiteren steht in Gleichung (3.2)  $\ddot{S}$  für den viskosen Spannungstensor bei divergenzfreier Strömung

$$\breve{S} = \mu \left[ \nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right]$$
(3.5)

Die Größe  $\mu$  bezeichnet die kinematische Viskosität des Fluids.

Um diese Gleichungen numerisch zu lösen, erfolgt eine räumliche Diskretisierung der betrachteten Region über die Finite-Volumen-Methode auf einem regelmäßigen kartesischen Gitter. Bei der Zeitintegration kann entweder ein Verfahren 1.Ordnung ("Euler vorwärts")
oder ein Verfahren 2.Ordnung (Crank-Nicolson) verwendet werden.

Der Druckterm in Gl.3.2 muss aufgrund der sich schnell ausbreitenden Druckwellen in inkompressiblen Strömungen getrennt implizit diskretisiert werden. Aus den semidiskreten Gleichungen

$$\nabla \cdot \vec{u}^{n+1} = 0 \tag{3.6}$$

$$\vec{u}^{n+1} = \tilde{u} - \frac{\delta t}{\rho^{n+1}} \nabla p^{n+1} ,$$
 (3.7)

worin  $\tilde{u}$  den den Geschwindigkeitsvektor bezeichnet, den man erhält, wenn man die Impulsgleichung nach der Geschwindigkeit  $\vec{u}$  auflöst und alle nicht-konvektiven Beschleunigungen außer der Druckbeschleunigung berücksichtigt, ergibt sich die Druckpoissongleichung

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla p^{n+1}\right] = \frac{\nabla \cdot \tilde{u}}{\delta t} \qquad , \tag{3.8}$$

für deren Lösung ein stabiler Mehrgitterlöser verwendet wird.

Um hochfrequente numerische Störungen zu glätten, wird das Schachbrett- oder Linien-Gauß-Seidel-Verfahren verwendet. Unabhängig von der Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes kann FS3D anschließend auch noch eine entkoppelte Wärmegleichung lösen, worauf in dieser Arbeit jedoch verzichtet wurde, da für die hier behandelten Fragestellungen die thermischen Effekte gegenüber den kinetischen zunächst einmal vernachlässigbar sind. Da FS3D dem Konzept nach der Volume-of-Fluid-Methode (Hirt und Nichols, 1981) folgt, ist an jedem Punkt eine Unterscheidung der gasförmigen und flüssigen Phase (Umgebungsluft und Wasser) notwendig. Als Konsequenz daraus ist eine zusätzliche Transportgleichung

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{u}C) \tag{3.9}$$

definiert, die die zeitliche und räumliche Entwicklung der Grenzflächen der Zweiphasenströmung beschreibt. Die Größe C, auch VOF-Variablegenannt, repräsentiert den Volumenanteil der flüssigen Phase am Gesamtvolumen am jeweiligen Ort (im Volumenelement dV), d.h.

$$C(\vec{x},t) = \begin{cases} 0 & \text{im Bereich der gasförmigen Phase} \\ 0 < C < 1 & \text{im Bereich der Grenzfläche} \\ 1 & \text{im Bereich der flüssigen Phase} \end{cases}$$
(3.10)

Eine Rückkopplung mit der Navier-Stokes-Gleichung (3.2) erfolgt jeden Zeitschritt über

$$\rho(\vec{x},t) = \rho_q + (\rho_f - \rho_q) C(\vec{x},t)$$
(3.11)

$$\mu(\vec{x},t) = \mu_g + (\mu_f - \mu_g) C(\vec{x},t) \qquad (3.12)$$

Die Indizes g und f stehen für die Gas- bzw. für die flüssige Phase.

Um zu gewährleisten, dass die Grenzflächen stets scharf definiert sind und um eine numerische Dissipation der flüssigen Phase zu verhindern, wird zu jedem Zeitschritt die Grenzfläche zunächst mit der von Rider und Kothe (1998) entwickelten PLIC-Methode (piecewise linear interface calculation) rekonstruiert. Erst nach der Rekonstruktion wird die flüssige Phase in der so erhaltenen Verteilung transportiert. Da an den Grenzflächen starke Gradienten auftreten, wird eine numerische Glättung durch Anwendung eines Glättungsoperators in Form eines quadratischen B-Splines nach Brackbill et al. (1992) vorgenommen, um das Entstehen von Oszillationen und unrealistischen Lösungen zu verhindern. Wie gut das FS3D-Modell reale Prozesse nachbilden kann, kann man aus dem Vergleich von Simulation und Experiment ablesen (s. Abb.3.1). Dabei wurde das Abprallen eines Tropfens von einer heißen, auf deutlich über die Leidenfrosttemperatur erwärmten Wand im Experiment per Kamera erfasst und den Ergebnissen einer entsprechenden FS3D-Simulation gegenübergestellt. Wie man sieht, ergab dieser Vergleich eine gute Übereinstimmung der Simulation mit dem realen Ablauf. Ein Vergleich von Simulation und Experiment zu Tropfen-Tropfen-Kollisionen mit anschließendem Tropfenzerfall steht leider, auch aufgrund der Schwierigkeiten bei der Realisierung entsprechender Experimente, noch aus. Es ist aber anzunehmen, dass das FS3D-Modell in der Lage ist, auch diese relativ wirklichkeitsnah zu simulieren.

### 3.2 Beschreibung der Simulationen mit FS3D

Die numerischen Simulationen zur Untersuchung des stoßinduzierten Zerfallsprozesses von Regentropfen können als virtuelles Laborexperiment betrachtet werden. Wie im Laborexperiment sind dabei die Umgebungsbedingungen, die Auswahl der einzelnen Fälle, sowie die Art ihrer Durchführung entscheidend für die spätere Belastbarkeit der aus diesen Experimenten gewonnenen Ergebnisse.

Eine Auswahl an "interessanten" Tropfenpaaren trafen bereits LL82a sowie MTL75 bei ihren Experimenten. Dabei wählten sie Tropfenpaare aus, deren Kollisionshäufigkeit nach ihren Abschätzungen relativ hoch ausfällt. Da es zunächst interessant ist, ob es Überein-



Abbildung 3.1: Abprallen eines Einzeltropfens von einer glatten Wand, die eine Temperatur deutlich oberhalb der Leidenfrosttemperatur hat. Der Tropfen bewegt sich von links nach rechts und trifft in (a) und (b) im selben Winkel auf die Wand auf. Die obere Abbildung zeigt eine Abfolge von Fotos, die untere die Ergebnisse der numerischen Simulation mit FS3D, wobei die Reibung zwischen Wand und Tropfen vernachlässigt wurde und ein Kontaktwinkel von  $180^{\circ}$  zwischen Tropfen und Wand angenommen wurde (nach Karl et al, 1996).

stimmungen zwischen den Ergebnissen der FS3D-Simulationen und den Parametrisierungen nach LL82b gibt, bietet es sich an, einen Vergleich anzustellen, der Koaleszenzeffizienzen, Bruchstückanzahl, sowie Bruchstückverteilungsfunktionen einbezieht. Zunächst wurden deshalb die Kollisionen der zehn von LL82a und MTL75 ausgewählten Tropfenpaare nachsimuliert, darüber hinaus wurden außerdem noch die Kollisionen acht weiterer Tropfenpaare simuliert, die einige "Lücken" innerhalb des von LL82a,b und MTL75 abgedeckten Parameterraumes ( $D_L, D_S$ ) füllen und so insgesamt eine verlässlichere Parametrisierung ermöglichen.

In Abb.3.2 sind die gewählten Tropfenkombinationen graphisch dargestellt. Sterne markieren die ursprünglichen Tropfenpaare von LL82a und MTL75, Kreise kennzeichnen die zusätzlichen Kombinationen. Jedes der achtzehn Symbole markiert ein FS3D-Experiment, das seinerseits wieder aus vielen Simulationen unter Variation des Stoßparameters besteht. Die strichpunktierte Linie verläuft dort, wo der Durchmesser des kleinen Tropfens gerade der Gitterauflösung der Simulationen (=0.1 mm) entspräche - nur Simulationen mit einem kleinen Ausgangstropfen deutlich oberhalb dieser Grenze machen also überhaupt Sinn. Die gepunktete Linie wurde eingezeichnet, um in etwa den Bereich der Tropfenpaarmenge, die durch die Experimente von MTL75 und LL82a vorgegeben wird, einzugrenzen. Dass sich in der rechten oberen Ecke des Durchmesserkombinationsraumes ein leerer Bereich befindet, liegt daran, dass Simulationen der Stöße derart großer Tropfen zu viel CPU-Zeit in Anspruch genommen hätten und solche Stöße aufgrund der geringen Konzentration so großer Tropfen in der Realität auch relativ selten sind, was eine Untersuchung nicht zwingend erforderlich macht. Da eine höhere Anzahl an Experimenten stets bessere Rückschlüsse auf die ablaufenden Prozesse zulässt, wurden so viele Tropfenpaare wie möglich berücksichtigt. Die Beschränkung auf acht weitere Tropfenpaare kam durch den hohen Bedarf an CPU-Zeit und den engen Zeitrahmen dieser Diplomarbeit zustande.

Anders als in der Realität, in der die Regentropfen immer in turbulenter Luft fallen, wird in den Simulationen (entsprechend "kontrollierter Laborbedingungen", wie sie auch bei MTL75 und LL82a herrschen) stets eine Umgebung in Ruhe vorausgesetzt. Diese Umgebung wird als trockene Luft bei 20°C mit einer dynamischen Viskosität von  $\mu = 1.816 \times 10^{-4} kg/(ms)$  definiert. Die Tropfen bestehen aus Wasser mit einer dynamischen Viskosität von  $\mu_{H_2O} = 1 \times 10^{-4} kg/(ms)$  und weisen die selbe Temperatur wie die Umgebung auf. Verdunstungseffekte werden nicht berücksichtigt.

Regentropfen, die unbeschleunigt mit ihrer Endfallgeschwindigkeit fallen, werden durch das Zusammenspiel von Luftwiderstand, Oberflächenspannung und umgebendem Strömungsfeld mit zunehmendem Durchmesser zunehmend verformt und können nicht mehr als Kugeln, sondern eher als oblate Sphäroide (abgeplattete, rotationssymmetrische Ellipsoide) beschrieben werden. Zusätzlich werden die Tropfen noch durch periodische Leewirbelablösungen in Schwingungen versetzt und dadurch ebenfalls verformt.

Zur Initialisierung der FS3D-Simulationen wird als Vereinfachung eine Sphäroidnäherung für die Tropfenform verwendet, wobei für das Achsenverhältnis von kleiner (a) zu großer (b) Halbachse eine von Beard und Chuang (1987) angegebene Funktion in Abhängigkeit



Abbildung 3.2: Durchmesserkombinationen der kollidierenden Tropfen in cm ( $D_{gr}$  großer Tropfen,  $D_{kl}$  kleiner Tropfen). Mit FS3D berechnet wurden Stöße der ursprünglichen Paare der Low&List-Parametrisierung (Rot) und Stöße zusätzlicher Paare (Grün).

des volumenäquivalenten Durchmessers  $D_0$  verwendet wird.

$$\frac{a}{b} = \begin{cases} 1.101668 - 0.09806D_0 - 2.52686D_0^2 + 3.75061D_0^3 - 1.68692D_0^4 & \text{für } D_0 > 0.1\,cm \\ 1 & \text{für } D_0 \le 0.1\,cm \\ (3.13) \end{cases}$$

 $D_0$  ist hierbei in cm einzusetzen. Tropfen mit volumenäquivalentem Durchmessern kleiner 1 mm werden also als Kugeln vorgegeben.

Die Endfallgeschwindigkeiten, die die Regentropfen im Schwerefeld der Erde erreichen, wird zum Start der Simulationen als vektorielle Größe für alle Elemente, die zusammen die Tropfenmasse bilden, vorgegeben. Die Berechnung dieser Geschwindigkeit erfolgt nach der Formel von Beard (1976), die die Endfallgeschwindigkeit als Funktion einer Vielzahl von Parametern beschreibt und als die derzeit genaueste Parametrisierung angesehen wird. Wie schon beschrieben, können Umströmungseffekte bei der Kollision von Tropfen eine Rolle spielen (s. Abschnitt 2.2). Diesem Umstand sollte eine Simulation, wie hier beschrieben, natürlich Rechnung tragen. Aus Rechenzeitgründen konnte dies nur eingeschränkt realisiert werden.

Damit sich vor der Kollision der Tropfen das durch die Umströmung der beiden Tropfen bedingte Strömungsfeld zumindest rudimentär einstellen kann, werden die Tropfen vertikal zueinander derart versetzt, dass ein zentraler Stoß erst nach 0.5 ms erfolgen würde. Damit können Effekte, die sich durch eine Wechselwirkung der Tropfen mit den (Um)Strömungsfeldern ergeben, zumindest teilweise erfasst werden. Dazu gehören zum Beispiel die Zirkulation innerhalb der Tropfen, die durch die äußere Strömung induziert wird, eine stärkere Tendenz zum Herumführen des kleinen Tropfen um den großen, sowie ein mögliches "Einfangen" des kleinen Tropfens oder von Stoßfragmenten im Rücklauf des großen Tropfens.

Im Gegensatz zu den Experimenten von LL82a und MTL75, bei denen die Exzentrizität der Stöße der einzelnen Tropfenpaare nicht festgelegt werden konnte (man sich also darauf verließ, dass aufgrund der hohen Anzahl an Kollisionen eine Gleichverteilung der Exzentrizitäten vorliegen sollte, siehe 2.4.1) können bei den Simulationsläufen die Exzentrizitäten des Stoßes jedes Simulationslaufes explizit festgelegt werden. Um eine möglichst lückenlose Abdeckung zu erreichen, werden dabei pro Tropfenpaar elf verschiedene Einstellungen vorgegeben. Diese reichen von nahezu zentralem Stoß (Exzentrizität bzw. Stoßparameter  $\epsilon = 0.025$ ) über Exzentrizitätswerte von 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 bis zum gerade noch streifenden Stoß ( $\epsilon = 0.975$ ). (Zur Definition des Stoßparameters / der Exzentrizität siehe Gleichung 2.14 )

Die räumliche Diskretisierung betrug bei allen Simulationen in alle Raumrichtungen 0.1 mm. Das Simulationsgebiet wurde je nach Größe der an der jeweiligen Kollision beteiligten Tropfen entweder auf 1.28  $cm^3$ , 1.28  $cm \times 2.56 cm^2$  oder 2.56  $cm^3$  begrenzt. Die Randbedingungen am Ober- und Unterrand wurden periodisch gewählt. Die seitlichen Ränder wurden als feste Wände ohne Haftung definiert (free slip Bedingung). Zunächst wurde eine expilizite Zeitdiskretisierung nach Euler getestet, später wurde jedoch zum genaueren impliziten Crank-Nicolson-Verfahren übergegangen (zu den Gründen siehe Kapitel 3.3). Die zeitliche Auflösung der Simulationen liegt zwischen  $10^{-6}$  und  $10^{-5}$  s und erfüllt das Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium. Meistens wurden zur Berechnung acht Prozessoren eines Parallelrechners verwendet. Dennoch betrugen je nach Tropfenpaar und Exzentrizität des jeweiligen Stoßes die Rechenzeiten zwischen 2,5 und 350 Stunden pro Stoß.

#### 3.2.1 Vorgehen bei der Auswertung

Die Auswertung der Fragmentzahl und Fragmentgrößen erfolgt nach jeweils 0.2 ms. Dabei werden mittels eines "Region Growing"-Verfahrens zusammenhängende Regionen in den Daten gesucht, innerhalb derer die VOF-Variable C in jedem Gittervolumenelement positive Werte annimmt. Diese Gebiete werden als Tropfen klassifiziert. Das Volumen dieser Tropfen erhält man durch Aufsummieren aller zugehörigen Volumenflüssigkeitsanteile (gegeben durch die VOF-Variable). Die zugehörigen volumenäquivalenten Durchmesser dieser Tropfen werden anschließend durch Berechnung des Durchmessers einer entsprechenden Kugel mit gleichem Volumen gewonnen. Nur Fragmente, deren volumenäquivalente Durchmesser mindestens die Gitterweite von 0.1 mm überschreiten, werden berücksichtigt, um numerische Artefakte auszuschließen. Die Erhaltung der Gesamtmasse ist bei diesem Verfahren in guter Näherung gewährleistet.

Die Festlegung eines stabilen Zustandes als ein für die jeweilige Exzentrizität und das jeweilige Tropfenpaar repräsentatives Kollisionsresultat erfolgt über drei Entscheidungsschritte:

1) Der erste Schritt setzt voraus, dass sich das Kollisionsprodukt (also die Anzahl und Größe der Fragmente) über 0.4 ms (also 3 Auswertungszeitpunkte) hin nicht ändert.

2) Der zweite Schritt fordert, dass sich die Masse des größten Fragmentes nach Erreichen des Kollisionsresultates nicht mehr reduzieren soll. Dies soll dem verzögerten Ablösen weiterer Fragmente durch tropfeninterne Schwingungen Rechnung tragen. Schwingungen mit besonders langer Periodendauer können jedoch nicht immer erkannt werden, es kann also im schlechtesten Fall zu einer vorschnellen Festlegung auf ein "falsches" Kollisionsresultat und einem Abbruch der Simulation kommen.

3) Der dritte Schritt schließlich ist eine subjektive Bewertung. Erscheint das Kollisionsresultat noch nicht "stabil" genug, so wird die Simulation noch fortgesetzt. Bildet sich zum Beispiel ein langer dünner Wasserfaden, der zwei Tropfen miteinander verbindet, so ist meistens davon auszugehen, dass dieser Faden noch "reißen" wird, auch wenn dies erst nach mehr als 0.4 ms geschieht und nicht das größte Fragment betrifft. Dieser subjektive Entscheidungsschritt ermöglicht also ein Einbringen von Erfahrungswerten in die Auswertung der Simulationsergebnisse. Für eine endgültige Festlegung auf ein Resultat müssen dann allerdings auch die in Schritt eins und zwei genannten Kriterien erfüllt sein.

#### 3.2.2 Gewinnung eines mittleren Kollisionsresultates

Bei zufällig über die Stoßfläche verteilten Exzentrizitäten (Gleichverteilung), wie sie in der Natur erwartet werden müssen, wird die abgeleitete Bruchstückverteilungsfunktion als statistisches Mittel über alle vorkommenden Exzentrizitäten verstanden. Dazu muss man die Verteilung der Exzentrizitäten bei gleichverteilten Auftrefforten bestimmen und mit dieser Verteilung ein gewichtetes Mittel berechnen.

Da man nur eine begrenzte Anzahl von Exzentrizitätseinstellungen vorgeben kann, ist zudem eine Diskretisierung notwendig. Man gelangt z.B. folgendermaßen zu einer adäquaten Beschreibung:

Die mittlere Bruchstückverteilungsfunktion  $\overline{P}(D)$  für eine Tropfenpaarkombination lässt sich schreiben als:

$$\overline{P}(D) = \int \int_{A} P(D, x, y) f(x, y) \, dx \, dy \tag{3.14}$$

Darin bezeichnen x und y Ortskoordinaten (Achtung, keine Tropfenmassen/durchmesser wie zuvor!) und f(x,y) dxdy gibt die Auftreffwahrscheinlichkeit auf der Fläche in den Intervallen [x, x + dx], [y, y + dy] mit der Normierung

$$\int \int_{A} f(x,y) \, dx \, dy = 1 \tag{3.15}$$

an.

Mit der Annahme der Gleichverteilung gilt für f(x, y)

$$f(x,y) = \frac{1}{A}$$
 . (3.16)

Gleichung 3.14 lässt sich also schreiben als

$$\overline{P}(D) = \frac{1}{A} \int \int_{A} P(D, x, y) \, dx \, dy \qquad , \tag{3.17}$$

oder transformiert in Polarkoordinaten

$$\overline{P}(D) = \frac{1}{A} \int_0^{2\pi} \int_0^{r_x + r_y} P(D, x(r, \varphi), y(r, \varphi)) r \, dr d\varphi \qquad .$$
(3.18)

Per Voraussetzung ist P nur abhängig von r (symmetrisch in  $\varphi$ ), daher lässt sich die mittlere Bruchstückverteilungsfunktion in diskrete Abschnitte  $a_0 = 0, a_1...a_{N-1}, a_N =$ 

 $r_x + r_y$  aufteilen. Dann ist

$$\overline{P}(D) = \frac{1}{A} 2\pi \sum_{i=1}^{N} \int_{a_{i-1}}^{a_i} P(D, r) r \, dr \qquad .$$
(3.19)

Über den Mittelwertsatz der Integralrechnung erhält man eine Kreisflächengewichtung

$$\overline{P}(D) = \frac{2\pi}{A} \sum_{i=1}^{N} P(D,\zeta_i) \left[\frac{1}{2}r^2\right]_{a_{i-1}}^{a_i}$$
(3.20)

$$= \frac{2\pi}{A} \sum_{i=1}^{N} P(D,\zeta_i) \frac{1}{2} \left( a_i^2 - a_{i-1}^2 \right)$$
(3.21)

$$= \frac{1}{A} \sum_{i=1}^{N} P(D,\zeta_i) \pi \left( a_i^2 - a_{i-1}^2 \right) \text{ mit } \zeta_i \epsilon \left[ a_{i-1}, a_i \right] \quad , \qquad (3.22)$$

wobei  $\zeta_i \epsilon [a_{i-1}, a_i]$  noch näher zu bestimmen ist.

 $P(D,\zeta_i)$  soll das integrale Mittel von P(D,r) über das Intervall  $[a_{i-1},a_i]$  repräsentieren. A priori ist nichts über das Monotonieverhalten von P(D,r) im Intervall  $[a_{i-1},a_i]$  bekannt, daher ist die Schätzung

$$\zeta_i = \frac{a_{i-1} + a_i}{2} \tag{3.23}$$

diejenige mit der höchsten "Trefferwahrscheinlichkeit". Für  $\overline{P}(D)$  gilt dann:

$$\overline{P}(D) \approx \frac{1}{A} \sum_{i=1}^{N} P(D, \frac{a_{i-1} + a_i}{2}) \pi \left(a_i^2 - a_{i-1}^2\right) \qquad (3.24)$$

Mit der Definition des Stoßparameters  $\epsilon = \frac{r}{r_x + r_y}$  und dem Setzen von  $r = a_i$  erhält man die Beziehung

$$a_i = \epsilon_i (r_x + r_y) \qquad , \tag{3.25}$$

womit sich eine Transformation gemäß

$$P(D, a_i) da_i = P(D, \epsilon_i) d\epsilon_i$$
  

$$P(D, \epsilon_i) = P(D, a_i) \frac{da_i}{d\epsilon_i} = P(D, a_i)(r_x + r_y)$$
(3.26)

durchführen lässt. Diese ergibt

$$\overline{P}(D) = \frac{1}{\pi (r_x + r_y)^2} \sum_{i=1}^{N} P_{\epsilon} \left( D, \frac{\epsilon_{i-1} + \epsilon_i}{2} \right) \pi (r_x + r_y)^3 \left( \epsilon_i^2 - \epsilon_{i-1}^2 \right)$$
(3.27)

$$= \sum_{i=1}^{N} P_{\epsilon} \left( D, \frac{\epsilon_{i-1} + \epsilon_i}{2} \right) \left( \epsilon_i^2 - \epsilon_{i-1}^2 \right) \left( r_x + r_y \right) \qquad (3.28)$$

Bei den Simulationen mit FS3D wurden N = 11 und als Intervallgrenzen  $\epsilon_0$  bis  $\epsilon_{11}$  folgende Exzentrizitäten gewählt:  $\epsilon = (0, 0.05, 0.15, 0.25, 0.35, 0.45, 0.55, 0.65, 0.75, 0.85, 0.95, 1)$ . Der Anschaulichkeit halber wird anstelle von Exzentrizitäten mit realen Kreisflächen gearbeitet, dies ist aber letztendlich unerheblich.

So wird beispielsweise das Ergebnis der Exzentrizität  $\epsilon = 0.025$  (im Intervallmittelpunkt) mit einer Kreisfläche um das Zentrum des großen Tropfens gewichtet, deren Radius so gewählt wird, dass sie genau bis zu der Kreislinie reicht, die die Auftreffpunkte bei einer Exzentrizität von  $\epsilon = 0.05$  beschreibt. Das Ergebnis für den Fall mit der Exzentrizität  $\epsilon = 0.1$  wird mit der Fläche der Kreisscheibe zwischen den Kreislinien, die die Auftreffpunkte bei einer Exzentrizität von 0.05 und 0.15 beschreiben, gewichtet, und so fort (siehe Abb.3.3).

## 3.3 Vergleich der Simulationsergebnisse mit der Parametrisierung nach Low und List

Die Parametrisierungen nach LL82a werden meist verwendet, um stoßinduzierte Zerfallsprozesse von Regentropfen in Wolkenmodellen mit detaillierter Mikrophysik zu berücksichtigen. Daher werden im folgenden Vergleiche dieser Parametrisierungen mit den aus den Simulationen gewonnenen Daten über Koaleszenzeffizienz, mittlere Bruchstückanzahl und -verteilung für jedes der zehn von LL82a und MTL75 in ihren Experimenten verwendeten Tropfenpaare, sowie für acht weitere (siehe Abb.3.2) durchgeführt. In Tabelle 3.1 sind die Tropfenkombinationen sowie die charakteristischen Größen der entsprechenden Stöße aufgeführt. Die Buchstaben a bis j bezeichnen die Tropfenpaare, die in LL82b (in der selben Zuordnung) Verwendung finden. Die Weberzahl We ist der Quotient aus Deformationsenergie CKE und Oberflächenenergie des koaleszenten Systems

$$We = \frac{CKE}{Sc} \qquad . \tag{3.29}$$



Abbildung 3.3: Die Ergebnisse für bestimmte Exzentrizitäten gehen mit der sich um den entsprechenden Auftreffkreis ausdehnenden repräsentativen Auftrefffläche gewichtet in das Gesamtergebnis für das jeweilige Tropfenpaar ein. Die Gewichtung für den zentrumnahesten Stoß ist auf der linken Seite dargestellt, sein Ergebnis wird also mit der Fläche A gewichtet. Für den sich daran nach außen hin anschließenden Stoß (rechte Seite) wird die Fläche B als Gewicht verwendet.

I

| Tropfenpaar | $D_{qr}$ [cm] | $D_{kl}$ [cm] | We   | CKE $[\mu J]$ | Sc $[\mu J]$ |
|-------------|---------------|---------------|------|---------------|--------------|
| а           | 0.46          | 0.18          | 2.48 | 12.53         | 5.05         |
| b           | 0.36          | 0.18          | 2.66 | 8.55          | 3.22         |
| С           | 0.46          | 0.10          | 1.35 | 6.62          | 4.89         |
| d           | 0.36          | 0.10          | 1.81 | 5.46          | 3.02         |
| е           | 0.30          | 0.10          | 1.98 | 4.18          | 2.12         |
| f           | 0.18          | 0.10          | 1.20 | 0.99          | 0.83         |
| g           | 0.18          | 0.0715        | 1.19 | 0.92          | 0.77         |
| h           | 0.44          | 0.0395        | 0.20 | 0.90          | 4.44         |
| i           | 0.40          | 0.0395        | 0.23 | 0.86          | 3.67         |
| j           | 0.18          | 0.0395        | 0.44 | 0.33          | 0.75         |
| 11          | 0.06          | 0.035         | 0.12 | 0.011         | 0.09         |
| 12          | 0.12          | 0.035         | 0.35 | 0.12          | 0.34         |
| 13          | 0.12          | 0.06          | 0.68 | 0.24          | 0.36         |
| 14          | 0.25          | 0.0395        | 0.38 | 0.55          | 1.44         |
| 15          | 0.24          | 0.09          | 1.73 | 2.37          | 1.36         |
| 16          | 0.27          | 0.15          | 2.12 | 3.93          | 1.86         |
| 17          | 0.32          | 0.0395        | 0.31 | 0.73          | 2.35         |
| 18          | 0.41          | 0.14          | 2.43 | 9.60          | 3.96         |

Tabelle 3.1: charakteristische Größen der Kollisionen der 18 Tropfenpaare

#### 3.3.1 Vergleich der Koaleszenzeffizienzen

Die Koaleszenzeffizienz bezeichnet den Anteil der Kollisionen, die eine im gewichteten Mittel über die Exzentrizitäten (stabile) Koaleszenz der beiden Ausgangstropfen zur Folge haben. Immer wenn eine Simulation zu einer bestimmten Exzentrizität ein stabil koaleszentes Tropfensystem als Ergebnis liefert, wird die Koaleszenzeffizienz des betroffenen Tropfenpaares um die Gewichtung der entsprechenden Exzentrizität erhöht.

Zunächst lieferten die Simulationen unerwartete Ergebnisse: Immer dann, wenn den Experimenten von LL82a und MTL75 zufolge ein Disk-Breakup zu erwarten gewesen wäre, resultierte stattdessen eine stabile Koaleszenz der beiden Ausgangstropfen. Die Scheibe (Disk) schien sich zwar auszubilden, aber ein anschließendes "Aufplatzen" fand nie statt. Als ein Grund für diese Unstimmigkeit wurde vermutet, dass das verwendete Verfahren zur Zeitintegration, nämlich das Euler-Vorwärtsverfahren, von unzureichender Genauigkeit war, obwohl der numerische Zeitschritt entsprechend dem CFL-Kriterium gewählt wurde. Abhilfe brachte die Anwendung des Crank-Nicolson-Verfahren, das implizit und von 2.Ordnung ist. Es erforder zwar etwas mehr Rechenzeit, ist aber dafür von höherer Fehlerordnung und unterliegt nicht dem CFL-Kriterium bezüglich des Zeitschritts, wie eine Stabilitätsanalyse zeigt (Press et. al, 2001). Ein Vergleich beider Verfahren liefert die eindeutige Aussage, dass nur die Implementierung der Crank-Nicolson-Zeitdiskretisierung in der Lage ist, den Disk-Breakup - so wie von LL82a beobachtet - zu erfassen (siehe Abb.3.4). Es scheint so zu sein, dass für die in FS3D implementierten räumlichen Diskretisierungsverfahren im Zusammenspiel mit dem Euler-Zeitdiskretisierungsverfahren 1.Ordnung das CFL-Kriterium als Stabilitätsmaß nicht ausreichend restriktiv ist. Als Konsequenz wurden alle Simulationen mit dem Crank-Nicolson-Verfahren durchgeführt.

Zur Auswertung wurde die Koaleszenzeffizienz der Tropfenpaare (die Summe der an die Exzentrizität angepassten Gewichtungen jener Resultate, die anschließend nur einen Tropfen aufweisen) als Funktion ihrer Weberzahl We (Definition siehe Gl.3.29) in Abb.3.5 den nach LL82b parametrisierten Werten gegenübergestellt.

Insgesamt lässt sich keine systematische Abweichung der berechneten Werte von den nach LL82b parametrisierten feststellen. Da jedoch zehn der berechneten Werte höher und fünf unter den nach Low und List parametrisierten Werten liegen, könnte man vermuten, dass die Parametrisierung nach LL82b oft niedrigere Koaleszenzeffizienzen ergibt, bzw. dass LL82a und MTL75 auch niedrigere gemessen haben. Das könnte zum Beispiel daran liegen, dass die im Laborexperiment verwendeten Tropfen schon vor der Kollision Schwingungen aufweisen (z.B. durch die Beschleunigung im elektrischen Feld oder durch Prozesse beim Abtropfen), was sie evtl. auch instabiler machen könnte. Laut LL82a ist der Einfluss der Schwingungen jedoch unerheblich. Ob solche Schwingungen in der Realität oft auftreten, ist nicht mit Sicherheit zu sagen (z.B. durch das die Tropfen umgebende turbulente Strömungsfeld oder sich periodisch ablösende Wirbel). Die Simulation der Kollision von Tropfen ohne Schwingungen vor der Kollision (wie es bei den Simulationen mit FS3D hier näherungsweise der Fall ist) entspricht jedenfalls nicht exakt den Experimentbedingungen. Im Bereich der Extrema ( $E_{coal} = 1$  und  $E_{coal} = 0$ ) fallen die Abweichungen am deutlichsten ins Auge. Bei dem Tropfenpaar mit der niedrigsten Weberzahl (Tropfenpaar 11, siehe Tab.3.1) zeigten die Simulationen für alle Exzentrizitäten permanente Koaleszenz (also  $E_{coal} = 1$ ), wohingegen die Parametrisierung nach LL82b nur einen Wert von  $E_{coal} \approx 0.3$ ergibt. Allerdings liegt dieses Tropfenpaar auch außerhalb des von LL82a und MTL75 in ihren Experimenten verwendeten Tropfendurchmesserbereichs. Im anderen Extrembereich,  $E_{coal} = 0$ , bestätigen die Simulationen dies nur für Weberzahlen ab 2.48 (für die zwei Tropfenpaare a,b mit den höchsten Weberzahlen). Bei zwei anderen Tropfenkombinationen (c,d) liefert die Parametrisierung zwar  $E_{coal} = 0$ , die Simulationen zeigen aber  $E_{coal} = 0.20$  bzw. 0.30. Vor allem in diesen Bereichen macht sich in der Realität auch die Kollisionseffizienz bemerkbar, daher wird im folgenden Abschnitt auf diesen Aspekt



Abbildung 3.4: Vergleich der Entwicklung von stoßenden Tropfen bei Anwendung der impliziten Zeitdiskretisierung nach Crank-Nicolson (**links**, a) mit der des expliziten Euler-Verfahrens 1.Ordnung (**rechts**, b) anhand eines Tropfenpaares. Die Simulationsergebnisse sind jeweils zu den ganz links angegebenen Zeitpunkten nach Start der Simulation für eine nahezu zentrische Kollision (Exzentrizität=0.025) der Tropfen mit den volumenäquivalenten Durchmessern  $d_{gr} = 4.6 \ mm$  und  $d_{kl} = 1.8 \ mm$  dargestellt.



Abbildung 3.5: Koaleszenzeffizienzen als Funktion der Weberzahl nach der Parametrisierung von LL82b (**blau**) und aus den Simulationen gewonnene Werte (**rot**).

eingegangen.

#### 3.3.1.1 Betrachtungen zur Kollisionseffizienz

Nach Gleichung (2.19) lässt sich die Wahrscheinlichkeit einer permanenten Koaleszenz zweier Tropfen als das Produkt aus Kollisionseffizienz und Koaleszenzeffizienz ausdrücken. Aber weder bei LL82a,b sowie MTL75 noch bei der Untersuchung anhand von Simulationen in dieser Arbeit wird die Kollisionseffizienz explizit angegeben. Das liegt daran, dass sie sich bei der Auswertung der Daten - unabhängig davon, ob Experiment oder Simulation betrachtet wird - (nahezu) nicht ermitteln, bzw. nicht von der Koaleszenzeffizienz trennen lässt. Das führt dazu, dass in beiden Fällen die Kollisionseffizienz implizit in der Koaleszenzeffizienz enthalten ist.

Dennoch besteht ein deutlicher Unterschied zwischen den Experimenten und den Simulationen: Im Fall der Experimente ist das Umströmungsfeld der fallenden Tropfen vor der Kollision voll ausgebildet, wohingegen in den Simulationen dies aufgrund der begrenzten CPU-Zeit nur rudimentär erreicht werden konnte. Außerdem ist FS3D je nach gewählter Auflösung meist nicht in der Lage, den Einfluß des Luftfilms, der sich zwischen zwei Tropfen befindet und der zur erfolgreichen Koaleszenz überwunden werden muss, zu simulieren. Diese Unterschiede könnten zur Folge haben, dass Kollisionen in den Simulationen mit einer größeren Wahrscheinlichkeit auftreten als im Experiment, das heißt die Kollisionseffizienz wäre erhöht.

Daher kann auch die im Experiment gemessene Koaleszenzeffizienz, die die (gegenüber den Simulationen niedrigere) Kollisionseffizienz enthält, deutlich niedriger ausfallen als die anhand der Simulationen berechnete Koaleszenzeffizienz. Dies könnte also ein weiterer Grund für die im Mittel niedrigeren Koaleszenzeffizienzen bei LL82a,b und MTL75 sein. Diesbezügliche Verbesserungen der Simulationen könnten nur unter Einsatz erheblich größerer Rechnerkapazitäten erreicht werden. Untersuchungen anhand ausgewählter Fälle wären interessant. Eventuell ließen sich so Korrekturfaktoren für die bisher erhaltenen Koaleszenzeffizienzen (die ja eigentlich die Kollektionseffizienzen meinen) ermitteln. Eine andere Möglichkeit bestünde darin, Korrekturen durch Übernahme von Kollisionseffizienzen aus der Literatur (z.B. Lin und Lee (1975)) auf die Simulationsdaten anzuwenden.

#### 3.3.2 Vergleich der mittleren Bruchstückanzahl

Die über die Exzentrizitäten gemittelte Bruchstückanzahl, die aus einer Kollision zweier Tropfen resultiert, kann stark variieren. Sie ist 1, wenn es bei allen Exzentrizitätswerten zur permanenten Koaleszenz kommt, sie kann aber auch Werte jenseits von 10 erreichen, wenn die Deformationsenergie hoch ist und z.B. Disk-Breakup auftritt.

Zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit den von Low und List parametrisierten Werten ist in Abb.3.6 die mittlere Bruchstückanzahl als Funktion der Deformationsenergie *CKE* aufgetragen. Auch wenn sich im großen und ganzen die Werte ähneln, fällt in 15 der 18 Fälle eine (systematische) Abweichung auf: Die berechneten Werte sind kleiner als die nach LL82b parametrisierten Werten. Bei vier Tropfenkombinationen ergibt die Parametrisierung sogar eine mittlere Bruchstückanzahl, die mehr als dem 1.5fachen des Wertes aus den Simulationen entspricht.

Die Gründe hierfür könnten unter anderem die schon bei dem Vergleich der Koaleszenzeffizienzen (s. voriger Abschnitt) genannten sein, da eine enge Verknüpfung zwischen Koaleszenzeffizienz und mittlerer Bruchstückanzahl besteht. Insgesamt scheinen die Tropfen, wenn man die Parametrisierungen von LL82b zur Berechnung verwendet oder die von LL82a und MTL75 durchgeführten Experimenten betrachtet, instabiler zu sein, als in den FS3D-Simulationen, und somit bei Kollision leichter in viele Bruchstücke auseinanderzu-



Abbildung 3.6: Mittlere Bruchstückanzahl als Funktion der Deformationsenergie CKE in  $\mu J$  nach der Parametrisierung von LL82b und berechnet (anhand von FS3D-Simulationen).

platzen.

Im Bereich der Bruchstücke, deren volumenäquivalenter Durchmesser kleiner als 0.5 mm ist, konnten MTL75 in ihren Experimenten (betroffen sind also die Tropfenpaare f bis j in Tabelle 3.1) aufgrund der ungenügenden Auflösung der Kamera keine Bruchstücke detektieren. Hier stützt sich die Parametrisierung von Low und List also zum Teil auf theoretische Überlegungen. Bei der Auswertung der FS3D-Simulationen wurden hingegen Bruchstücke bis zu einem volumenäquivalenten Durchmesser von 0.1 mm, was der minimalen Gitterauflösung entspricht, berücksichtigt. Dies könnte also auch eine mögliche Quelle für Unterschiede darstellen. Ein Vergleich der Bruchstückverteilungen selbst erfolgt im nächsten Abschnitt.

#### 3.3.3 Vergleich der Bruchstückverteilungen

Um Aussagen über die mittlere Bruchstückverteilung einer mit FS3D berechneten Tropfenkollision treffen zu können, werden die Durchmesser der Bruchstücke, die als Resultat der Stöße bei den elf Exzentrizitäten gewonnenen werden, zunächst in Klassen zusammengefasst und gehen dann jeweils der Exzentrizität entsprechend gewichtet in die mittlere Verteilung ein. Die Klassenbreite wird dabei auf 0.1 mm festgelegt. So kann ein relativ glatter Verlauf der Verteilung erreicht werden, bei der die Einzelwerte nicht zu sehr in den Vordergrund treten (siehe Abb.3.7 bis 3.9).

Möchte man diese diskreten Anzahlverteilung mit einer Dichtefunktion (wie bei LL82b) vergleichen, muss vorher noch durch die Klassenbreite dividiert werden. Dadurch und durch die mit der gewichteten Mittelung erreichte Berücksichtigung einer Gleichverteilung der Stöße werden die Simulationsergebnisse mit der Parametrisierung nach LL82b vergleichbar.

Anstelle - oder zur Erweiterung - des Vergleichs der Daten der FS3D-Berechnungen mit der an die Experimentdaten gefitteten Parametrisierung nach LL82b wäre ein direkter Vergleich mit den diskreten Experimentdaten von LL82a und MTL75 wünschenswert. Diese lagen aber leider nicht vor.

Dass in Vergleichs-Abb.3.7 für Tropfenpaar 11 nur die Parametrisierung nach LL82b erscheint, liegt daran, dass die Simulationen für dieses Tropfenpaar keinen Zerfall, sondern stets temporäre Koaleszenz zeigten. Bis auf diese Ausnahme ist insgesamt eine Ähnlichkeit der aus den Rechnungen gewonnenen Verteilungen mit denen nach Low und List erkennbar. Es gibt stets ein lokales Maximum im Bereich des Durchmessers  $d_{gr}$  des größeren Ausgangstropfen und meist auch ein lokales Maximum im Bereich des Durchmessers  $d_{kl}$ des kleineren Ausgangstropfen. Von  $d_{kl}$  hin zu kleineren Bruchstückdurchmessern schließt sich in den meisten Fällen noch ein weiteres lokales Maximum an. Bruchstücke im Bereich zwischen  $d_{kl}$  und  $d_{qr}$  kommen übereinstimmend kaum vor.

Im Detail betrachtet fallen jedoch auch deutliche Abweichungen ins Auge. So ist die parametrisierte Verteilung im Bereich des lokalen Maximums bei  $d_{gr}$  in zwölf von 17 Fällen breiter als die aus den Simulationen gewonnene, und sie fällt stets im Vergleich mit den Simulationsdaten niedriger aus. Es scheint also insgesamt so zu sein, dass die anhand der Simulationen gewonnene Bruchstückverteilung rund in der Nähe des Durchmessers des großen Ausgangstropfens deutlich schmaler und höher ist, als es die Parametrisierung von LL82b zeigt. Dieser Befund deckt sich mit den Ergebnissen von Brown (1997). Er zeigt, dass vor allem für Kollisionen, bei denen der große Ausgangstropfen deutlich größer ist als der kleine, der entsprechende Teil der Verteilung nicht als breite Gauß-Kurve, sondern eher als Delta-Funktion parametrisiert werden sollte.

Im Bereich rund des lokalen Maximums beim Durchmesser  $d_{kl}$  des kleinen Ausgangstropfens fällt die parametrisierte Verteilung im Vergleich mit den Simulationsdaten bei mehr als zwei Dritteln der Kollisionskombinationen zu größeren Durchmessern hin viel flacher ab und ist insgesamt zu breit und zu flach. Es scheint also so zu sein, dass auch das Maximum der Verteilung bei  $d_{kl}$  in den Simulationsdaten höher ausfällt, als es nach der (über einen größeren Bereich "verschmierenden") Parametrisierung von LL82b der Fall ist.

Die Lage des lokalen Maximums bei noch kleineren Durchmessern als  $d_{kl}$  ist in den Simulationsdaten im Vergleich zu den Parametrisierungen in sieben der siebzehn Fälle zu geringeren Durchmessern hin verschoben. Außerdem ist die parametrisierte Verteilung in diesem Bereich bei zwölf der siebzehn Tropfenpaare auch breiter. Die Höhe dieses lokalen Maximums fällt in den Parametrisierungen bei vier von siebzehn Fällen zu hoch, bei elf Fällen zu niedrig aus, liefert also keine mit den Simulationsdaten übereinstimmende Beschreibung. Insbesondere bei den drei deformationsenergiereichsten und den drei deformationsenergieärmsten Tropfenkollisionen sind die Abweichungen ausgesprochen groß. Im Falle der drei deformationsenergieärmsten Tropfen (s. Abb.3.7) zeigen die Simulationsdaten kein Verteilungsmaximum in diesem Bereich, wohingegen die Parametrisierung eines vorsieht. Hier sei aber noch einmal darauf hingewiesen, dass sich diese Tropfenkombinationen außerhalb des Bereiches der Experimente von MTL75 und LL82a befinden. Es ist sicher auch mitentscheidend, dass bei der Auswertung der Experimentdaten für die Tropfenpaare a bis f MTL75 Durchmesser unter 0.5 mm nicht mehr berücksichtigen konnten (zu grobe Auflösung der Kamera), so dass sie bei ihrer Parametrisierung in diesem Bereich auf Schwierigkeiten stoßen.

Die Bruchstückverteilungen für Tropfenpaar 16 und Low&List Tropfenpaar e (Abb.3.8 u. 3.9) soll der Parametrisierung nach ein weiteres deutliches Maximum zwischen dem Durchmesser  $d_{kl}$  des kleinen Ausgangstropfens und dem Maximum bei den ganz kleinen Bruchstücken liegen, dies existiert in den Simulationsdaten jedoch nicht.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sich die aus den Simulationen gewonnenen Verteilungen und die Verteilungen nach den Parametrisierungen von LL82b in vielen Punkten zwar ähneln, sie aber im Detail, betrachtet vor allem in den Bereichen des Durchmessers des großen Ausgangstropfens und bei Durchmessern kleiner als dem des kleinen Ausgangstropfen, deutliche Unterschiede zeigen.

Würden die aus den Simulationen gewonnenen Bruchstückverteilungen so in einem mi-

krophysikalischen Wolkenmodell im Falle des Breakups der entsprechenden Tropfen verwendet, muss durch das Auftreten besonders vieler kleiner Regentropfen damit gerechnet werden, dass der Effekt des Wachstums der großen Regentropfen durch Kollektion verstärkt würde. Dies könnte unter Umständen z.B. in den Regentropfengleichgewichtsverteilungen teilweise andere Resultate liefern, als es bei der bisherigen Verwendung der Parametrisierungen nach Low und List der Fall ist (s. Seifert et al. 2005, Mayer 2000). Auch in Bezug auf Verdunstungseffekte ergäben sich Unterschiede.

Die aufgezeigten Differenzen rechtfertigen den Versuch einer an die Ergebnisse der Simulationen angepassten neuen Parametrisierung des stoßinduzierten Zerfalls. Mit diesem Thema befasst sich der nächste Abschnitt.



Abbildung 3.7: Mittlere Anzahl von Bruchstücken in  $cm^{-1}$  als Funktion des Bruchstückdurchmessers in cm. Parametrisiert nach LL82b (**blau**) und die entsprechenden Resultate der FS3D-Simulationen (**rot**) für die sechs deformationsenergieärmsten der 18 Tropfenpaare (siehe Tab.3.1). Die blauen Kreise sind die diskreten Werte der nach LL82b parametrisierten Bruchstückverteilungsfunktion, bezogen auf die bei der Auswertung der FS3D-Simulationen verwendete Intervallgröße von 0.1 mm; die roten Sterne geben die aus den Simulationen gewonnenen Werte für jedes Intervall wieder.



Abbildung 3.8: Wie Abb.3.7, jedoch für die sechs Tropfenpaare im mittleren Deformationsenergiebereich.



Abbildung 3.9: Wie Abb.3.7, jedoch für die sechs deformationsenergiereichsten Tropfenpaare.

# 4 Eine an die Simulationsdaten angepasste Parametrisierung des stoßinduzierten Zerfalls

Eine Parametrisierung zielt darauf ab, diskrete Daten oder Datenfelder durch einfache mathematische Formeln auszudrücken. Dies impliziert, dass die Beschreibung auch dort gültig sein soll, wo keine Messwerte oder Rechenergebnisse vorliegen. Ausgehend von wenigen bekannten Ergebnissen für einzelne Tropfenpaare soll eine Parametrisierung des stoßinduzierten Zerfalls also (im Idealfall) eine für alle denkbaren Regntropfenkombinationen gültige Formulierung für Koaleszenzeffizienz, mittlere Bruchstückanzahl und Bruchstückverteilung liefern, die nur Abhängigkeiten von bekannten Eingangsgrößen (wie z.B. Durchmessern, Deformationsenergie, Weberzahl, Oberflächenenergie) enthält.

Im folgenden wird eine einfache, an die Ergebnisse der vorliegenden Simulationen angepasste, Parametrisierung vorgestellt. Diese Parametrisierung ist unabhängig von der nach Low und List und stützt sich auf die Daten aus den Simulationen zu 18 Tropfenpaaren. Die Simulationen berücksichtigen die 10 Tropfenpaare, die LL82a und MTL75 in ihren Experimenten verwendeten, sowie acht weitere (siehe Abb.3.2). Je Tropfenpaar fließen die (gewichteten) Ergebnisse für die elf verschiedenen Exzentrizitäten ein.

## 4.1 Parametrisierung der Koaleszenzeffizienz

Trägt man die aus den Simulationen gewonnenen Koaleszenzeffizienzen über der Weberzahl auf, so erkennt man eine irgendwie geartete Abhängigkeit von der Weberzahl (Definition siehe Gl.3.29). Nach einigem Probieren lässt sich eine in etwa lineare Abhängigkeit von  $We^{-0.6}$  erkennen, wie in Abb.4.1 dargestellt. Die eingetragenen Werte aus den FS3D-Simulationen zeigen einen stufigen Verlauf, da aufgrund der endlichen Zahl an simulierten Exzentrizitäten nur bestimmte diskrete Werte möglich sind. Außerhalb des in erster Näherung linearen Bereichs liegen noch die Werte der Tropfenkollisionen, die stets zu Koaleszenz führen (Koaleszenzeffizienz=1) und solche, die nie Koaleszenz zeigen (Koaleszenzeffizienz=0). Man erhält also eine Parametrisierung, die drei Bereiche



Abbildung 4.1: Parametrisierung der Koaleszenzeffizienz im Vergleich mit den Daten der Simulationen. Die Koaleszenzeffizienz ist als Funktion von  $We^{-0.6}$  (We bezeichnet die Weberzahl) aufgetragen.

unterscheidet:

$$E_{coal}(d_{gr}, d_{kl}) = \begin{cases} 0 & \text{für } We(d_{gr}, d_{kl}) > 2.4 \\ 0.28 \times We(d_{gr}, d_{kl})^{-0.6} & \text{für } 0.12 \le We(d_{gr}, d_{kl}) \le 2.4 \\ 1 & \text{für } We(d_{gr}, d_{kl}) < 0.12 \end{cases}$$
(4.1)

Berechnet man die so parametrisierte Koaleszenzeffizienz für sämtliche Tropfenpaarstöße von Tropfen mit volumenäquivalenten Durchmessern zwischen 0.01 mm und 5 mm, so erhält man die in Abb.4.2 dargestellte Verteilung. Vergleicht man diese Verteilung mit der in Abb.4.3, die von Seifert et. al (2005) anhand der Parametrisierungen von LL82b berechnet wurde, so fällt vor allem die Diskrepanz für etwa gleichgroße Tropfen auf. Nach LL82b beträgt für diese Tropfen die Koaleszenzeffizienz 0.2, nach der hier vorgestellten Parametrisierung ist sie 1. In den anderen Bereichen lassen sich tendenziell Ähnlichkeiten der beiden berechneten Verteilungen erkennen.



Abbildung 4.2: Koaleszenzeffizienz nach der neu entwickelten Parametrisierung.  $D_1$  und  $D_2$  bezeichnen die volumenäquivalenten Durchmesser der kollidierenden Tropfen.

## 4.2 Parametrisierung der mittleren Bruchstückanzahl

Es liegt nahe, zu vermuten, dass die mittlere Bruchstückanzahl (s. Gl. 2.50) von der Energieumsetzung bei der Kollision abhängt. Diese wird über die Deformationsenergie CKE ausgedrückt. Vergleicht man nun die aus den Simulationen gewonnenen mittleren Bruchstückanzahlen mit ihren Deformationsenergien CKE, so findet man für den Großteil der Tropfenpaare eine exponentielle Abhängigkeit der Form  $\left(\frac{CKE}{4\mu J}\right)^{0.66}$ . Die Tropfenpaare, für die dies nicht zutrifft, weisen alle Weberzahlen kleiner als 0.32 auf. Für diesen Bereich kann man als Parametrisierung einen linearen Zusammenhang zwischen mittlerer



coalescence efficiency (Low and List, 1982)

Abbildung 4.3: Wie Abb.4.2, jedoch für die Parametrisierung nach LL82b.

Bruchstückanzahl und Weberzahl ansetzen.

$$\overline{F}(d_{gr}, d_{kl}) = \begin{cases} 5.7689 \times We(d_{gr}, d_{kl}) & \text{für } We(d_{gr}, d_{kl}) < 0.32\\ 1.4454 \times exp\left[\left(\frac{CKE(d_{gr}, d_{kl})}{CKE_0}\right)^{0.66}\right] & \text{für } We(d_{gr}, d_{kl}) \ge 0.32\\ & \text{mit } CKE_0 = 4\mu J \end{cases}$$
(4.2)

Ein Vergleich der in Abb.4.5 dargestellten, nach der Parametrisierung von LL82b berechnete, mittleren Bruchstückanzahl als Funktion des Durchmessers des kleinen Tropfens für große Tropfen mit den Radien 0.36 cm und 0.18 cm mit der gleichen Darstellung für die neu entwickelte Parametrisierung (Abb.4.6) lässt die neue Parametrisierung wie einen Kompromiss aus den Parametrisierungen nach LL82b und der nach List und Gillespie (1976) erscheinen. Die Maximalzahl der Bruchstücke fällt bei der neuen Parametrisierung in beiden Fällen jedoch deutlich niedriger aus.



Abbildung 4.4: Mittlere Bruchstückanzahl (logarithmisch aufgetragen) als Funktion von  $\left(\frac{CKE}{CKE_0}\right)^{0.66}$ . Nach Gl.4.3 parametrisierte (**rot**, Kreise) und anhand der FS3D-Simulationen gewonnene Werte (**blau**, Sterne).

#### 4.3 Parametrisierung der mittleren Bruchstückverteilung

Da die Daten über die Bruchstückverteilungen nur aus elf Exzentrizitäten je Paar gewonnen wurden, und so relativ grob in ihrer Auflösung sind (die Daten von LL82a und MTL75 sind es aber auch), wird im folgenden lediglich eine einfache Parametrisierung der markantesten Merkmale der Verteilungen vorgestellt. Diese kann zwar nicht die Feinstruktur möglicher realer Bruchstückverteilungen wiedergeben, soll aber zumindest Aussagen über die Mittelwert der Bruchstückverteilung in den einzelnen charakteristischen Bereichen liefern. Welche Charakteristika zur Beschreibung ausgesucht wurden, ist in Abb.4.7 dargestellt.

Die charakteristischen Bereiche in den Verteilungen lassen sich an lokalen Maxima festmachen. Vier typische Gebiete, in denen solche lokalen Maxima auftreten, können identifiziert werden. Die Parametrisierung wird nun versuchen, festzustellen, für welche Tropfenkombinationen diese Maxima auftreten, und falls sie beim entsprechenden Tropfenpaar auftre-



Abbildung 4.5: Mittlere Bruchstückanzahl pro Kollision berechnet nach der Parametrisierung von LL82b als Funktion des Durchmessers des kleinen Tropfens  $D_S$  für die Kollision mit zwei bestimmten großen Tropfen ( $D_L = 0.36 cm$  und  $D_L = 0.18 cm$ ). Die Dreiecke und Kreise geben die entsprechenden von MTL75 und LL82a gemessenen Werte an. L-G und W-L bezeichnen fühere Parametrisierungen nach List und Gillespie (1976) sowie Whelpdale und List (1971).



Abbildung 4.6: Wie Abb.4.5, jedoch für die neu entwickelte Parametrisierung.

ten, den Verlauf der Bruchstückverteilungen in deren Umgebung insofern zu beschreiben, als dass die Lage des lokalen Maximas, die mittlere Höhe der Verteilung in diesem Bereich, sowie die Breite dieses Bereiches um das lokale Maximum bestimmt werden kann. Es werden also für maximal vier Bereiche innerhalb der Verteilung jeweils 3 Größen (Lage,Breite,Höhe) bestimmt.

Das lokale Maximum a) ist das bei den kleinsten Bruchstückdurchmessern. Die Verteilung in seinem Bereich deutet also auf die Entstehung besonders kleiner Bruchstücke bei der Kollision hin. Das sich in Richtung größerer Durchmesser anschließende lokale Maximum b) trat nur bei 3 der 18 Fälle auf, dieser Bereich (im folgenden "Zwischenbereich" genannt) soll dennoch berücksichtigt werden. Schließlich bleiben noch die Bereiche bei den beiden lokalen Maxima c) und d), die sich bei den Durchmessern des kleinen und des großen Ausgangstropfens befinden.



Abbildung 4.7: Exemplarische Erläuterung (anhand von Tropfenpaar c) zu den im folgenden bei der Parametrisierung berücksichtigten Bereichen (**a bis d**) innerhalb der mittleren Bruchstückverteilungen. **Rote Sterne**: Anhand der FS3D-Simulationen gewonnene mittlere Bruchstückverteilung. **Blaue Linie**: Parametrisierung nach LL82b. **Blaue Kreise**: Parametrisierung nach LL82b diskretisiert auf Klassenbreite 0.01 cm.



Abbildung 4.8: Durchmesser  $d_1$  in cm (nach Gl.4.4) als Funktion von  $\left(\frac{d_{kl}}{d_{gr}^2}\right)^{-0.4}$ .

#### 4.3.1 Parametrisierung im Bereich der kleinsten Fragmente (Bereich a)

Anhand der Daten der achtzehn in den Simulationen verwendeten Tropfenpaare lässt sich erkennen, dass sich für Deformationsenergien  $CKE < 0.9 \mu J$  kein lokales Maximum bei sehr kleinen Bruchstückdurchmessern ausbildet. Wird dieser Schwellenwert jedoch überschritten, so lässt sich der Mittelpunkt  $d_1$  der zugehörigen Verteilung gemäß

$$d_1(d_{gr}, d_{kl}) = \begin{cases} 0.0463 \left(\frac{d_{kl}}{d_{gr}^2}\right)^{-0.4} & \text{für } \left(\frac{d_{kl}}{d_{gr}^2}\right)^{-0.4} < 1.2\\ 0.0297 \left(\frac{d_{kl}}{d_{gr}^2}\right)^{-0.4} & \text{für } \left(\frac{d_{kl}}{d_{gr}^2}\right)^{-0.4} \ge 1.2 \end{cases}$$
(4.4)

berechnen (die Einheit aller Durchmesser ist cm).

Ein Vergleich des so parametrisierten Mittelpunktes mit seiner aus den Simulationen gewonnenen Lage ist in Abb.4.8 dargestellt. Mit zunehmendem Wert von  $\frac{d_{kl}}{d_{gr}^2}$  nimmt  $d_1$  leicht zu.

Nun da der Mittelpunkt dieser Verteilung bekannt ist, ist noch die Breite der Verteilung



Abbildung 4.9: Breite  $\Delta d_1$  der Veteilung in cm als Funktion von  $CKE^{0.93}$  (nach Gl.4.5).

von Interesse, d.h. wieweit sich eine gewisse "Verschmierung" des lokalen Maximums in Richtung kleinerer und größerer Bruchstückdurchmesser bemerkbar macht. Es wurde folgender Zusammenhang mit der Deformationsenergie CKE gefunden:

$$\Delta d_1(d_{qr}, d_{kl}) = 8.6 \times 10^{-3} \left[ CKE(d_{qr}, d_{kl}) \right]^{0.93}$$
 (CKE in  $\mu J$ ,  $d_1$  in cm) (4.5)

Ein Vergleich dieser Parametrisierung mit den aus den Simulationen abgeschätzten Werten ist in Abb.4.9 dargestellt.

Als letzter Parameter, um die zum lokalen Maximum bei kleinsten Bruchstückdurchmessern gehörende Verteilung in grober Näherung zu beschreiben, fehlt noch ein Wert, der die mittlere Bruchstückanzahl in diesem Durchmesserintervall angibt, also die mittlere Höhe der Verteilung definiert. Diese mittlere Höhe  $\overline{h}_{d1}$  (Einheit  $cm^{-1}$ )) kann mit Hilfe des Produktes aus überschüssiger Kollisionsenergie CKE und Oberflächenenergie Sc des



Abbildung 4.10: Mittlere Höhe  $\overline{h}_{d1}$  in  $cm^{-1}$  als Funktion von  $[Sc \times CKE]^{1/3}$  (gemäß Gl.4.6).

temporär koaleszenten Tropfensystems in folgender Form parametrisiert werden:

$$\overline{h}_{d1}(d_{qr}, d_{kl}) = 36.6797 \left[Sc \times CKE\right]^{1/3}$$
 (Sc und CKE in  $\mu J$ ,  $\overline{h}_{d1}$  in  $cm^{-1}$ ) (4.6)

Ein Vergleich von Parametrisierung und Simulationsdaten ist in Abb.4.10 dargestellt. Es fallen zwei Werte mit deutlichen Abweichungen auf, die restlichen Werte stimmen aber gut überein. Es konnte leider kein Kriterium gefunden werden, das die beiden zu den "Ausreißern" gehörenden Tropfenpaare von den restlichen abgrenzt, was eine Fallunter-scheidung innerhalb der Parametrisierung möglich gemacht hätte.

#### 4.3.2 Parametrisierung im Zwischenbereich (Bereich b)

Ein lokales Maximum zwischen dem lokalen Maximum bei den kleinsten Bruchstücken und dem bei  $d_{kl}$  (dem Durchmesser des kleineren Ausgangstropfens) konnte nur bei 3 der 18 Tropfenpaare eindeutig festgestellt werden. Aufgrund dieser Datenarmut lässt sich



Abbildung 4.11: Breite der Verteilung im Bereich b in cm als Funktion der Deformationsenergie CKE (nach Gl.4.7).

nur eine mit sehr vielen Unsicherheiten behaftete Parametrisierung für diesen Bereich aufstellen.

Parametrisiert werden wieder die Breite der Verteilung rund um das lokale Maximum, der Mittelpunkt der Verteilung und die mittlere Höhe der Verteilung. Als Bedingung für das Auftreten dieses lokalen Maximums konnte  $We(d_{gr}, d_{kl}) \times CKE(d_{gr}, d_{kl}) > 8.3 \mu J$ gefunden werden.

Die Breite  $\Delta d_2$  der Verteilung lässt sich anhand der Simulationsdaten nur auf 0.1 mm genau feststellen. Bei nur drei aus den Simulationen bekannten Werten sind die Freiheitsgrade bei der Bestimmung einer möglichen Parametrisierung natürlich sehr groß. Gewählt wurde eine einfache lineare Abhängigkeit von der Deformationsenergie CKE:

$$\Delta d_2(d_{gr}, d_{kl}) = 8.1367 \times 10^{-3} \times CKE(d_{gr}, d_{kl})$$
 (CKE in  $\mu J$ ,  $d_2$  in cm) (4.7)

Einen Vergleich der aus den Daten gewonnenen Werte und ihrer Parametrisierung zeigt Abb.4.11.
Um den Mittelpunkt der zu diesem lokalen Maximum gehörenden Verteilung zu bestimmen, wurde zunächst versucht, die Durchmesseruntergrenze zu finden, ab der ein Anstieg hin zum lokalen Maximum zuerst auftritt. Die Parametrisierung dieses Startdurchmessers  $ds_2$  kann als Abhängigkeit von der Oberflächenenergie Sc des koaleszenten Systems erfolgen:

$$d_{2,s}(d_{gr}, d_{kl}) = 0.0515 \times [Sc(d_{gr}, d_{kl})]^{-0.05} \qquad (d_{2,s} \text{ in cm, Sc in } \mu J)$$
(4.8)

Diese Parametrisierung ist aufgrund der geringen Zahl an Daten natürlich auch nur als eine erste Vermutung anzusehen. Der Vergleich mit den Daten aus den Simulationen ist in Abb.4.12 dargestellt.

Der Mittelpunkt beim Bruchstückdurchmesser  $d_2$  der zu diesem lokalen Maximum gehörenden Verteilung ist dann gegeben durch

$$d_2(d_{qr}, d_{kl}) = d_{2,s}(d_{qr}, d_{kl}) + \Delta d_2(d_{qr}, d_{kl})/2$$
 (alle Durchmesser in cm) (4.9)

Für die mittlere Höhe  $\overline{h}_{d2}$  dieser Verteilung wurde als Parametrisierungsansatz eine Abhängigkeit von der Wurzel der Deformationsenergie CKE verwendet. Einen Vergleich von Parametrisierung und aus den Simulationen gewonnenen Daten zeigt Abb.4.13.

$$\overline{h}_{d2}(d_{gr}, d_{kl}) = 11.1322 \sqrt{CKE} \qquad (\overline{h}_{d2} \text{ in } cm^{-1}, \text{ CKE in } \mu J)$$
(4.10)

Um eine insgesamt bessere Parametrisierung des "Zwischenbereiches" erreichen zu können, wäre die Simulation weiterer Tropfenkollisionen, die in ihrer Bruchstückverteilung das zugehörige lokale Maximum zeigen, vonnöten.

#### 4.3.3 Parametrisierung im Bereich c

Im Gegensatz zum vorangegangenen lokalen Maximum sind anhand der Ergebnisse der FS3D-Simulationen mehr Daten über die Verteilung rund um das lokale Maximum beim Durchmesser  $d_{kl}$  (dem Durchmesser des kleineren Ausgangstropfens) zu gewinnen. So erlauben neun der 18 zu den Tropfenkollisionen gehörenden Bruchstückverteilungen das Ablesen einer Breite dieser Verteilung (wenn auch nur auf 0.1 mm genau), aus 10 von 18 lässt sich auf die mittlere Höhe der Verteilung in diesem Bereich schließen.

Der Mittelpunkt  $d_3$  dieser Verteilung ist stets der Durchmesser des kleineren Ausgangs-



Abbildung 4.12: Startdurchmesser der Bruchstückverteilung im Bereich b in cm als Funktion von  $Sc^{-0.05}$  (nach Gl.4.8).

tropfens  $d_{kl}$ .

Für die Breite der Bruchstückverteilung bei  $d_{kl}$  wurde eine Parametrisierung vorgenommen, die zwei Bereiche unterscheidet. In beiden Bereichen ist die Breite abhängig von  $Sc^{0.6}$  (Sc ist die Oberflächenenergie des temporär koaleszenten Tropfensystems, siehe Gl.2.23). Die beiden Bereiche werden durch einen Schwellenwert der Oberflächenergie Sc getrennt, die Parametrisierungen in den jeweiligen Bereichen unterscheiden sich der Proportionalitätskonstanten nach.

$$\Delta d_3(d_{gr}, d_{kl}) = \begin{cases} 0.0235 \left[ Sc(d_{gr}, d_{kl}) \right]^{0.6} & \text{für } Sc(d_{gr}, d_{kl}) < 4\mu J \\ 0.0097 \left[ Sc(d_{gr}, d_{kl}) \right]^{0.6} & \text{für } Sc(d_{gr}, d_{kl}) \ge 4\mu J \end{cases}$$
(4.11)

Sc ist in  $\mu J$  einzusetzen. Man erhält  $\Delta d_3$  in cm.

Dass die aus den Simulationen gewonnenen Breiten sich bei bestimmten Werten häufen, und so in Abb.4.14 eine Stufenform entsteht, liegt daran, dass die Bestimmung der Breite



Abbildung 4.13: Mittlere Höhe  $\overline{h}_{d2}$  der Bruchstückverteilung im Bereich b in  $cm^{-1}$  (nach Gl.4.10) als Funktion von  $\sqrt{CKE}$ .

der Verteilung nur auf 0.1 mm genau erfolgen kann. Die Parametrisierung schlägt eine Entzerrung dieser Stufenform auf eine Gerade vor.

Um die mittlere Höhe  $\overline{h}_{d3}$  der Bruchstückverteilung rund um  $d_{kl}$  in  $cm^{-1}$  zu parametrisieren, wird folgender Ansatz verwendet:

$$\overline{h}_{d3}(d_{gr}, d_{kl}) = \begin{cases} 13.439 \times \left[ d_c(d_{gr}, d_{kl})^2 \times We(d_{gr}, d_{kl}) \right]^{-0.5} & \text{für } d_{kl} > 0.1 \, cm \\ 50 & \text{für } d_{kl} \le 0.1 \, cm \end{cases}$$
(4.12)

Dabei bezeichnet die Größe  $d_c$  den volumenäquivalenten Durchmesser des temporär koaleszenten Systems in cm (siehe Gl.2.24). Unterschreitet der Durchmesser des kleinen Tropfens  $d_{kl}$  den Wert 1 mm, so ist die mittlere Höhe der Verteilung rund um  $d_{kl}$  also stets  $50cm^{-1}$ . Offenbar bewahren diese kleinen Tropfen bei der Kollision mit anschließendem Zerfall des temporär-koaleszenten Systems öfter ihre Identität als größere. Es kommt also im Fall nicht permanenter Koaleszenz zu einem geringeren Massenaustausch mit dem großen Ausgangstropfen. Für Tropfenkollisionen mit einem kleinen Ausgangstrop-



Abbildung 4.14: Breite  $\Delta d_3$  in cm (nach Gl.4.11) der Verteilung bei c als Funktion von  $Sc^{0.6}$ .

fen, dessen Durchmesser 1 mm überschreitet, spielen der (vol.äquivalente) Durchmesser des temporär-koaleszenten Tropfensystems und die Weberzahl für die mittlere Höhe der Verteilung rund um  $d_{kl}$  eine Rolle.

Das Ergebnis dieser Parametrisierung im Vergleich zu den aus den Simulationsdaten ermittelten Werten in Abb.4.15 dargestellt.

#### 4.3.4 Parametrisierung im Bereich d

Als letztes deutliches Merkmal der Bruchstückverteilungen bleibt noch eine Parametrisierung des Bereiches bei den lokalen Maxima mit Durchmesser  $d_{gr}$  des größeren Ausgangstropfens.

Der Mittelpunkt dieser Verteilung liegt stets bei  $d_{qr}$ .

Um eine Parametrisierung der Breite dieser Bruchstückverteilung zu erreichen, wurden die Daten der Simulationsläufe mit immer kleineren Durchmesserintervallen ausgewertet. Es zeigte sich, dass die zu diesem lokalen Maximum gehörenden Verteilungen in den meisten



Abbildung 4.15: Mittlere Höhe in cm der Bruchstückverteilung bei c (nach Gl.4.12) als Funktion von  $\left[d_c(d_{gr}, d_{kl})^2 \times We(d_{gr}, d_{kl})\right]^{-0.5}$ .

Fällen sehr schmal (bezogen auf den Durchmesserbereich) sind, d.h. dass Bruchstücke, deren Durchmesser fast genau  $d_{gr}$  entspricht, nach der Kollision oft vorkommen. Eine Parametrisierung erfolgt erneut über eine Unterscheidung zweier Bereiche. In beiden Bereichen ist die Breite der Verteilung linear abhängig vom Verhältnis des Durchmessers des kleinen Tropfens  $d_{kl}$  zum Durchmesser des temporär koaleszenten Systems  $d_c$ . Ab Deformationsenergieen  $CKE \ge 9\mu J$  ist die Proportionalitätskonstante deutlich größer gewählt, da die für diesen Bereich aus den Simulationen gewonnenen Werte erheblich größer ausfallen. Die Parametrisierung lautet wie folgt:

$$\Delta d_4(d_{gr}, d_{kl}) = \begin{cases} 0.0059 \frac{d_{kl}}{d_c} & \text{für } CKE < 9\mu J \\ 0.0152 \frac{d_{kl}}{d_c} & \text{für } CKE \ge 9\mu J \end{cases}$$
(4.13)

Die Einheit aller Durchmesser d ist cm.

Ein Vergleich der aus den Simulationsdaten und der anhand der Parametrisierungen ge-



Abbildung 4.16: Breite in cm der Bruchstückverteilung bei d als Funktion von  $d_{kl}/d_c$  (nach Gl.4.13).

wonnenen Werte für die Breite der Verteilung ist in Abb.4.16 dargestellt.

Leider konnte für die mittlere Höhe  $\overline{h}_{d4}$  der Bruchstückverteilung bei  $d_{gr}$  keine zufriedenstellende Parametrisierung anhand der Kollisionskenngrößen gefunden werden. Daher wurde aus der Not eine Tugend gemacht, und die Höhe  $\overline{h}_{d4}$  für jedes Tropfenpaar so bestimmt, dass die Masse aller Bruchstücke, die sich aus der parametrisierten Bruchstückverteilung des durchschnittlichen Zerfall-Resultats einschließlich der Verteilung bei  $d_{gr}$ ergibt, nur geringfügig (Abweichung höchstens 3%) von der Masse der beiden Ausgangstropfen abweicht. So kann "nebenbei" auch noch das Ziel der Massenerhaltung bei dieser Parametrisierung des stoßinduzierten Regentropfenzerfalls (in guter Näherung) erreicht werden.

### 4.3.5 Gesamte Parametrisierung

Die Parametrisierung der gesamten mittleren Bruchstückverteilungsfunktion setzt sich aus den vier Parametrisierungen für die Bereiche rund um die charakteristischen lokalen Maxima zusammen.

Falls es Bruchstückdurchmesser gibt, bei denen mehrere der zu den lokalen Maxima gehörenden Parametrisierungen mittlere Bruchstückanzahlen größer Null liefern, so gilt an diesen Stellen der aus den betreffenden Parametrisierungen gebildete Mittelwert.

Desweiteren werden sämtliche mittlere Bruchstückverteilungsfunktionen ab dem volumenäquivalenten Durchmesser des temporär koaleszenten Systems  $d_c(d_{gr}, d_{kl})$  auf Null gesetzt, da aufgrund der Massenerhaltung keine Bruchstücke resultieren können, deren volumenäquivalenter Durchmesser größer als  $d_c$  ist.

Ist die Koaleszenzeffizienz  $E_{coal}(d_{gr}, d_{kl})$  eines Tropfenpaares 1, so wird die gesamte mittlere Bruchstückverteilung auf Null gesetzt, da die Kollision dieses Tropfenpaares dann stets in einer Koaleszenz beider Ausgangstropfen mündet.

In den Abbildungen 4.17 bis 4.19 sind die so parametrisierten mittleren Bruchstückverteilungen der Tropfenpaare, auf denen die Parametrisierung von LL82b aufbaut, sowie der acht weiteren Tropfenpaare, die die Menge der bei diesem Parametrisierungsversuch berücksichtigten Kollisionen vervollständigen, dargestellt. Ebenfalls eingezeichnet sind die aus den FS3D-Simulationen gewonnenen Daten, anhand derer die Parametrisierung vorgenommen wurde, sowie - als Vergleich - die Parametrisierungen nach Low und List.

Die neuentwickelte Parametrisierung ist zwar "gröber" als die Parametrisierung nach LL82b, passt aber bis auf wenige Ausnahmen deutlich besser zu den aus den FS3D-Simulationen gewonnenen Bruchstückverteilungen. Im Gegensatz zur Parametrisierung nach LL82b bleibt die Gesamtmasse erhalten.

Die deutlichsten Unterschiede liegen in der Parametrisierung der zum "Überbleibsel" des großen Ausgangstropfens gehörenden Verteilung, hier lässt sich in der neuen Parametrisierung eher eine Ähnlichkeit zu dem Vorschlag von Brown (1997) einer Delta-Funktion anstelle einer Gauß-Funktion zur Parametrisierung dieses Bereiches erkennen. Auch bei der Parametrisierung im Bereich der kleinsten Bruchstücke unterscheiden sich die Parametrisierung nach LL82b und die neu entwickelte zum Teil erheblich. Die aus den FS3D-Daten abgeleitete Parametrisierung zeigt eine Verschiebung des zugehörigen Maximums zu noch kleineren volumenäquivalenten Bruchstückdurchmessern hin, als es die Parametrisierung nach LL82b - auch aufgrund ihrer in diesem Bereich nicht mehr auflösenden fotographischen Messungen (LL82a, MTL75)- vorsehen.

Der größte Schwachpunkt der neuentwickelten Parametrisierung gegenüber der Parametrisierung nach LL82b ist, dass sie aus Stufenfunktionen zusammengesetzt ist, also aufgrund vorhandener Sprünge in den Bruchstückverteilungen nicht stetig differenzierbar ist, was bei der weiteren Implementierung in Wolken- bzw. Regen-Modellen problematisch sein



Abbildung 4.17: Mittlere Anzahl von Bruchstücken in  $cm^{-1}$  als Funktion des Bruchstückdurchmessers in cm. Eigene Parametrisierungen (**grün**), Parametrisierung nach LL82b (**blau**) sowie mittlere aus den Simulationen gewonnene Bruchstückanzahlen je 0.1 mm Durchmesserintervall (**rot**) für die sechs deformationsenergieärmsten der 18 Tropfenpaare (siehe Tab.3.1).



Abbildung 4.18: Wie Abb.4.17, jedoch für die Tropfenpaare im mittleren Deformationsenergiebereich.



Abbildung 4.19: Wie Abb.4.17, jedoch für die sechs deformationsenergiereichsten Trop-fenpaare.

kann. Hier sind noch weitere Anpassungen - und am besten auch weitere Simulationen zur Verfeinerung derselben - vonnöten, um eine bessere "mathematische bzw. numerische Handhabung" zu erreichen.

## 5 Einfluss der Exzentrizität auf das Kollisionsresultat - ein Beispiel

Im Gegensatz zu den Experimenten von MTL75 und LL82a kann in dieser Arbeit auch der Einfluss der Exzentrizität auf den Stoßvorgang untersucht werden, da diese über elf Werte variiert wurde. Daher sind auf den Seiten 83 bis 86 Momentaufnahmen (die jeweiligen Zeitpunkte sind am linken Rand angegeben) der Berechnungen mit FS3D für den Stoß des Tropfenpaares b (siehe Tab.3.1) unter Berücksichtigung elf unterschiedlicher Exzentrizitäten  $\epsilon$  dargestellt.

Für den Fall des nahezu zentralen Stoßes ( $\epsilon = 0.025$ ) bildet sich nach dem Stoß zunächst eine nahezu symmetrische Scheibe ("Disk") aus, die sich durch Schwingungen anschließend wieder zusammenzieht ohne zu reißen. Als Ergebnis entsteht aus den beiden Ausgangstropfen ein neuer, größerer Tropfen (permanente Koaleszenz).

Im sich daran nach außen anschließenden Exzentrizitätsbereich bis etwa  $\epsilon = 0.4$  ist die entstehende Scheibe asymmetrisch verformt (auf der Stoßseite leicht nach oben verzerrt). Da sie der von unten anströmenden Luft eine große Angriffsfläche bietet, wird sie beim Fallen immer weiter "in die Länge gezogen" und somit auch immer flacher. Aufgrund dieser zunehmend "ungünstigen" aerodynamischen Form und des Fehlens ausreichend entgegenwirkender Oszillationen reißt die Scheibe schließlich auf. Dabei bildet sich durch das - durch die Oberflächenspannung bedingte - Zusammenziehen der neuen Tropfenoberfläche eine Oberflächenwelle aus. Sie breitet sich von außen zum Zentrum des koaleszenten Tropfensystems hin aus und hat schließlich das Ablösen eines oder mehrerer Tropfen auf der in der Horizontalen dem Stoß gegenüberliegenden Seite zur Folge. Dieser Zerfallstyp ähnelt dem konzeptionellen Modell des Disk-Breakup nach MTL75 und LL82a.

Für die Exzentrizitätswerte  $\epsilon = 0.4$  bis  $\epsilon = 0.7$  reicht der Impuls der Oberflächenwelle nicht aus, um die Oberflächenspannung zu überwinden, und Tropfen auf der anderen Seite des Tropfensystems abzulösen. Zudem erreicht der Winkel des nach oben verzerrten Teils der Scheibe gegenüber der Horizontalen vor dem Auseinanderreißen Werte >  $ca.45^{\circ}$ . Der Zerfall in diesem Bereich lässt sich nach der von MTL75 und LL82a entwickelten Einteilung nicht eindeutig klassifizieren. Ihrer Einteilung nach sollte hier Sheet-Breakup auftreten. Allerdings scheint es sich eher um eine Übergangsform zwischen Disk-Breakup und Filament-Breakup zu handeln.

Im Bereich der streifenden Stöße ( $\epsilon = 0.8$  bis  $\epsilon = 0.975$ ) ist die Interaktionszeit der Tropfen erheblich kürzer. Es bildet sich nach dem Stoß ein dünner verbindender (Wasser-) Faden aus, der nach kurzer Zeit wieder reißt. Die Anzahl der entstehenden Bruchstücke ist deutlich niedriger. Diese Art des Zerfalls kommt der Beschreibung des Filament-Breakup bei MTL75 und LL82a sehr nahe.

Anhand dieser Betrachtungen lassen sich drei Zerfallstypen charakterisieren:

- Disk-Breakup mit Ausbildung einer Oberflächenwelle beim Aufreißen der Scheibe, die auch auf der in der Horizontalen dem Stoß abgewandten Seite Bruchstücke auszulösen vermag.
- 2. Stretched-Disk-Breakup im Übergangsbereich zwischen eindeutigem Disk- und eindeutigem Filament-Breakup mit im Stoßbereich stark in der Vertikalen verzerrter Scheibe. Das Entstehen von Bruchstücken beschränkt sich dabei in der Horizontalen auf die Seite, wo die Kollision stattfand. Die Oberflächenwelle führt nicht zum Auslösen weiterer Bruchstücke auf der (horizontal) gegenüberliegenden Seite.
- 3. Filament-Breakup entsprechend der Beschreibung von MTL75 und LL82a.

Es stellt sich die Frage, ob sich diese drei Typen auch in der aus den jeweiligen Stößen resultierenden Bruchstückanzahl widerspiegelt. Um dies zu untersuchen, ist in Abb.5.1 für das untersuchte Tropfenpaar die Bruchstückanzahl als Funktion der Exzentrizität aufgetragen.

Tatsächlich lassen sich auch hier die verschiedenen Regime erkennen. Der Bereich des Disk-Breakup ist - ausgehend vom Fall der permanenten Koaleszenz für den nahezu zentrischen Stoß - gekennzeichnet durch eine schnelle Zunahme mit der Exzentrizität. Der jähe Rückgang der Bruchstückanzahl vom Maximum bei  $\epsilon = 0.3$  auf den Wert bei  $\epsilon = 0.4$  trennt die Regime des Disk- und des Stretched-Disk-Breakup. Den sich anschließenden Bereich des Stretched-Disk-Breakup kennzeichnet eine nahezu konstante Bruchstückanzahl. Die Bruchstückanzahl im Falle des Filament-Breakup ist demgegenüber nochmals deutlich niedriger. Sie nimmt mit zunehmender Exzentrizität etwa linear ab, bis sie schließlich 1 erreicht.











Abbildung 5.1: Anzahl der Bruchstücke als Funktion der Exzentrizität für das Tropfenpaar b (Kenngrößen siehe Tab.3.1).

Es bleibt im Rahmen dieses Beispiels noch zu klären, ob die verschiedenen Zerfallstypen auch unterschiedliche Bruchstückverteilungen zur Folge haben. Dazu ist in Abb.5.2 die Bruchstückanzahl als Funktion des Durchmessers für alle 11 Exzentrizitätswerte  $\epsilon$  diskret aufgetragen.

Es lassen sich folgende Charakteristika der drei Bereiche ausmachen:

- Stöße im zum Disk-Breakup gehörenden Exzentrizitätsbereich liefern Bruchstückverteilungen, in denen sich kein Bruchstück in der Größe des großen Ausgangstropfens wiederfinden lässt. Stattdessen treten Bruchstücke auf, deren volumenäquivalente Durchmesser zwischen denen der beiden Ausgangstropfen liegen. Für die restlichen Exzentrizitätswerte bleibt dieser Bereich der Verteilung stets leer.
- Im Bereich des Stretched-Disk-Breakup ist dagegen ein Bruchstück in Größe des großen Ausgangstropfens erkennbar. Die Maximalwerte der diskreten Bruchstückverteilung sind weniger als halb so groß wie das absolute Maximum, das im Disk-



Abbildung 5.2: Anzahl der Bruchstücke als Funktion des Durchmessers in cm bei Stößen mit verschiedenen Exzentrizitäten (Kennzeichnung: Kreisfarbe/größe).

Breakup-Bereich auftritt.

 Bei der Auswertung im Filament-Breakup-Bereich tritt in der Bruchstückverteilung neben dem großen auch stets der kleine Ausgangstropfen in kaum veränderter Größe auf.

Den in diesem Abschnitt durchgeführten exemplarischen Klassifikationen nach lassen sich somit drei verschiedene Zerfallstypen, die sich sowohl ihrem Erscheinungsbild, ihrer Bruchstückanzahl, als auch ihrer Bruchstückverteilung nach unterscheiden, erkennen: Disk-Breakup, Stretched-Disk-Breakup und Filament-Breakup.

Der Anwendung dieser Klassifizierung auf die Stöße der restlichen 17 Tropfenpaare und damit dem Nachweis ihrer Allgemeingültigkeit konnte in dieser Arbeit nicht mehr nachgegangen werden. Interessant wäre in diesem Zusammenhang auch, zu untersuchen, welche Kenngrößen das Auftreten der unterschiedlichen Zerfallstypen festlegen.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird eine numerische Untersuchung des stoßinduzierten Tropfenzerfalls präsentiert. Dabei wird ein Vergleich mit der Parametrisierung desselben nach Low und List (1982b), die den Zerfallsprozess experimentell untersucht und die Kenngrößen mathematisch gefasst haben, angestellt und eine einfache eigene Parametrisierung anhand der Simulationsdaten entwickelt.

Zur Simulation wurde das am Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR) an der Universität Stuttgart zur Simulation von Zweiphasenströmungen entwickelte FS3D-Programm verwendet. Neben den von LL82b betrachteten zehn Tropfenpaaren werden zusätzlich acht weitere berücksichtigt, um eine gleichmäßige Überdeckung des Parameterbereichs zu erreichen. Bei den Berechnungen wurden auch elf verschiedene Exzentrizitäten vorgegeben, was bei den Experimenten von LL82a und MTL75 nicht möglich war. Es zeigte sich, dass die Verwendung der impliziten Zeitdiskretisierung nach Crank-Nicolson zur Simulation des stoßinduzierten Tropfenzerfalls besser geeignet ist, als das Euler-Vorwärts Verfahren. Die numerischen Experimente wurden so durchgeführt, dass die Trajektorien zweier, im Schwerefeld der Erde fallender Tropfen, und deren Kollision berechnet wurde. In Abhängigkeit von Deformationsenergie, überschüssiger Oberflächenenergie und Exzentrizität des Stoßes ergaben sich nach der Kollision entweder ein permanent koaleszentes Tropfensystem oder mindestens zwei Bruchstücke.

Das mittlere Kollisionsergebnis jedes Tropfenpaares wird durch eine Mittelung der mit der Eintrittswahrscheinlichkeit gewichteten Ergebnisse der verschiedenen Exzentrizitätswerte berechnet. Dabei wird eine Gleichverteilung der Tropfenkollisionen pro Fläche vorausgesetzt. Ausgewertet werden Koaleszenzeffizienz, mittlere Fragmentzahl, und die mittlere Bruchstückverteilung. Die volumenäquivalenten Durchmesser der Bruchstücke werden mittels eines "Region Growing"-Algorithmus ermittelt, der zusammenhängende Gebiete innerhalb der dreidimensionalen Wasser-Luft-Verteilungen findet.

Der Vergleich der aus den FS3D-Berechnungen gewonnenen Daten mit den für diese 18 Tropfenkombinationen angewandten Parametrisierungen nach Low und List (1982b) ergibt folgendes:

Die nach Low und List (1982b) parametrisierten Koaleszenzeffizienzwerte sind in der

Mehrheit der Tropfenpaare kleiner als die aus den Simulationen abgeleiteten. Besonders deutlich werden Abweichungen im Bereich der Extrema, d.h. wenn die Koaleszenzeffizienz nach Low und List 1 oder 0 (permanente Koaleszenz oder nie auftretende Koaleszenz) sein sollte.

Auch die berechneten mittleren Bruchstückanzahlen liegen unter denen der Parametrisierung nach Low und List (1982b).

Der Vergleich der aus den Simulationsergebnissen abgeleiteten Bruchstückverteilungen mit den nach Low und List parametrisierten ergab, dass sich die Verteilungen ihrer groben Struktur nach ähneln. Es gibt stets lokale Maxima im Bereich der Durchmesser der beiden Ausgangstropfen, sowie bei den meisten Tropfenpaaren noch ein weiteres lokales Maximum bei Bruchstücken, die kleiner sind als der Durchmesser des kleinen Ausgangstropfens. Im Detail fallen jedoch Abweichungen auf. Die zwei deutlichsten Unterschiede sind:

- Die Verteilung im Bereich des Durchmessers des großen Ausgangstropfens scheint den Simulationen nach eher einer Delta-Funktion als einer Gauß-Kurve (wie bei Low und List 1982b) zu folgen. Dieser Befund deckt sich mit theoretischen Ergebnissen von Brown (1997).
- Im Bereich der kleinsten Bruchstücke ist das anhand der Simulationen gewonnene lokale Maximum in Richtung kleinerer als nach den Parametrisierungen vorgesehener Durchmesser verschoben, meistens fällt es auch höher aus.

Aufgrund der Unterschiede zwischen Simulationsergebnissen und der Parametrisierung nach Low und List (1982b) wurde eine einfache eigene Parametrisierung von Größen, die den stoßinduzierten Tropfenzerfall beschreiben, entwickelt. Die Koaleszenzeffizienz wird für einen Weberzahlbereich zwischen We = 0.12 und We = 2.4 als lineare Abhängigkeit von  $We^{-0.6}$  parametrisiert. Für Tropfenpaare mit We < 0.12 ist die Koaleszenzeffizienz Null, d.h. es tritt nie Koaleszenz auf, Tropfenpaare mit We > 2.4 zeigen stets permanente Koaleszenz (Koaleszenzeffizienz=1).

Die Parametrisierung der Fragmentzahl wurde je nach Weberzahl des Tropfenpaares in zwei Bereiche aufgeteilt, die Grenze liegt bei We = 0.32. Für kleinere Weberzahlen wird eine lineare Abhängigkeit von der Weberzahl vorgeschlagen, für größere Weberzahlen eine exponentielle Abhängigkeit von  $CKE^{0.66}$ .

Um die Bruchstückverteilungen zu parametrisieren, wurden einfache Parametrisierungsansätze für vier Bereiche innerhalb des Durchmesserbereiches der Bruchstücke entworfen, in denen lokale Maxima auftreten. Die vier Bereiche sind: Zwei bei den lokalen Maxima entsprechend der Durchmesser der Ausgangstropfen, ein Bereich rund um das lokale Maximum bei den kleinsten Fragmentdurchmessern, sowie ein Bereich zwischen letztgenanntem und dem Durchmesser des kleinen Ausgangstropfens.

Die Parametrisierungen beschreiben die jeweiligen lokalen Maxima als Histogramm (Stufenfunktion), dessen Werte durch die Intervallmitte und -breite sowie seine mittlere Höhe gegeben sind. Wenn sich die Definitionsbereiche mehrerer Stufenfunktionen überschneiden, wird in diesen Bereichen ihr Mittelwert zur Parametrisierung herangezogen. Die Massenerhaltung wird über eine iterative Anpassung der mittleren Höhe der zum lokalen Maximum beim Durchmesser des großen Ausgangstropfens gehörenden Verteilung gewährleistet.

Die entwickelte grobe Parametrisierung ist als erster Versuch anzusehen, da ihrer Ableitung noch zu wenige Daten zugrunde liegen und sie durch ihre Stufenform nicht gut geeignet ist, in Wolkenmodelle übernommen zu werden. Zudem beziehen sich die hier vorgestellten Ergebnisse nur auf eingeschränkte Radienbereiche der kollidierenden Tropfen. Für zukünftige Untersuchungen und Parametrisierungen wäre es interessant, den Radienbereich zu erweitern.

Ein kritischer Punkt in Bezug auf die Unterschiede zwischen den experimentell und den per Simulationen erhaltenen Daten ist die in den Simulationen nicht voll ausgeprägte Umströmung der fallenden Tropfen, da hier wegen der dann nötigen sehr großen CPU-Zeit Abstriche gemacht werden mussten. Ohne voll ausgeprägte Umströmung ist es unwahrscheinlich, dass ein kleiner Tropfen um den großen Tropfen herumgeführt wird, oder in dessen Lee aufgrund der vorhandenen Wirbel doch noch eingefangen wird. Hieraus könnten vor allem Unterschiede in den Koaleszenzeffizienzen, bzw. eigentlich in erster Linie in den Kollektionsffizienzen (welche sich bei der Auswertung nur schwer trennen lassen) resultieren. Auch die angenommene Gleichverteilung der Kollisionen pro Fläche muss in der Realität nich zutreffen.

Dem Problem der kaum ausgebildeten Umströmungen der fallenden Tropfen könnte man sich - um CPU-Zeit zu sparen - zunächst theoretisch nähern. So wäre z.B. eine je nach Exzentrizität des Stoßes veränderte Gewichtung des entsprechenden Stoßresultates denkbar. In Bezug auf die Berechnung der Koaleszenzeffizienz könnte als Gewichtungsfaktor die Kollisionseffizienz eingeführt werden, wie sie z.B. Lin und Lee (1975) herleiten.

Ein weiterer Unterschied zwischen Simulation und Realität ergibt sich durch die begrenzte räumliche Auflösung der Simulationen, denn so kann die Luftschicht, die die fallenden Tropfen umgibt und die für eine temporären Koaleszenz erst durchbrochen werden muss, nur unzureichend wiedergegeben werden.

Auch die Oszillationen, die Tropfen in der Realität zeigen, werden in den Simulationen

aufgrund der geringen "Vorlaufzeit" vor der Kollision nicht ausreichend berücksichtigt. Die Tropfen in den Experimenten von LL82a und MTL75 zeigen dagegen Oszillationen mit 50 Hz. Eine längere Anfangsfallstrecke bei den FS3D-Simulationen könnte das Einschwingverhalten der Tropfen berücksichtigen und eine Untersuchung des Einflusses der Oszillationen ermöglichen. LL82a sehen jedoch keinen Anhaltspunkt für einen Einfluss der bei den Experimenten vor den Kollisionen auftretenden Tropfenoszillationen auf die Ergebnisse der Kollisionen. Dies lässt vermuten, dass sich diese Oszillationen evtl. sogar vernachlässigen lassen.

Anhand weiterer Simulationen sollte es möglich sein, die Parametrisierung weiter zu verfeinern. Insbesondere eine Transformation der Stufenfunktionen auf dann sinnvoll erscheinende Verteilungsfunktionen wäre ein deutlicher Fortschritt. Einer Implementierung der Parametrisierung in ein Boxmodell oder in ein Wolkenmodell stünde dann nichts mehr im Wege, und es ließen sich Aussagen über Regentropfengleichgewichtsverteilungen und Auswirkungen des stoßinduzierten Zerfalls auf Niederschlagsprozesse ableiten.

Da die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen pro Tropfenpaar stets für elf Exzentrizitätswerte durchgeführt wurden, wurde anhand eines Tropfenpaares exemplarisch der Einfluss der Exzentrizität untersucht. Es zeigte sich, dass sich drei Zerfallstypen ausmachen lassen: Disk-Breakup, Stretched-Disk-Breakup und Filament-Breakup. Diese drei Formen lassen sich sowohl nach ihrem Erscheinungsbild, nach ihrer Bruchstückanzahl als auch anhand ihrer Bruchstückverteilung unterscheiden. Dieser Befund deckt sich größtenteils mit den theoretischen Konzepten von MTL75 und LL82ab. Allerdings wurde anstelle des Sheet-Breakup (nach MTL75 und LL82ab) der Stretched-Disk-Breakup eingeführt, bei dem es sich um einen Übergang zwischen Disk- und Filamenttyp handelt. Eine Ausweitung dieses Klassifizierungsansatzes auf weitere Tropfenpaare sollte durchgeführt werden - einerseits um das Konzept zu überprüfen, andererseits um herauszufinden, welche Kenngrößen der Kollisionen das Auftreten der verschiedenen Formen bedingen. Hieraus könnte sich (eventuell dem Konzept von LL82b folgend) auch eine Parametrisierung des stoßinduzierten Zerfalls gewinnen lassen.

Nicht zuletzt ist natürlich die weitere experimentelle Untersuchung des stoßinduzierten Zerfalls von Regentropfen von großem Interesse. Neue Messmethoden vor allem im Bereich der Lasertechnik sollten hier von Vorteil sein. Theorie, Modellierung und Experimente könnten sich gerade aufgrund der jüngsten Entwicklungen bestens ergänzen.

# Anhang

## A Parametrisierungen nach Low und List

Im folgenden sind die Parametrisierungen nach LL82b dargestellt. Sie wurden weitgehend Mayer (2000) entnommen. Sämtliche Durchmesser D sind in cm einzusetzen, sämtliche Energien (CKE, $S_c$ , $S_T$ ) in Joule.

## A.1 Filament-Breakup bei Low und List

Bei dieser Zerfallsart lassen sich die zwei Ausgangstropfen unter den entstandenen Bruchstücken weiterhin identifizieren. Daher erfolgt die Beschreibung dieser zwei Fragmente in der Bruchstückdichtefunktion über zwei angepasste Normal-Verteilungen (Gauß-Funktionen). Daneben gibt es noch eine Verteilungsfunktion, die die Verteilung der ebenfalls enstehenden Satellitentropfen beschreibt. Sowohl für die Bruchstückdichtefunktion des großen Tropfens  $P_{f1}(D)$ , als auch für die Bruchstückdichtefunktion des kleinen Tropfens  $P_{f2}(D)$  muss dabei folgende Bedingung erfüllt bleiben:

$$\int_{D_0=0}^{D_{coal}} P_{f1}(D) \, dD = \int_{D_0=0}^{D_{coal}} P_{f2}(D) \, dD = 1 \tag{A.1}$$

Der Grund hierfür ist, dass die mittlere Fragmentzahl, die sich aus der den großen bzw. kleinen Tropfen beschreibenden Bruchstückdichtefunktion ergibt, natürlich 1 sein muss. Als Obergrenze wurde  $D_{coal}$  gewählt, da die Tropfenfragmente nach der Kollision nicht größer als der Durchmesser des koaleszierten Systems  $D_{coal}$  sein können. Der Durchmesser des koaleszierten Systems ist hierbei gegeben durch

$$D_{coal} = \left(D_L^3 + D_S^3\right)^{1/3} \qquad (A.2)$$

Die Bruchstückdichtefunktionen für den großen und den kleinen Tropfen lassen sich nach Low und List wie folgt parametrisieren:

$$P_{fk}(D) = H_{fk} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{D - \mu_{fk}}{\sigma_{fk}}\right)^2\right]$$
 mit:  $k = 1, 2$  (A.3)

 $\mu_{fk}$  steht hierbei für den Medianwert der Dichtefunktion, er nimmt für k = 1, 2 die Werte  $\mu_{f1} = D_L$  und  $\mu_{f2} = D_S$  an. Die Standardabweichung von  $P_{fk}$  ist durch  $\sigma_{fk}$  gegeben. Die Größe  $H_{fk}$  entspricht dem Funktionswert  $P_{fk}$  beim Medianwert  $\mu_{fk}$ .

Für die Anpassung der Parameter gehen Low und List (1982b) folgenden Weg: Aus den experimentellen Daten leiten sie folgende Funktionen für  $H_{fk}$  ab

$$H_{f1} = 50.8 D_L^{-0.718}$$
 und  $H_{f2} = 4.18 D_S^{-1.17}$  , (A.4)

und passen danach die Standardabweichungen  $\sigma_{fk}$  so an, dass (A.1) erfüllt wird. Dazu wird  $P_{fk}$  in Gleichung (A.1) eingesetzt und das Integral mit Hilfe der Gauß'schen Fehlerfunktion, definiert als

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$
 (A.5)

ausgedrückt. Man erhält die implizite Gleichung für  $\sigma_{fk}$ 

$$\frac{H_{fk}\sqrt{2\pi\sigma_{fk}}}{2}\left[erf\left(\frac{D-\mu_{fk}}{\sqrt{(2)\sigma_{fk}}}\right) - erf\left(\frac{\mu_{fk}-D_0}{\sqrt{(2)\sigma_{fk}}}\right)\right] = 1 \qquad , \tag{A.6}$$

die man z.B. mittels der Fixpunktiteration

$$\sigma_{f1,i+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} H_{f1}^{-1} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_{coal} - D_L}{\sigma_{f1,i}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_L - D_0}{\sigma_{f1,i}} \right) \right]^{-1} (A.7)$$
  
$$\sigma_{f2,i+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} H_{f2}^{-1} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_{coal} - D_S}{\sigma_{f2,i}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_S - D_0}{\sigma_{f2,i}} \right) \right]^{-1} (A.8)$$

mit den Iterationsstartwerten

$$\sigma_{f_{1,1}} = H_{f_1}^{-1}$$
 und  $\sigma_{f_{2,1}} = \left(\sqrt{2\pi} H_{f_1}\right)^{-1}$  (A.9)

lösen kann.

Desweiteren treten beim Filament-Breakup neben den zwei "Überbleibseln" der beiden Ausgangstropfen auch noch Satellitentropfen auf. Low und List beschreiben diese mit Hilfe einer Log-Normal-Verteilung der Form

$$P_{f3} = \frac{H_{f3}}{D} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln(D) - \mu_{f3}}{\sigma_{f3}}\right)^2\right] \quad . \tag{A.10}$$

Die Größe  $H_{f3}$  gibt den Maximalwert der Verteilung an, die Standardabweichung  $\sigma_{f3}$  ist ein

Maß für deren Breite, der Parameter  $\mu_{f3}$  bestimmt, wo die Verteilung ihren Maximalwert annimmt. Das Maximum der Verteilung befindet sich an der Stelle

$$D_{ff3} = e^{\mu_{f3} - \sigma_{f3}^2} \qquad , \tag{A.11}$$

bzw. es gilt umgekehrt

$$\mu_{f3} = \ln\left(D_{ff3}\right) + \sigma_{f3}^2 \tag{A.12}$$

Die Parameter der Verteilung werden an die experimentell gewonnenen Daten iterativ angepasst. Zunächst wird dazu der Startwert der  $\sigma_{f3}$ -Iteration berechnet. Dazu wird der aus den Experimentdaten ermittelte Maximalwert der Verteilung  $P_{f3}(D_{ff3}) = P_{f30}$  verwendet. Aus Gleichung (A.10) ist der Maximalwert  $P_{f30}$  der Verteilung bei einem Durchmesser  $D = D_{ff3}$  zu finden, und ergibt sich so zu

$$P_{f3}(D_{ff3}) = P_{f30} = \frac{H_{f3}}{D_{ff3}} \exp\left(-0.5\,\sigma_{f3}^2\right) \tag{A.13}$$

Die Größe  $D_{ff3}$  lässt sich gemäß der Experimentdaten als lineare Funktion des Durchmessers des kleinen Tropfens  $D_s$  angegeben:

$$D_{ff3} = 0,241 D_S + 0,0129 \tag{A.14}$$

Die Experimentdaten ergeben auch, dass das Maximum  $P_{f30}$  nur eine Funktion von  $D_S$  und  $D_L$  ist und in drei Bereiche unterteilt werden kann:

$$P_{f^{30,1}} = 1,68 \times 10^5 \ (D_S)^{2,33}$$
 für  $D_S \le D_{S,0}$  (A.15)

$$P_{f30,2} = \left[ 43,4 \left( D_L + 1,18 \right)^2 - 159 \right] (D_S)^{-1} - 3870 \left( D_L - 0,285 \right)^2 - 58,1 \qquad \text{für} \qquad D_S \ge 1,2 D_{S,0} \qquad \text{(A.16)}$$

$$P_{f_{30,3}} = \alpha P_{f_{30,1}} + (1-\alpha) P_{f_{30,2}} \qquad \text{sonst} \quad . \tag{A.17}$$

 $\alpha$  ist dabei definiert als

$$\alpha = \frac{D_s - D_{s,0}}{0.2 D_{s,0}} \tag{A.18}$$

Die mittlere Anzahl der produzierten Satellitentropfen ist gleich der mittleren Gesamtanzahl an Bruchstücken abzüglich der zwei Fragmente in Größe des kleinen bzw. des großen Tropfens. Somit muss die Integration der Gleichung (A.10) die mittlere Anzahl  $\overline{F}_f$  der Satellitentropfen ergeben, d.h.

$$\int_{D_0}^{\infty} P_{f3}(D) \, dD = \overline{F}_{f3} = \overline{F}_f - 2 \tag{A.19}$$

Mit den vorangegangenen Überlegungen lässt sich nun auch für  $\sigma_{f3}$  ein iteratives Bestimmungsschema herleiten:

$$\sigma_{f3,i+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\overline{F}_f - 2}{H_{f3}}\right) \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(D_{coal}) - \mu_{f3}}{\sqrt{2}\sigma_{f3,i}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(D_0) - \mu_{f3}}{\sqrt{2}\sigma_{f3,i}}\right) \right]^{-1} \quad (A.20)$$

Die Startwerte berechnen sich mit der Anfangsannahme  $\sigma_{f3,1} = 10 D_{ff3}$  wie folgt:

$$H_{f3,1} = P_{f30} D_{ff3} \left[ \exp\left(-0.5 \sigma_{f3,1}^2\right) \right]^{-1}$$
(A.21)

$$\mu_{f3,1} = \ln(D_{ff3}) + \sigma_{f3,1}^2 \tag{A.22}$$

Da  $H_{f3}$  und  $\mu_{f3}$  Funktionen von  $\sigma_{f3}$  sind, müssen diese nach jeder Iteration neu berechnet werden. Um eine verbesserte Konvergenz zu erreichen, wurde von Brown (1986) ein verändertes Iterationsschema vorgeschlagen. Hierauf wird aber im Rahmen dieser Arbeit nicht näher eingegangen.

Die drei für verschiedene Bereiche definierten Bruchstückdichtefunktionen ergeben schließlich zusammen die gesamte Bruchstückdichtefunktion für den Fall des Filament-Breakup

$$P_f(D) = P_{f1}(D) + P_{f2}(D) + P_{f3}(D)$$
(A.23)

## A.2 Sheet-Breakup bei Low und List

Da bei dieser Zerfallsart nach dem Zerfall des temporär koaleszierten Systems kein Fragment in Größe des kleinen Ausgangstropfens, sondern lediglich eines in Größe des großen Ausgangstropfens zu identifizieren ist, setzt sich die Gesamtverteilung nur aus zwei Bruchstückdichtefunktionen zusammen. Zum einen ist dies eine Bruchstückdichtefunktion  $P_{s1}(D)$  in Form einer Normalverteilung für das große Tropfenfragment, zum anderen eine Bruchstückdichtefunktion  $P_{s2}(D)$  in Form einer Log-Normal-Verteilung für die Satellitentropfen. Analog zum Filament-Breakup schreibt sich die  $P_{s1}$ -Funktion

$$P_{s1}(D) = H_{s1} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(D - D_L \sigma_{s1}\right)^2\right] , \qquad (A.24)$$

und es gilt wiederum die Normierungsbedingung (A.1).

Diese Verteilung ist um  $D_L$  zentriert, ihre Breite ist durch  $\sigma_{s1}$  gegeben, und ihr Maximalwert ist  $H_{s1}$ . Die Standardabweichung  $\sigma_{s1}$  kann wie zuvor beim Fall des Filament-Breakup iterativ berechnet werden gemäß

$$\sigma_{s1,i+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} H_{s1}^{-1} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_{coal} - D_L}{\sigma_{s1,i}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_L - D_0}{\sigma_{s1,i}}\right) \right]^{-1}$$
(A.25)

mit dem Startwert

$$\sigma_{s_{1,1}} = (H_{s_1})^{-1} \qquad . \tag{A.26}$$

Der Maximalwert der Verteilung  $H_{s1}$  kann (angepasst an die Daten von Low und List) als *e*-Funktion in Abhängigkeit von  $D_s$  beschrieben werden:

$$H_{s1} = 100 \, \exp(-3.25 \, D_S) \tag{A.27}$$

Als Dichtefunktion für die Satellitentropfen findet wieder eine Log-Normal-Verteilung Anwendung

$$P_{s2} = \frac{H_{s2}}{D} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln(D) - \mu_{s2}}{\sigma_{s2}}\right)^2\right]$$
(A.28)

Der Modalwert  $\mu_{s2}$  wird über

$$\mu_{s2} = \ln(D_{ss2}) + \sigma_{s2} \tag{A.29}$$

festgelegt. Der Maximalwert  $P_{s20}$  beim Durchmesser  $D = D_{ss2}$  ist gegeben durch

$$P_{s2}(D_{ss2}) = P_{s20} = \frac{H_{s2}}{D_{ss2}} \exp\left(-0.5\,\sigma_{s2}^2\right) \tag{A.30}$$

Für die Größen  $D_{ss2}$  und  $P_{s20}$  stellen Low und List folgende zwei empirische Beziehungen auf:

$$D_{ss2} = 0.254 \ (D_S)^{0.413} \ \exp\left[\left(3.53 \ D_S - 2.51\right)\left(D_L - D_S\right)\right]$$
(A.31)

$$P_{s2}(D_{ss2}) = 0.23 (D_s)^{-3.93} D_L^{b^*}$$
 mit  $b^* = 14.2 \exp(-17.2 D_s)$  (A.32)

Unter Verwendung einer Anfangsannahme für die Standardabweichung  $\sigma_{s2,1}$  (z.B. analog zum Filament-Breakup-Fall  $\sigma_{s2,1} = 10 D_{ss2}$ ) können die Iterationsstartwerte für  $H_{s2}$  und  $\mu_{s2}$  gewonnen werden. Die Ableitung der Iterationsvorschrift erfolgt ähnlich wie für den

Filament-Breakup-Fall über die Integration der Gleichung (A.28)

$$\int_{D_0}^{\infty} \frac{H_{s2}}{D} \exp\left[-0.5 \left(\frac{\ln(D) - \mu_{s2}}{\sigma_{s2}}\right)^2\right] dD = \overline{F}_s - 1 \tag{A.33}$$

Anschließend wird nach  $\sigma_{s2}$  aufgelöst. Die Iterationsvorschrift für die Standardabweichung  $\sigma_{s2}$  lautet somit

$$\sigma_{s2,i+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\overline{F}_s - 1}{H_{s2}}\right) \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(D_{coal}) - \mu_{s2}}{\sqrt{2}\sigma_{s2,i}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(D_0) - \mu_{s2}}{\sqrt{2}\sigma_{s2,i}}\right) \right]^{-1} \quad (A.34)$$

Der Startwert  $\sigma_{s2}$  kann wie beim Filament-Breakup auf  $\sigma_{s2,1} = 10 D_{ss2}$  gesetzt werden. Die mittlere Bruchstückanzahl  $\overline{F}_s$  liefert Tab.A.1. Die gesamte Bruchstückdichtefunktion für den Fall des Sheet-Breakup ist schließlich gegeben durch

$$P_s(D) = P_{s1}(D) + P_{s2}(D)$$
(A.35)

## A.3 Disk-Breakup bei Low und List

Diese Zerfallsart tritt nur auf, wenn die Kollision der beiden Ausgangstropfen nahezu zentrisch und mit hoher Deformationsenergie abläuft. Die Zahl der nach der Kollision vorhanden Fragmente ist im allgemeinen hoch und der Deformationsenergie proportional. Der Zerfallsprozess setzt ein, während das koaleszierte Tropfensystem dabei ist, die überschüssige Kollisionsenergie über Oszillationen in Oberflächenenergie umzuwandeln. Direkt nach der Kollision wird dabei das koaleszierte Tropfensystem zu einer charakteristischen Scheibenform mit hohem aerodynamischen Widerstand deformiert.

Die Beschreibung des Disk-Breakup erfolgt ähnlich wie beim Sheet-Breakup, da auch hier ein größeres Fragment und viele kleine Satellitentropfen nach der Kollision vorhanden sind. Allerdings lässt sich beim Disk-Breakup das größte Fragment seiner Größe nach nicht eindeutig als "Überbleibsel" des großen Ausgangstropfen einordnen, so dass bei seiner Beschreibung eine Korrektur vorgenommen werden muss. Analog zu den beiden anderen Zerfallsarten wird das größte Fragment durch eine Gauß'sche Normal-Verteilung beschrieben

$$P_{d1}(D) = H_{d1} \exp\left[-0.5 \left(\frac{D - D_{dd1}}{\sigma_{d1}}\right)^2\right]$$
(A.36)

Für den Medianwert  $D_{dd1}$  der Bruchstückdichtefunktion  $P_{d1}(D)$  wurde ein anhand der

Labordaten abgeleiteter kleinerer Wert als der große Tropfendurchmesser  $D_L$  angesetzt

$$D_{dd1} = D_L \left\{ 1 - \exp\left[ -3.70 \left( -3.10 - W_1 \right) \right] \right\}$$
(A.37)

Hierin bezeichnet  $W_1$  die Weberzahl. Sie beschreibt das Verhältnis von überschüssiger Kollisionsenergie CKE zu Oberflächenenergie des koaleszierten Systems  $S_c$ , kann also geschrieben werden als

$$W_1 = \frac{CKE}{S_c} \tag{A.38}$$

Die Größen CKE und  $S_c$  lassen sich gemäß der Gleichungen (2.21) und (2.22) berechnen. Für den Maximalwert der Verteilung wurde aus den Experimentdaten folgende Abhängigkeit von der überschüssigen Kollisionsenergie (Verformungsenergie) abgeleitet,

$$H_{d1} = 1,58 \times 10^{-5} \, (CKE)^{-1,22} \quad . \tag{A.39}$$

Die Breite  $\sigma_{d1}$  der Verteilung zur Beschreibung des größten Fragments lässt sich analog zu Gleichung (A.25)) iterativ mittels

$$\sigma_{d1,i+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} H_{d1}^{-1} \left[ \text{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_{coal} - D_{dd1}}{\sigma_{d1,i}}\right) + \text{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{D_{dd1} - D_0}{\sigma_{d1,i}}\right) \right]^{-1}$$
(A.40)

mit dem Startwert  $\sigma_{d_{1,1}} = (H_{d_1})^{-1}$  berechnen. Die Bruchstückdichtefunktion  $P_{d_2}(D)$  zur Beschreibung der Satellitentropfengrößenverteilung kann entsprechend den zuvor behandelten Zerfallsarten als Log-Normal-Verteilung behandelt werden

$$P_{d2} = \frac{H_{d2}}{D} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln(D) - \mu_{d2}}{\sigma_{d2}}\right)^2\right]$$
(A.41)

Die Größe  $\mu_{d2}$  ist definiert als

$$\mu_{d2} = \ln(D_{dd2}) + \sigma_{d2} \tag{A.42}$$

Anhand der Laborexperimente wurden für den Medianwert  $D_{dd2}$  und den dort auftretenden Maximalwert der Verteilung  $P_{d2}(D_{dd2})$  folgende Beziehungen gefunden

$$D_{dd2} = D_S \exp\left[\left(-17, 4 D_S - 0, 671\right) \left(D_L - D_S\right)\right]$$
(A.43)

$$P_{d2}(D_{dd2}) = \frac{H_{d2}}{D_{dd2}} \exp\left(-0.5\,\sigma_{d2}^2\right) = 8.84\,(D_S)^{-2.52}\,(D_L - D_S)^{b^*} \quad (A.44)$$
websi  $b^* = 0.007\,(D_L)^{-2.54}$ 

wobei 
$$b^* = 0.007 (D_S)^{-2.5}$$

Genau wie bei den zuvor behandelten Zerfallsarten sind also die Größen  $D_{dd2}$  und  $P_{d2}(D_{dd2})$ nur von den Durchmessern der kollidierenden Tropfen abhängig. Mit Hilfe des Integrals über die Log-Normal-Verteilung  $P_{d2}$ , das entsprechend zum Sheet-Breakup den Wert  $\overline{F}_d$  – 1 ergibt, kann eine Gleichung für die iterative Bestimmung von  $\sigma_{d2}$  gewonnen werden

$$\sigma_{d2,i+1} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\overline{F}_d - 1}{H_{d2}}\right) \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(D_{coal}) - \mu_{d2}}{\sqrt{2}\sigma_{d2,i}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(D_0) - \mu_{d2}}{\sqrt{2}\sigma_{d2,i}}\right) \right]^{-1} \quad (A.45)$$

Als Startwert kann z.B.  $\sigma_{d2} = 10 D_{dd2}$  gemäß dem Filament-Breakup gewählt werden. Die mittlere Anzahl der Fragmente für diese Zerfallsart lässt sich wie in Tab.A.1 dargestellt berechnen. Die Summe der beiden Bruchstückdichtefunktionen ergibt schließlich die Bruchstückdichtefunktion für den Fall des Disk-Breakup

$$P_d(D) = P_{d1}(D) + P_{d2}(D)$$
(A.46)

## A.4 Gesamter Breakup

Da die Bruchstückverteilungsfunktion für alle Zerfallsarten zusammen nach Gleichung (2.61) noch die Breakup-Wahrscheinlichkeiten  $R_j$  mit k = f, s, d für die einzelnen Zerfallsarten enthält, müssen diese  $R_j$  noch bestimmt werden. Aus den experimentellen Daten leiteten Low und List für Filament-, Sheet- und Disk-Breakup folgende Beziehungen ab

$$R_{f} = \begin{cases} 1,11 \times 10^{-4} (CKE)^{-0.654} & \text{für } CKE \ge 0.893 \,\mu\text{J} \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$R_{s} = \begin{cases} 0,685 \left[1 - \exp\left(-1.63 \,W - 0.86\right)\right] & \text{für } W = \frac{CKE}{S_{T}} \ge 0.86 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$R_{d} = \begin{cases} 1 - R_{f} - R_{s} & \text{für } R_{f} + R_{s} \le 1 \\ 1 - (R_{f}' + R_{s}') & \text{für } R_{f} + R_{s} > 1 \end{cases}$$
(A.47)

Diese empirischen Funktionen lassen noch die Möglichkeit  $R_f + R_s > 1$  zu, daher muss für diesen Fall noch eine Normierung vorgenommen werden,

$$R_{f}' = \frac{1}{R_{f} + R_{s}} R_{f}$$
 und  $R_{s}' = \frac{1}{R_{f} + R_{s}} R_{s}$  (A.48)

Die gesamte Bruchstückdichtefunktion für alle Kollisionen, die in einem Zerfallsereignis enden, ergibt sich also, indem man die so festgelegten Breakup-Wahrscheinlichkeiten und Bruchstückdichtefunktionen für alle drei Zerfallsarten in

$$P_b(D) = R_f' P_f(D) + R_s' P_s(D) + R_d P_d(D)$$
(A.49)

einsetzt.

| Zerfallstyp | Parametrisierung von $\overline{F}_x$   | Hilfsgrößen  |
|-------------|---|--|
| Filament    | $ \overline{F}_{f} = \begin{cases} \overline{F}_{f1} = \left[-2,25 \times 10^{4} \left(D_{L} - 0,403\right)^{2} - 37,9\right] D_{S}^{2,5} \\ + 9,67 \left(D_{L} + 0,170\right)^{2} + 4,95 & \text{für } D_{S} \ge D_{S,0} \\ \overline{F}_{f2} = \alpha D_{S}^{\beta} + 2 & \text{für } D_{S} \le D_{S,0} \end{cases} $ | $D_{S,0} = \left[\frac{\overline{F}_{f1,2}-2}{\alpha}\right]^{1/\beta}$                      |
|             | $(1)_{j2}  \exists x_{j} = 1$   | $\overline{F}_{f1,2}$ : Schnittpunkt von $\overline{F}_{f1}$ und $\overline{F}_{f2}$         |
|             |   | $\alpha = 1.02 \times 10^4$  |
|             |   | $\beta = 2,83$   |
| Sheet       | $\overline{F}_s = 5 \operatorname{erf}(\xi_o) + 6$  | $\xi_o = rac{S_T - 253 	imes 10^{-6}}{185 	imes 10^{-6}}$                                   |
|             |   | $S_T = \pi  \sigma \left( D_L^2 + D_S^2 \right)$   |
|             |   | $	ext{erf}\left(\xi_{o} ight)=rac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{0}^{\xi_{o}}\!e^{-\xi^{2}}d\xi$       |
|             | $2$ für $CKE < 3.65 \mu$ J  |  |
| Disk        | $\overline{F}_d = \left\{ \right.$  | $CKE = \frac{2\pi}{3} \rho_w \frac{r_x r_y}{r_x^3 + r_y^3} \left[ v_T(x) - v_T(y) \right]^2$ |
|             | $297,5+23,7 \ln (CKE)$ sonst  | ω y  |

Tabelle A.1: Parametrisierung der mittleren Bruchstückanzahl der einzelnen Zerfallsarten nach LL82b.
## Literatur

- BEARD, K. V. (1976). Terminal Velocity and Shape of Cloud and Precipitation Drops Aloft. J. Atmos. Sci., 33:851–864.
- BEARD, K. V. und C. CHUANG (1987). A New Model for the Equilibrium Shape of Raindrops. J. Atmos. Sci., 44:1509–1524.
- BEARD, K. V. und H. T. OCHS III (1995). Collisions between Small Precipitation Drops. Part II: Formulas for Coalescence, Temporary Coalescence, and Satellites. J. Atmos. Sci., 52:3977–3996.
- BEHENG, K. D. (1993). Theorie und Beobachtung zur Kinetik der Hydrometeore. promet, 1/2:21–26.
- BEHENG, K. D. und U. WACKER (1993). Über die Mikrostruktur von Wolken. promet, 1/2:10–15.
- BLANCHARD, D. C. (1950). The Behaviour of Water Drops at Terminal Velocity in Air. Trans. Amer. geophys. Union, 31:836–842.
- BLANCHARD, D. C. (1962). Comments on Drop Breakup. J. Atmos. Sci., 19:119.
- BLANCHARD, D. C. und A. T. SPENCER (1970). Experiments on the Generation of Raindrop-Size Distribution by Drop Breakup. J. Atmos. Sci., 27:101–108.
- BRACKBILL, J. U., D. B. KOTHE und C. ZEMACH (1992). A Continuum Method for Modeling Surface Tension. J. Comput. Phys., 100:335–354.
- BRENN, G. und A. FROHN (1990). *Tropfenkollisionen*. Spektr. d. Wissenschaft, 12:116–124.
- BROWN, P. S. (1986). Analysis of the Low and List Drop-Breakup Formulation. J. Climate Appl. Meteor., 25:313–321.
- BROWN, P. S. (1997). Mass Conservation Considerations in Analytic representation of Raindrop Fragment Distribution. J. Atmos. Sci., 54:1675–1687.
- COTTON, W. R. und N. R. GOKHALE (1967). Collisions, Coalescence and Breakup of Large Water Drops in a Vertical Wind Tunnel. J. Geophys. Res., 72:4041–4049.

- COTTON, W. R. und R. A. ANTHES (1989). *Storm and Cloud Dynamics*, Bd. 44 d. Reihe *International Geophysical Series*. Academic Press, San Diego.
- CZYS, R. R. (1987). A Laboratory Study of Interactions between Small Precipitation-Size Drops in Free Fall. PhD Thesis, University of Illinois.
- CZYS, R. R. und H. T. OCHS III (1988). The Influence of Charge on the Coalescence of Water Drops in Free Fall. J. Atmos. Sci., 45:3161–3168.
- DAVIS, M. H. und J. D. SARTOR (1967). *Theoretical Collision Efficiencies for Small Cloud Droplets in Stokes Flow*. Nature, 215:1371–1372.
- FOURNIER D'ALBE, E. M. und M. S. HIDAYETULLA (1955). The Breakup of Large Water Drops Falling at Terminal Velocity in Free Air. Quart. J. Roy. Meteor. Soc., 81:610–613.
- HIRT, C. W. und NICHOLS, B.D. (1981). Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. J. Comput. Phys., 39:201–225.
- HU, Z. und R. C. SRIVASTAVA (1995). Evolution of Raindrop-size Distribution by Coalescence, Breakup and Evaporation: Theory and Observation. J. Atmos. Sci., 52:1761–1783.
- KARL, A. und M. RIEBER und M. SCHELKLE und K. ANDERS und A. FROHN (1996). Comparison of New Numerical Results for Droplet Wall Interactions with Experimental Results. Proc. 2nd Int. Symp. on Numerical Methods for Multiphase Flows, 201–206.
- KLETT, J. D. und M. H. DAVIS (1973). Theoretical Collision Efficiencies of Cloud Droplets at Small Reynolds Numbers. J. Atmos. Sci., 30:107–117.
- KOBAYASHI, T. und A. ADACHI (2001). *Measurement of Raindrop Breakup by Using* UHF Wind Profilers. J. Geophys. Res., 28:4071–4074.
- KOMABAYASI, M., T. GONDA und K. ISONO (1964). Lifetime of Water Drops before Breaking and Size Distribution of Fragment Droplets. J. Meteor. Soc. Japan, 42:330–340.
- KUNZ, M. und M. LÖFFLER-MANG und K. D. BEHENG (1998). Close-to-ground Vertical Profiles of Radar Reflectivity Derived from Measurements by a Verticallypointing K-Band Doppler Radar. MAP Newsletter, 9:80–81.
- LIN, C. L. und S. C. LEE (1975). Collision Efficiency of Water Drops in the Atmosphere. J. Atmos. Sci., 32:1412–1418.
- LIST, R. und J. R. GILLESPIE (1976). Evolution of Raindrop Spectra with Collision-Induced Breakup. J. Atmos. Sci., 33:2007–2013.

- LIST, R. und G. M. MCFARQUHAR (1990a). The Evolution of Three-Peak Raindropsize Distribution in One-Dimensional Shaft Models. Part I: Single-Pulse Rain. J. Atmos. Sci., 47:2996–3006.
- LOW, T. B. und R. LIST (1982a). Collision, Coalescence and Breakup of Raindrops. Part I: Experimentally Established Coalescence Efficiencies and Fragment Size Distribution in Breakup. J. Atmos. Sci., 39:1591–1606.
- LOW, T. B. und R. LIST (1982b). Collision, Coalescence and Breakup of Raindrops. Part II: Parameterizations of Fragment Size Distributions. J. Atmos. Sci., 39:1607– 1618.
- MAGARVEY, R. H. und B. W. TAYLOR (1956). Free Fall Breakup of Large Drops. J. Appl. Phys., 27:1129–1135.
- MAYER, F. (2000). Numerische Simulation des stoßinduzierten Zerfallprozesses von Regentropfen. Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH).
- McTAGGART-COWAN, J. D. und R. LIST (1975). Collision and Breakup of Water Drops at Terminal Velocity. J. Atmos. Sci., 33:1401–1411.
- OCHS III, H. T., K. V. BEARD, R. R. CZYS, N. F. LAIRD, D. E. SCHAUFEL-BERGER und D. J. HOLDRIDGE (1995). Collisions between Small Precipitation Drops. Part I: Laboratory Measurements of Bounce, Coalescence and Temporary Coalescence. J. Atmos. Sci., 52:2258–2275.
- OCHS III, H. T. und R. R. CZYS (1987). Charge Effects on the Coalescence of Water Drops in Free Fall. J. Atmos. Sci., 44:225–232.
- OCHS III, H. T. und R. R. CZYS (1988). The Influence of Charge on the Coalescence of Water Drops in Free Fall. J. Atmos. Sci., 45:3161–3168.
- OCHS III, H. T., R. R. CZYS und K. V. BEARD (1986). Laboratory Measurements of Coalescence Efficencies for Small Precipitation Drops. J. Atmos. Sci., 43:225– 232.
- PRESS, W. H. et al. (2001). Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press.
- PRUPPACHER, H.R. und J. D. KLETT (1997). *Microphysics of Clouds and Precipitation*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2. Aufl.
- PRUPPACHER, H. R. und P. L. PITTER (1971). A Semi-Empirical Determination of the Shape of Cloud and Rain Drops. J. Atmos. Sci., 28:86–94.
- REISIN, T., Z. LEVIN und S. TZIVION (1989). Rain Production in Convective Clouds As Simulated in an Axisymmetric Model with Detailed Microphysics. Part I: Description of the Model. J. Atmos. Sci., 53:497–519.

- RIDER, W. J. und KOTHE, D.B. (1998). Reconstructing Volume Tracking. J. Comput. Phys., 141:112–152.
- RIEBER, M. (2004). Numerical Modeling of the Free Surface Dynamic in Two Phase Flows (in German). Doktorarbeit, Universität Stuttgart.
- SCHELKLE, M. und M. RIEBER und A. FROHN (1999). Numerische Simulation von Tropfenkollisionen. Spektr. d. Wissenschaft., Jan.1999: 72–79.
- SEIFERT, A., A. KHAIN, U. BLAHAK, und K.D. BEHENG (2005). Possible effects of collisional breakup on mixed-phase deep convection simulated by a spectral (bin) cloud model. J. Atmos. Sci., 62:1917–1931.
- SRIVASTAVA, R.C. (1971a). Size Distribution of Raindrops Generated by their Breakup and Coalescence. J. Atmos. Sci., 28:410–415.
- SRIVASTAVA, R. C. (1971b). Size Distribution of Raindrops Generated by their Breakup and Coalescence. J. Atmos. Sci., 28:410–415.
- TZIVION, S., G. FEINGOLD und Z. LEVIN (1989). The Evolution of Raindrop Spectra. Part II: Collection/Breakup and Evaporation in a Rainshaft. J. Atmos. Sci., 46:3312–3327.
- WALLACE, J. M. und P. V. HOBBS (1977). Atmospheric Science: An Introductory Survey. Academic Press, San Diego.
- WHELPDALE, D. M. und R. LIST (1971). The Coalescence Process of Raindrop Growth. J. Geophys. Res., 76:2836–2856.
- YOUNG, K. C. (1975). The Evolution of Drop Spectra Due to Condensation, Coalescence and Breakup. J. Atmos. Sci., 32:965–973.
- ZAWADZKI, I. und M. ANTONIO DE AGOSTINHO (1988). Equilibrium Raindrop Size Distribution in Tropical Rain Populations. J. Atmos. Sci., 45:3452–3459.

## Danksagung

Herrn Prof. Klaus Dieter Beheng danke ich für die interessante und reizvolle Themenstellung sowie für seine umfassende Betreuung und Unterstützung.

Herrn Prof. Christoph Kottmeier danke ich für die freundliche Übernahme des Korreferates.

Sehr geholfen hat mir Dr. Ulrich Blahak, der mit Geduld und Rat zum Gelingen dieser Arbeit erheblich beitrug. Desweiteren gilt mein Dank der gesamten Arbeitsgruppe Wolkenphysik und Radarmeteorologie des IMK, in der stets eine angenehm-kollegiale Arbeitsatmosphäre herrschte.

Diese Arbeit kam überhaupt erst durch die Kooperation mit dem Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt der Universität Stuttgart zustande. Dort möchte ich mich insbesondere bei Herrn Prof. Bernhard Weigand, Dr. Norbert Roth, Wolfgang Sander sowie Frank Maichle bedanken. Das ebenfalls in Stuttgart beheimatete Höchstleistungsrechenzentrum HLRS ermöglichte die extensiven Simulationen, daher gebührt auch den Mitarbeitern dort mein Dank.

Zudem hat auf der IAMAS-Tagung 2005 in Beijing - neben vielen anderen - vor allem Prof. Roland List mit seiner Begeisterung für Wolkenphysik mein Interesse an diesem Thema weiter aufleben lassen, was mich sehr motivierte.

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt und keine anderen Hilfsmittel als die angegebenen benutzt habe. Ich erkläre mich damit einverstanden, dass diese Arbeit in die Bibliothek eingestellt wird und vervielfältigt werden darf.

Karlsruhe, den 18. Oktober 2005

Kai Jellinghaus