

Mathematische Modellierung von Flaschenentleerungsprozessen

vorgelegt von
Dipl.- Ing. (FH)
Friedrich R. A. Geiger
aus Würzburg

von der Fakultät III – Prozesswissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften

--Dr.- Ing.--

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender:	Prof. Dr.- Ing. Eckhard Flöter
Berichter:	Prof. Dr.- Ing. Frank-Jürgen Methner
Berichter:	Prof. Dr. Kai Velten
Berichter:	PD Dr.- Ing. Hartmut Evers

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 21. Juni 2012

Berlin 2012

D 83

Danksagung

Eine Dissertation belegt und dokumentiert die wissenschaftliche Arbeit einer einzelnen Person. Dieser Weg kann mitunter jedoch sehr schwierig und steinig sein. Ich danke daher aus ganzem Herzen insbesondere Prof. Dr. Kai Velten, Prof. Dr.- Ing. Frank- Jürgen Methner, PD Dr.- Ing. Hartmut Evers, Claus Meister, Katrin Blendel und meiner Familie für ihre Unterstützung.

Prof. Dr. Kai Velten hat nicht nur durch das AiF- Projekt (Ref.- Nr.: 1750X08) die Rahmenbedingungen für meine Arbeit gelegt, sondern hat auch mit höchstem persönlichem Engagement die Arbeit fachlich unterstützt. In diesem Zusammenhang möchte ich auch Herrn Prof. Dr.- Ing. Frank- Jürgen Methner danken, der die Arbeit von Seiten der TU Berlin betreut hat.

Zusammen mit PD Dr.-Ing. Hartmut Evers danke ich dem ganzen Team der KHS GmbH in Bad Kreuznach, welches insbesondere für die durchgeführten Experimente unverzichtbar war. Zusätzlicher Dank gilt unseren industriellen Projektpartnern ProMaqua GmbH, Heidelberg, und Lechler GmbH, Metzingen.

Ein besonderer persönlicher Dank geht an meinen Mitdoktoranden, Claus Meister, der auch in schwierigsten Projektzeiten immer neue Ideen hatte.

Für die Schaffung der richtigen Rahmenbedingungen für ein erfolgreiches wissenschaftliches Arbeiten möchte ich sehr herzlich den institutionellen Projektpartnern danken, der Hochschule RheinMain, der Forschungsanstalt Geisenheim, der Technischen Universität Berlin, der AiF e.V.- Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen „Otto von Guericke“ e.V. und dem Bundesministerium für Bildung und Forschung.

Die Durchführung einer wissenschaftlichen Arbeit bedarf nicht nur fachlicher Unterstützung, sondern gerade die menschliche und persönliche Unterstützung ermöglichte mir das Meistern schwieriger Zeiten. In diesem Zusammenhang danke ich besonders Katrin Blendel und meiner gesamten Familie.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, dass ich die vorliegende Arbeit

"Mathematische Modellierung von Flaschenentleerungsprozessen"

selbstständig und ohne fremde Hilfe angefertigt habe. Ich habe dabei nur die in der Arbeit angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt. Die Arbeit wurde bisher keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt und auch noch nicht veröffentlicht. Ich bin mir bewusst, dass eine unwahre Erklärung rechtliche Folgen haben wird.

Geisenheim, den 30. Mai 2012

Veröffentlichungen mit Bezug zur Arbeit

Geiger, F., Velten, K. & Methner, F.-J. (2012) 3D CFD simulation of bottle emptying processes, *Journal of Food Engineering* **109**, S. 609- 618.

Geiger, F., Meister, C., Velten, K., Evers, H. & Methner, F.-J. (2011) A CFD Perspective of Bottle Cleaning Processes, 2011, *Open Source CFD International Conference 2011*, Paris-Chantilly.

Meister, C., Geiger, F., Velten, K., Evers, H. & Methner, F.-J.(2011) Simulation of PET bottle rinsing, 2011, *Open Source CFD International Conference 2011*, Paris-Chantilly.

Meister, C., Geiger, F., Velten, K., Evers, H. & Methner, F.-J. (2010) CFD- Simulation of fast Bottle Cleaning Processes, 2010, *Open Source CFD International Conference 2010*, München.

Kurzfassung

Durch den großen Erfolg von PET als Material für Getränkeverpackungen in den letzten Jahren, was nicht zuletzt der leichten Formbarkeit des Materials zu verdanken ist, sind viele neue Flaschengeometrien entstanden. Jede dieser neuen Flaschengeometrien muss vor ihrem Einsatz in der Produktion auf ihre Verwendbarkeit geprüft werden, und der Produktionsprozess sollte, entsprechend der Eigenarten einer jeden Flaschenform, optimiert werden.

Bisher ist zur Untersuchung neuer Flaschengeometrien eine Vielzahl von realen Experimenten nötig. Diese Experimente geben aber nur einen sehr groben Überblick über das auftretende Strömungsregime. Die genaue Geschwindigkeit für das gesamte Feld lässt sich nicht messen und die Struktur der Wirbel ist kaum quantifizierbar. Aufgrund der wachsenden Rechenleistung der letzten Jahrzehnte bietet sich *Computational Fluid Dynamics* (CFD) als adäquates Werkzeug für die Untersuchung derartiger Prozesse an, die bisher nicht ausreichend analysiert werden konnten. In der Arbeit wird belegt, dass durch die Wahl eines entsprechenden Modells der Prozess der Flaschenentleerung akkurat simuliert werden kann und bisher verwendete empirische Modelle im Vergleich zum verwendeten Modell sehr limitiert sind.

Der Nachteil eines CFD- Modells ist der hohe Berechnungsaufwand. In der Arbeit werden zur Bewältigung dieses Problems die Methoden der Versuchsplanung und der *Response Surface* genutzt, welche die Anzahl der durchzuführenden Simulationen erheblich reduzieren und die Optimierung der Flaschenform erleichtern.

Nach der erfolgreichen Validierung des Modells anhand von Daten aus eigenen Experimenten wurde das gefundene Modell zudem genutzt, um den Flaschenentleerungsprozess in zwei Studien genauer zu untersuchen. Erwartungsgemäß konnte der Mündungsdurchmesser als wichtigster Parameter für die Entleerungszeit einer Flasche identifiziert werden. Zudem wurde bewiesen, dass zwischen allen untersuchten Parametern, Oberflächenspannung der Fluide, Neigung der Flasche, Form des Flaschenhalses, Tiefe der Einbuchtung und Mündungsdurchmesser starke Interaktionen herrschen, die zum Teil die Dauer des Leerungsprozesses erheblich beeinflussen und eine individuelle Untersuchung jeder Flasche erfordern.

Abstract

PET has been used very successfully as material for bottles in the past years, since it is easily mouldable into many different forms. But every newly introduced bottle shape must be tested in advance of the large-scale production to avoid problems during the process and to optimize the amount of required energy.

Until now the testing has to be done in long lasting experimental studies, which require prototypes and deliver only basic information about the emptying times and the flow regime in the bottles. The experiments give almost no information about the local velocity in the flow field and the turbulent eddies. Hence, new methods to study the process are required. This study shows that Computational Fluid Dynamics (CFD) is a powerful tool, which is well suited to approach the process of bottle emptying. In comparison with experimental results, the CFD- model developed in this study performs better than the existing empirical models in terms of accuracy and flexibility. The CFD model allows the analysis of many important factors relating to the bottle and to the fluids within the bottle.

To reduce the computational costs of the CFD simulations, the setup of the simulations was optimized using an appropriate design of experiment. It turned out that the „Box-Behnken- Design“ implied a 50% reduction of the number of required runs, while the design allowed well to detect interaction effects. To support the postprocessing and make effects as well as interactions between different factors understandable response surface methods were used.

In two studies, the effects of the fluids and of bottle geometry parameters were investigated. In detail, the effects of surface tension, inclination of the bottle, outlet diameter, shape of the bottle neck and indentation are studied. The most important factor is the outlet diameter, since it not only determines the amount of fluid leaving the bottle but also influences the occurring flow schemes.

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	I
Eidesstattliche Erklärung/ Veröffentlichungen mit Bezug zur Arbeit	II
Kurzfassung	III
Abstract	IV
Inhaltsverzeichnis	V
Nomenklatur	VIII
Abkürzungsverzeichnis	XII
Abbildungsverzeichnis	XIII
Tabellenverzeichnis	XV
1 Einleitung	1
2 Fragestellung	3
3 Stand der Wissenschaft	4
3.1 Getränketechnologische Aspekte	4
3.1.1 Strömung in Flaschen	5
3.1.2 Ablauf der Flaschenreinigung	8
3.1.3 Kritische Punkte in der Flaschenreinigung	10
3.2 Strömungsmechanische Phänomene bei Strömungen in Flaschen	12
3.2.1 Oberflächenspannung und Benetzung	13
3.2.2 Turbulenz und Grenzschichten	15
3.2.3 Zweiphasenrohrströmung	17
3.3 Mathematische Modellierung und Simulation	19
3.3.1 Mathematische Modelltypen	21
3.3.1.1 Empirische Modelle	21
3.3.1.1.1 Whalley- Modell (Wha)	22
3.3.1.1.2 Clanet- und Searby- Modell (CSe)	23
3.3.1.2 CFD- Modelle	24
3.3.2 Statistische Versuchsplanung und Auswertung (DoE)	26
3.3.2.1 Versuchsdesign	27
3.3.2.1.1 Häufige Versuchsdesigns	28
3.3.2.1.2 Bewertung der verschiedenen Designs	37
3.3.2.2 Unterschied von realen und virtuellen Experimenten	41
3.3.2.3 Auswertung	42
3.3.2.3.1 Regression	43
3.3.2.3.2 Modelle für die Regression	47
3.3.2.3.3 Response Surface	48
3.4 Free Software und Open-Source Software	50

4	Material und Methoden.....	54
4.1	CFD- Modell.....	54
4.1.1	<i>Annahmen und Vereinfachungen.....</i>	<i>55</i>
4.1.2	<i>Turbulenz.....</i>	<i>57</i>
4.1.2.1	<i>k- ϵ- Modell.....</i>	<i>59</i>
4.1.2.2	<i>k- ϵ- RNG- Modell.....</i>	<i>61</i>
4.1.3	<i>Phasentrennung.....</i>	<i>62</i>
4.1.4	<i>Diskretisierung.....</i>	<i>68</i>
4.1.4.1	<i>Finte- Volumen- Methode.....</i>	<i>69</i>
4.1.4.2	<i>Zeitdiskretisierung</i>	<i>70</i>
4.1.4.3	<i>Räumliche Diskretisierung.....</i>	<i>71</i>
4.1.5	<i>Lösung der Gleichungen.....</i>	<i>77</i>
4.1.5.1	<i>Ablauf der Lösung.....</i>	<i>78</i>
4.1.5.2	<i>Anfangs- und Randbedingungen.....</i>	<i>81</i>
4.1.5.3	<i>Interpolations- und Approximationsschemata</i>	<i>86</i>
4.1.5.4	<i>Lösung der algebraischen Gleichungssysteme.....</i>	<i>90</i>
4.2	Verwendete Software	92
4.2.1	Salome.....	92
4.2.2	OpenFOAM.....	93
4.2.3	R.....	94
4.2.4	ParaView.....	95
4.3	Experimente	96
4.3.1	<i>Auslaufzeit.....</i>	<i>97</i>
4.3.2	<i>Druck.....</i>	<i>99</i>
4.4	Simulationen.....	101
4.4.1	<i>Validierung und Benchmarking des CFD-Modells.....</i>	<i>101</i>
4.4.2	<i>Studie 1.....</i>	<i>104</i>
4.4.3	<i>Studie 2.....</i>	<i>106</i>
4.4.4	<i>Überprüfung der Modelle: Verifikation und Validierung.....</i>	<i>108</i>
5	Ergebnisse.....	110
5.1	Validierung des CFD- Modells.....	110
5.1.1	<i>Entleerungsdauer.....</i>	<i>111</i>
5.1.2	<i>Druck in der Flasche während der Entleerung.....</i>	<i>113</i>
5.2	Ergebnisse der Parameterstudien.....	114
5.2.1	<i>Studie 1.....</i>	<i>114</i>

5.2.1.1	Durchmesser der Mündung.....	120
5.2.1.2	Neigung der Flasche.....	123
5.2.1.3	Oberflächenspannung.....	126
5.2.1.4	Interaktion der Parameter.....	128
5.2.2	Studie 2.....	131
5.2.2.1	Durchmesser der Mündung.....	134
5.2.2.2	Halsform.....	136
5.2.2.3	Einbuchtung der Flasche.....	138
5.2.2.4	Interaktion der Parameter.....	141
5.3	Mathematische Methoden.....	144
6	Diskussion.....	147
6.1	Auslaufen der Flasche.....	147
6.1.1	Einfluss der Form.....	149
6.1.2	Einfluss von Neigung und Oberflächenspannung.....	151
6.2	Vergleich der empirischen Modelle und des CFD- Modells.....	154
6.3	Eignung des CFD- Modells.....	155
6.4	Versuchsplanung und Auswertung.....	159
6.5	Verwendung von F/OSS- Software.....	161
7	Ausblick.....	162
	Literaturverzeichnis.....	164
	Anhang A: Statistische Ergebnisse.....	174
1	Regression Studie 1.....	174
1.1	Regression Gl. 76 (Polynom 1. Ordnung).....	174
1.2	Regression Gl. 77 (Polynom 2. Ordnung).....	175
2	Regression Studie 2.....	176
2.1	Regression Gl. 78 (Polynom 1. Ordnung).....	176
2.2	Regression Gl. 79 (Polynom 2. Ordnung).....	177
	Anhang B: Verfahrensweisen in OpenFOAM.....	178
1	Parameter.....	178
1.1	0- und Zeitverzeichnisse.....	180
1.2	constant- Verzeichnisse.....	187
1.3	system- Verzeichnisse.....	190
2	Verfahrensweisen.....	196
2.1	OpenFOAM-Versionen.....	196
2.2	Verfahrensweise zur Gittergenerierung.....	196
2.3	Verfahrensweise bei Abbruch.....	198

Nomenklatur

C	$[1]$	„Wallis Konstante“
C_P	$[1]$	Anzahl der <i>Centralpoints</i> (Zentralenversuchpunkte)
C_μ	$[1]$	Konstante k- ϵ - Modell und k- ϵ - RNG Modell
$C_{1\epsilon}$	$[1]$	Konstante k- ϵ - Modell und k- ϵ - RNG Modell
$C_{1\epsilon}^*$	$[1]$	Konstante k- ϵ - RNG Modell
$C_{2\epsilon}$	$[1]$	Konstante k- ϵ - Modell und k- ϵ - RNG Modell
Co	$[1]$	Courant- Zahl
Co_P	$[1]$	Courant- Zahl der Phasengrenze
d	$[m]$	Durchmesser der Flaschenmündung $[m]$
E	$[\frac{J}{mol\ kg}]$	Totale Energie pro Masse
$\vec{f}_e$	$[\frac{N}{m}]$	Externer Kraftvektor
f_b	$[\frac{m}{s^2}]$	Externe Kräfte
F	$[1]$	Anzahl der Faktoren eines Versuchsplans
g	$[9,81 \frac{m}{s^2}]$	Erdanziehungskraft
H	$[\frac{J}{mol}]$	Totale Enthalpie
$\vec{J}_\phi$	$[\frac{m}{s}]$	Molekularer Flussvektor
k	$[\frac{m^2}{s^2}]$	Turbulente kinetische Energie
N	$[1]$	Anzahl der Versuche je Versuchsplan
Ma	$[1]$	Mach Zahl (Geschwindigkeit)
R_{Gas}	$[\frac{J}{kg\ K}]$	Gaskonstante
S	$[1]$	Anzahl der Faktorstufen je Faktor
S_ϕ	$[1]$	Quellterm der Bilanzgleichung
$S_{ij}, \mathbf{S}$	$[\frac{N}{m^2}]$	Deformationstensor
t	$[s]$	Zeit

$\boldsymbol{T}$	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$	Deviatorischer viskoser Spannungstensor
T	$[K]$	Temperatur
T_e	$[s]$	Gesamtleerungszeit der Flasche
T_{e0}	$[s]$	Gesamtleerungszeit der Flasche, mit Druckausgleich (2. Öffnung in der Flasche)
T_M	$[s]$	Mittlungsintervall
$\boldsymbol{I}$	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$	Einheitsspannungstensor
l	$[m]$	Durchmesser der großen turbulenten Wirbel
L	$[m]$	Charakteristische Länge
p	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$	Druck
p_g	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$	Gesamtdruck
p_d	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$	Dynamischer Druck/ Staudruck
p_s	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$	Statischer Druck
q_H	$[J]$	Energiequelle
V	$[L]$	Volumen der Flasche
$\vec{v}$	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeitsvektor
$\boldsymbol{U}$	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeitsfeld
$\boldsymbol{U}_g$	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeitsfeld der Gasphase
$\boldsymbol{U}_f$	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeitsfeld der Flüssigphase
$\boldsymbol{U}_p$	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeitsfeld der Phasengrenze
u	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeit
u_τ	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeit an der Wand
u_P	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeit am Punkt P

$\vec{v}$	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Geschwindigkeitsvektor
w	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Charakteristische Geschwindigkeit
W_f	$[J]$	Arbeit der externen Volumenkräfte
x	$[1]$	Ortskoordinate eines Punktes
x_1	$[1]$	Durchmesser der Mündung [mm]
x_2	$[1]$	Neigung der Flasche [°]
x_3	$[1]$	Oberflächenspannung [N/ m]
x_4	$[1]$	Durchmesser der Mündung [mm]
x_5	$[1]$	Halsform [1-3; 1= ohne Hals, 2= Kegelstumpf, 3= Rohr]
x_6	$[100\%]$	Einbuchtung
y	$[1]$	Abhängige Variable der Stichprobe
y	$[m]$	Abstand zur Wand
y_P	$[m]$	Abstand zum Punkt P
$\hat{y}$	$[1]$	Prognostizierte abhängige Variable der Stichprobe

Griechische Buchstaben:

α	$[1]$	Volumenfraktion
α	$[^\circ]$	Kontaktwinkel
$\alpha_k, \alpha_\epsilon$	$[1]$	Konstante k- ϵ - RNG Modell
β	$[1]$	Konstante k- ϵ - RNG Modell
$\beta_0, \beta_1, \beta_k$	$[1]$	Konstanten der Regressionsmodelle
γ	$[1]$	s. α
ϕ	$[1]$	Allgemeine Variable
ϵ	$\left[\frac{m^2}{s^2}\right]$	Dissipation
ϵ	$[1]$	Fehlerterm des Regressionsmodells
σ	$[1]$	Standardabweichung
σ	$\left[\frac{N}{m}\right]$	Oberflächenspannung
σ	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$	Normalspannungstensor
σ^2	$[1]$	Varianz

σ_k	[1]	Konstante k- ε- Modell
σ_ϵ	[1]	Konstante k- ε- Modell
η	[1]	Konstante k- ε- RNG Modell
κ	$[\frac{1}{m}]$	Krümmung
κ	[1]	Isentropenexponent
κ	[1]	Karmann Konstante
τ	$[\frac{N}{m^2}]$	Schubspannungstensor
θ	$[\frac{m}{s}]$	Geschwindigkeit der großen turbulenten Wirbel
ρ	$[\frac{K \cdot g}{m^3}]$	Dichte
$\bar{\mu}$		Mittelwert
μ	$[\frac{Pa}{s}]$	Dynamische Viskosität
μ_{eff}	$[\frac{Pa}{s}]$	Effektive Viskosität
μ_t	$[\frac{Pa}{s}]$	Turbulente Viskosität
ν	$[\frac{m^2}{s}]$	Kinematische Viskosität
ρ_L, ρ_G	$[\frac{K \cdot g}{m^3}]$	Dichte der Flüssigphase (<i>liquid</i>) und Gasphase

Mathematische Zeichen und Sonstiges

∇ Nabla- Operator

$\Re$ [1] Reynoldszahl

Abkürzungsverzeichnis

ANOVA	<i>Analysis of Variance (engl.)</i>
CAD	<i>Computer Aided Design (engl.)</i>
CAE	<i>Computer Aided Engineering (engl.)</i>
CCD	<i>Central Composite Design (engl.)</i>
CCF	<i>Central Composite Facing Design (engl.)</i>
Co	<i>Courant- Number (engl.)</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
FDM	<i>Finite Difference Method (engl.)</i>
FEM	<i>Finite Element Method (engl.)</i>
FVM	<i>Finite Volume Method (engl.)</i>
F/OSS	<i>Free – and Open-Source software (engl.)</i>
Gl.	Gleichung
GUI	<i>Graphical user interface (engl.)</i>
KV	Kontrollvolumen
LBM	<i>Lattice- Boltmann- Method (engl.)</i>
LES	<i>Large Eddy Simulation (engl.)</i>
LS	<i>Level- Set- Method (engl.)</i>
MANOVA	<i>Multivariate Analysis of Variance (engl.)</i>
RANS	<i>Reynolds-averaged Navier–Stokes Equation (engl.)</i>
RNS	s. RANS
RSM	<i>Response Surface Methology (engl.)</i>
RSD	<i>Response Surface Diagram (engl.)</i>
SIMPLE	<i>Semi implicit method for pressure linked equation (engl.)</i>
PDE	<i>Partial differential equation (engl.)</i>
PISO	<i>Pressure implicit splitting of operators (engl.)</i>

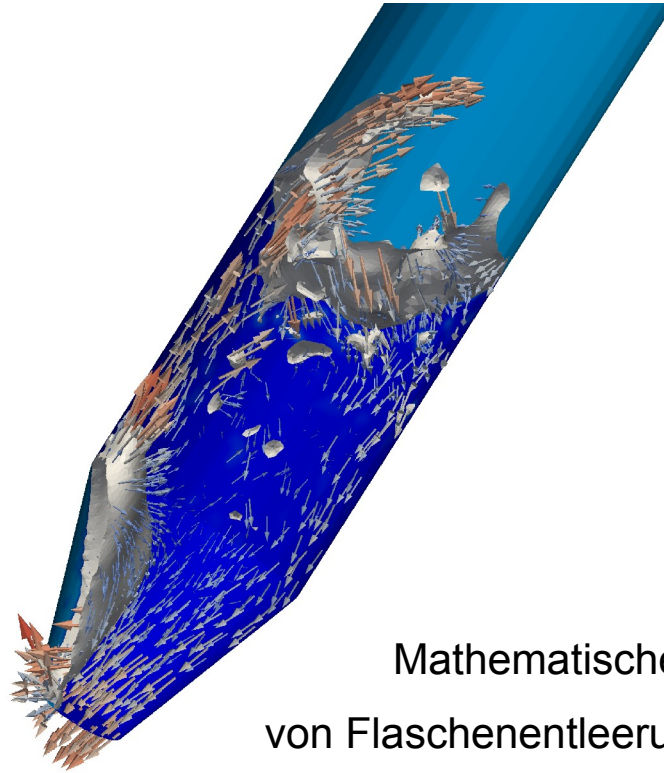
Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Strömungsphänomene beim Leeren einer Flasche.....	6
Abbildung 2: Flaschenwaschmaschine (Quelle: KHS GmbH).....	8
Abbildung 3: Kontaktwinkel und Oberflächenspannung.....	13
Abbildung 4: a) partielle Benetzung und b) vollständige Benetzung.....	13
Abbildung 5: Rohrströmung.....	15
Abbildung 6: Strömungsformen im horizontalen Rohr.....	17
Abbildung 7: Strömungsformen im senkrechten Rohr.....	18
Abbildung 8: Typische Blasenformen.....	18
Abbildung 9: Methoden der Versuchsplanung im Beispiel.....	26
Abbildung 10: Ein- Variablen- Versuchsplan.....	28
Abbildung 11: faktorieller Versuchsplan	29
Abbildung 12: vollfaktorielles Design für 3 Faktoren auf 3 Faktorstufen.....	30
Abbildung 13: CCD- Design.....	31
Abbildung 14: CCF- Design	32
Abbildung 15: Box- Behnken Design.....	33
Abbildung 16: A-Optimales Design	35
Abbildung 17: D-Optimales Design	35
Abbildung 18: I-Optimales Design	35
Abbildung 19: Monte Carlo Design.....	36
Abbildung 20: Versuchsplan ().....	38
Abbildung 21: Versuchsplan ().....	38
Abbildung 22: Musterversuchsplan.....	39
Abbildung 23: Leverage für den Box-Behnken-Plan.....	40
Abbildung 24: Leverage für den Box-Behnken-Plan.....	40
Abbildung 25: Muster Residuenplot.....	44
Abbildung 26: Vergleich von gemessenen und prognostizierten Y-Werten.....	45
Abbildung 27: Musterergebnisse einer Varianzanalyse (ANOVA).....	46
Abbildung 28: Response Surface Plot in 3D.....	48
Abbildung 29: Response Surface Plot in 2D.....	48
Abbildung 30: Ablauf einer RSM.....	49
Abbildung 31: Organisationsprinzip Kathedrale.....	51
Abbildung 32: Organisationsprinzip Basar.....	53
Abbildung 33: Methoden zur Phasentrennung.....	62
Abbildung 34: Methoden zum Phasengrenzenverlauf.....	65
Abbildung 35: Verschmierung der Phasengrenze.....	66
Abbildung 36: Kontrollvolumen.....	69
Abbildung 37: a) Tetra- und b) Hexaedergitter	71
Abbildung 38: Ablauf der Gittergenerierung.....	73
Abbildung 39: Ablauf der Gittergenerierung.....	74
Abbildung 40: Parallelisierung des Rechengitters.....	76
Abbildung 41: Ablauf der Lösung.....	78
Abbildung 42: Ablauf des SIMPLE- Verfahrens.....	79
Abbildung 43: Ablauf des PISO- Verfahrens.....	80
Abbildung 44: Randgebiete.....	82
Abbildung 45: Strömung an der Mündung.....	82
Abbildung 46: Approximation einer Ableitung.....	86
Abbildung 47: Vergleich numerische und analytische Lösung.....	88
Abbildung 48: Salome CAD-Software.....	92

Abbildung 49: ParaView.....	95
Abbildung 50: verwendete Flaschen (Schlegel 1 L und Ale 0,333 L)	97
Abbildung 51: Anstellwinkel der Flaschen (180° und 135°)	97
Abbildung 52: Bild der auslaufenden Flasche.....	97
Abbildung 53: Versuchsaufbau der Experimente.....	98
Abbildung 54: MSR 145 W Sensor.....	99
Abbildung 55: Flasche mit MSR 145 W Sensor.....	100
Abbildung 56: Kippwinkel der Flasche.....	104
Abbildung 57: Durchmesser der Mündung.....	104
Abbildung 58: Stufen bei der Überprüfung eines Modells	108
Abbildung 59: Vergleich der Entleerungszeit der Flaschen in aufrechter Position	111
Abbildung 60: Vergleich der Entleerungszeit der Flaschen in gekippter Position	112
Abbildung 61: Vergleich des Drucks am Boden der Flasche.....	113
Abbildung 62: Musterflasche der Studie 1 (S1- 1).....	114
Abbildung 63: Ergebnisse der Simulationen (Balken logarithmisch skaliert).....	115
Abbildung 64: RSDs, die die Auslaufzeit [s] für verschiedene Konfigurationen.....	117
Abbildung 65: RSD für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 2. Ordnung.....	118
Abbildung 66: RSD für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 1. Ordnung.....	118
Abbildung 67: Effekt der Mündung (logarithmisch Zeitskala)	120
Abbildung 68: Auslaufende Flasche mit verschiedenen Mündungsdurchmessern.	121
Abbildung 69: Druck am Boden der Flasche, während des Auslaufens.....	122
Abbildung 70: Effekte der Neigung.....	123
Abbildung 71: Vergleich von Simulationen mit verschiedenen Neigungswinkeln.....	123
Abbildung 72: auslaufende Flasche: a) 180°- und b) 150°-Position	124
Abbildung 73: auslaufende Flasche: a) 180°- und b) 150°-Position.....	125
Abbildung 74: Effekt der Oberflächenspannung auf die Auslaufzeit.....	126
Abbildung 75: direkter Vergleich einzelner Simulationen.....	127
Abbildung 76: Einfluss von Neigung und Mündungsdurchmesser.....	128
Abbildung 77: RSD für Mündungsdurchmesser und Oberflächenspannung.....	129
Abbildung 78: RSD für Neigung und Oberflächenspannung.....	130
Abbildung 79: Ergebnisse der Simulationen S2.....	131
Abbildung 80: Flasche a) S2- 6 und b) S2- 3.....	131
Abbildung 81: RSD für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 1. Ordnung.....	132
Abbildung 82: RSD für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 2. Ordnung (Gl. 82).....	133
Abbildung 83: RSD für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 2. Ordnung (Gl. 82).....	133
Abbildung 84: Effekt der Mündung auf die Auslaufzeit.....	134
Abbildung 85: Vergleich verschiedenener Mündungsdurchmesser.....	135
Abbildung 86: Übersicht über Simulation mit verschiedenen Halsformen.....	136
Abbildung 87: Vergleich einer Simulation mit verschiedenen Halsformen.....	136
Abbildung 88: Vergleich verschiedener Flaschen mit unterschiedlicher Halsform.....	137
Abbildung 89: Simulationen mit verschiedenen Einbuchtungstiefen der Studie 2.....	138
Abbildung 90: Vergleich von Simulationen mit verschiedenen Einbuchtungen.....	138
Abbildung 91: Vergleich von zwei verschiedenen Einbuchtungstiefen.....	139
Abbildung 92: Restwasser in einer Flasche mit ungünstiger Geometrie.....	140
Abbildung 93: RSD für Mündungsdurchmesser und Einbuchtung.....	141
Abbildung 94: RSD der Wechselwirkung von Mündungsdurchmesser und Halsform	142
Abbildung 95: RSD der Wechselwirkung von Halsform und Einbuchtung.....	143
Abbildung 96: Phasenverteilung während des Leerungsprozesses.....	144
Abbildung 97: Geschwindigkeits- und Druckverteilung.....	145
Abbildung 98: Strömungslinien und Verteilung der turbulenten kinetischen Energie.	145
Abbildung 99: Strömungsphänomene beim Leeren einer Flasche.....	149

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Entleerungsdauer für verschiedene Flaschen	6
Tabelle 2: C- Werte für verschiedene Flaschen.....	22
Tabelle 3: Vergleich von numerischen Lösungsmethoden.....	68
Tabelle 4: Übersicht Experimente.....	96
Tabelle 5: Kennzahlen der realen Experimente mit Ale und Schlegelflasche.....	98
Tabelle 6: CFD- Simulationen zur Validierung.....	102
Tabelle 7: Simulation mit den empirischen Modellen.....	103
Tabelle 8: Versuchsplan Studie 1.....	105
Tabelle 9: Versuchsplan Studie 2.....	105
Tabelle 10: Flaschen der Studie 2.....	107



Mathematische Modellierung
von Flaschenentleerungsprozessen

1 Einleitung

Die Getränkeindustrie hat eine große Bedeutung für die Bevölkerung eines Landes. Ihre Produkte, Getränke, sind elementarer Bestandteil der Ernährung und lebensnotwendig. Dies gilt im Besonderen in Regionen der Welt, in denen kein sauberes Trinkwasser zu Verfügung steht. In den westlichen Industrieländern ist die sichere Wasserversorgung mit Trinkwasser zwar selbstverständlich, und die Wahl des Getränks wird tendenziell aus *Lifestyle*-Gründen getroffen, aber fehlerhafte Produkte können immense Folgen haben. Daher muss jeder Hersteller bei der Produktion größte Sorgfalt walten lassen. Die Getränkebranche verfügt zwar über große Erfahrung in diesem Bereich, aber der Markt stellt die einzelnen Betriebe der Getränkebranche immer wieder vor große Herausforderungen.

Maßgebliche Veränderungen wurden im Besonderen durch den Einsatz von PET als Verpackungsmaterial verursacht. Die besonderen Eigenschaften des Materials erlauben, dass es sehr einfach in verschiedene Formen gebracht werden kann (Achhammer et al., 2005, S. 33). Im Gegensatz zu Glas, das nur im heißen Zustand geblasen werden kann, kann PET im kalten Zustand in Form geblasen werden (Blüml & Fischer, 2004, S. 93). Dieser Vorteil des Materials und verschiedene andere Gründe, wie u.a. Marketing, Transportkosten, Flaschenpfand und Verbrauchersicherheit, haben dazu geführt, dass eine Vielzahl an neuen Flaschenformen auf den Markt kam und täglich neue Varianten der Flaschen hinzukommen. Hierbei ist sowohl die Entwicklung der Flasche selbst als auch die Anpassung des Prozesses wichtig. Jeder neuer Flaschentyp muss vor seiner Markteinführung auf die Verarbeitbarkeit geprüft werden (Achhammer et al., 2005, S. 33). Der Reinigungsprozess einer PET Flasche weist dabei besondere Schwierigkeiten auf, die so nicht bei Glas auftreten, z.B. eine verminderte Hitzebeständigkeit und Formstabilität.

Neben den lokalen und globalen gesetzlichen Regelungen ist insbesondere die Absicht einer nachhaltigen Produktion von großer Bedeutung. Während in den 1960ern und 1970ern produktbezogene Umweltlösungen noch im Hintergrund standen und im Wesentlichen nur „*repair solutions*“ durchgeführt wurden, haben in den 1980ern und 1990ern Öko-Effizienz und neuerdings auch nachhaltige Lösungen eine hohe Bedeutung erlangt (Hauschild et al., 2005, o. S.). Eine nachhaltige Lösung ist eine sowohl wirtschaftlich als auch ökologisch und sozial langfristig tragbare Lösung. Almeida et al. (2010, S. 32) konnten bei einem Nachhaltigkeitsvergleich von PET-

Flaschen und Aluminiumdosen zeigen, dass die Gesamtkosten und Umwelteinflüsse sehr stark vom endgültigen Design des Prozesses abhängen. Hauschild et al. (1999, S. 393 f.) gelang der Nachweis, dass nur durch ausreichendes Prozesswissen ein nachhaltiges Produkt entstehen kann. Ein besseres Prozesswissen ist folglich der Schlüssel zu einer nachhaltigen Produktion.

Die Hersteller müssen ihre Produkte mit gleicher oder höherer Sicherheit in immer neue Behältnisse abfüllen, ohne dabei die Nachhaltigkeit ihrer Produkte aus den Augen zu verlieren. Die mathematische Simulation und Modellierung bietet einige Methoden und Techniken, um Prozesse und ihre Details besser verstehen zu können. Um dies zu ermöglichen, werden nicht-mathematische Probleme durch die Modelle in die Sprache der Mathematik übersetzt (Velten, 2009, S. 20). Für den Flaschenreinigungsprozess sind im Besonderen CFD- Simulationen sehr hilfreich, da Flaschen und der dazugehörige Prozess besser untersucht und optimiert werden können. Detaillierte Information kann sowohl die Sicherheit eines Prozesses gewährleisten als auch den Energie- und Ressourcenverbrauch senken.

2 Fragestellung

Die Kernaufgabe dieser Arbeit ist die Methodenentwicklung zur Quantifizierung von Strömungsphänomenen im Flaschenreinigungsprozess. Die Flaschengeometrie, die Ausrichtung der Flasche und die Oberflächenspannung der Flüssigkeiten sollen auf ihre Bedeutung und ihre Wechselwirkung hin untersucht werden. Hierzu werden die Möglichkeiten der mathematischen Modellierung genutzt. Dabei sind geeignete Methoden zu entwickeln und zu implementieren. Die Implementierung soll hierbei auf Basis von *Open-Source-Software* erfolgen, um die Ergebnisse uneingeschränkt zugänglich und nutzbar zu machen. Eine ausführliche Beschreibung der Untersuchungsziele und der zu entwickelnden Methoden werden im Folgenden dargestellt.

Ein schnelleres Leeren der Flasche im Reinigungsprozess erhöht den möglichen Flaschendurchsatz und erlaubt, Anlagen kleiner zu konzipieren. Daher sind eine genaue Prognose der benötigten Zeit zum Entleeren sowie die Beantwortung der Frage, welche Parameter diese Zeit entscheidend beeinflussen, die wichtigsten Untersuchungsziele. Der Einfluss der Flaschenausrichtung ist zu ermitteln. Fraglich ist z. B., ob eine geneigte Flasche schneller oder langsamer leer läuft. Genauso ist der Effekt der Oberflächenspannung der verwendeten Fluide zu untersuchen, die durch Zugabe von Tensiden leicht verändert werden kann. Die Geometrie der Flasche lässt sich in verschiedene Unterparameter, wie unter anderem den Durchmesser der Mündung, die Form des Flaschenhalses, die Höhe der Flasche und die Gestaltung der Oberfläche, zerlegen. Die Einflussgröße der Flaschengeometrie hat in den letzten Jahren an Bedeutung gewonnen, da mit der flächendeckenden Verwendung von PET-Flaschen auch die Anzahl der verwendeten Flaschenformen angestiegen ist. Die Hersteller von Getränken haben den Umstieg von der Glasflasche zur PET-Flasche häufig genutzt, um ihre Marke optisch von der Konkurrenz zu diversifizieren. Die Fertigung und das Betreiben von Getränkeabfüllanlagen wird durch diese Tatsache jedoch erheblich erschwert, da für jede Flasche ein individuelles Anlagensetup nötig ist. Die bestehenden Anlagen können durch die Verwendung von neuen Flaschentypen erheblich an Effizienz verlieren, wenn keine Anpassung des Setups durchgeführt wird. Für neue Anlagen sind hingegen umfangreiche Prototypentests nötig. Bisher sind die erforderlichen Versuchsreihen in der Regel in praktischen Experimenten durchgeführt worden.

3 Stand der Wissenschaft

In der Arbeit werden die Erkenntnisse verschiedener Forschungsgebiete zusammengeführt und nutzbar gemacht. Die Getränketechnologie liefert das nötige Wissen über die Prozesse, und die Mathematik stellt die Grundlagen für die Simulation und Modellierung dar. Zuerst erfolgt ein Überblick über den aktuellen Stand der Forschung in diesem Kapitel, während in 4 eine detaillierte Darstellung der Methoden erfolgt, wobei besonders die Methoden der CFD genauer beschrieben werden, da bisher wenige wissenschaftliche Erkenntnisse zur mathematischen Beschreibung von Strömungen in Flaschen mit numerischen Methoden vorliegen.

3.1 Getränketechnologische Aspekte

Die Getränketechnologie beinhaltet alle Prozessschritte von der Verarbeitung der Rohware bis hin zur Lagerung und zum Abtransport des fertigen Getränks. Die Vielfalt der Getränke und deren mögliche Verpackungen erfordern produktabhängig eine Vielzahl von technischen Prozessen. Die Anforderungen, die durch unterschiedliche Produkte an die einzelnen Prozesse gestellt werden können, sind hierbei sehr unterschiedlich und setzen zum Teil sehr spezielles Fachwissen voraus.

In dieser Arbeit werden die Strömungen in Flaschen genauer untersucht. Flaschen und ähnliche Behälter sind aus dem täglichen Leben nicht wegzudenken. Sie dienen als Verpackung und Transportbehälter für die verschiedensten Flüssigkeiten oder Gase. Eine typische Flasche besteht aus einem zylinderähnlichen Korpus und hat eine Öffnung an der Oberseite, an der die Flasche verschlossen werden kann. Die verwendeten Flaschenformen sind sehr unterschiedlich. Getränkeflaschen sind meistens aus Glas oder Kunststoff gefertigt und werden entweder als Einweg- oder Mehrwegverpackungen verwendet. Die Getränkeflaschen wurden schon auf verschiedenen Forschungsgebieten der Wissenschaft genauer betrachtet. Die Forschung beschäftigt sich u.a. mit der Stabilität, der Interaktion von Inhalt und Material, der Durchlässigkeit, der Verschleißbarkeit und vielen weiteren Aspekten. In den durchzuführenden Studien steht der Strömungsverlauf in Flaschen im Vordergrund und somit primär der Einfluss der Geometrie.

3.1.1 Strömung in Flaschen

Eine genaue Betrachtung der aktuellen Forschung zum Füllen und Leeren von Flaschen zeigt verschiedene Schwerpunkte. Zum einen wird die Nutzerfreundlichkeit für den Verbraucher erhöht, zum anderen wird die Effizienz der Produktion gesteigert. Die Nutzerfreundlichkeit für Verbraucher lässt sich in verschiedener Hinsicht verbessern. Studien von Chihara et al. (2009, S. 264 ff.) belegen, dass für Trinkflaschen das ausströmende Volumen und die Regulierbarkeit des Volumenflusses von besonderer Bedeutung sind, wobei der optimale Mündungsdurchmesser vom Getränk abhängt (Chihara & Yamazaki, 2012, S. 157). Aber nicht nur Trinkflaschen werden optimiert. So hat BASF (2012, S. 6) eine Reihe von optimierten Flaschenverpackungen für Pflanzenschutzmittel präsentiert, die sich u. a. durch eine völlig glucker- und spritzfreie Entleerbarkeit auszeichnen, um den Anwenderschutz maßgeblich zu erhöhen.

Untersuchungen zum Strömungsbild beim Entleeren einer Flasche wurden von Wallis (1961, o. S.), Whalley (1987S. 723 ff.), Whalley (1991S. 145 ff.), Tehrani et al. (1994 o. S.), Clanet & Searby (2004, S.145), Skakauskas et al. (2006, S. 277), Kohira et al. (2007, S. 1 ff.), Kohira et al. (2009, S. 103 ff.) und Kohira et al. (2012, S. 196) durchgeführt. Zusätzlich liefert die Forschung von Tehrani et al. (1992, S. 977 ff.), Khuri et al. (1996, S. 1023 ff.) und Koukouvaos & Kubie (2001, S. 1189 ff.) wichtige Erkenntnisse über das Strömungsverhalten an Engstellen, welche von zwei Fluiden in unterschiedlicher Richtung passiert werden müssen. Bereits die ersten Untersuchungen von Wallis (1961, o. S.) versuchen, den Prozess mathematisch zu beschreiben und führen die dimensionslose Kennzahl C („Wallis- Konstante“) ein, welche die Dauer des Füll- und Entleerungsprozesses für ausgewählte Flaschen beschreibt. Diese grundlegende Idee wurde von Tehrani et al. (1992, S. 977 ff.) und Whalley (1991, S. 145 ff.) zu einem vollständigen Modell entwickelt, s. 3.3.1.1.1.

Einzelne allgemein gültige Gesetzmäßigkeiten, die das Strömungsverhalten beim Leeren einer Flasche beschreiben, sind deshalb bisher nur in geringer Anzahl gefunden worden, da das System sehr komplex ist und die verschiedenen Einflussgrößen stark interagieren. Tehrani et al. (1994, o. S.) konnten mit Experimenten, s. Tab. 1, belegen, dass durch eine erhöhte Wassertemperatur die Entleerungszeit reduziert werden kann. Die erhöhte Wassertemperatur verändert sowohl die Viskosität als auch die Oberflächenspannung. Tehrani et al. (1994, o. S.)

vermuten, dass eine gesenkte Viskosität (3.2) die Entleerungsdauer reduziert, während eine gesenkte Oberflächenspannung (3.2.1) zu einer Verlängerung der Entleerung führt. Dem folgend hat die Viskosität einen größeren Einfluss auf den Prozess.

Kennzahlen Flasche			Entleerungsdauer			
Flasche Nr.	Volumen [mL]	Mündungsdurchmesser [mm]	15°C [s]	30°C [%]	60°C [%]	93°C [%]
1	1550	19,6	27,4	96,0 %	93,0 %	84,0 %
2	1520	20,6	19,9	95,0 %	93,0 %	87,0 %
3	2900	15,0	64,21	97,5 %	92,4 %	84,0 %
4	2900	28,0	14,5	98,5 %	93,0 %	82,0 %

Tabelle 1: Entleerungsdauer für verschiedene Flaschen in Abhängigkeit zur Temperatur (Quelle: Tehrani et al. (1994, o. S.))

Hewitt (1982, o. S.) stellte zudem fest, dass Flaschen, die um 30°-45° zur senkrechten Kopfüberposition gekippt sind, schneller leer laufen. Ein Problem bei den meisten durchgeführten Studien ist, dass die Ergebnisse in der Regel nur für die untersuchten Flaschen gültig sind. In vielen Studien, wie z. B. Clanet & Searby (2004, S. 145 ff.), werden die Flaschen geometrisch zusätzlich noch stark vereinfacht. Eine vereinfachte Flasche könnte z. B. ein Stück Rohr sein, welches oben geschlossen ist und unten eine Öffnung von beliebigem Durchmesser hat.

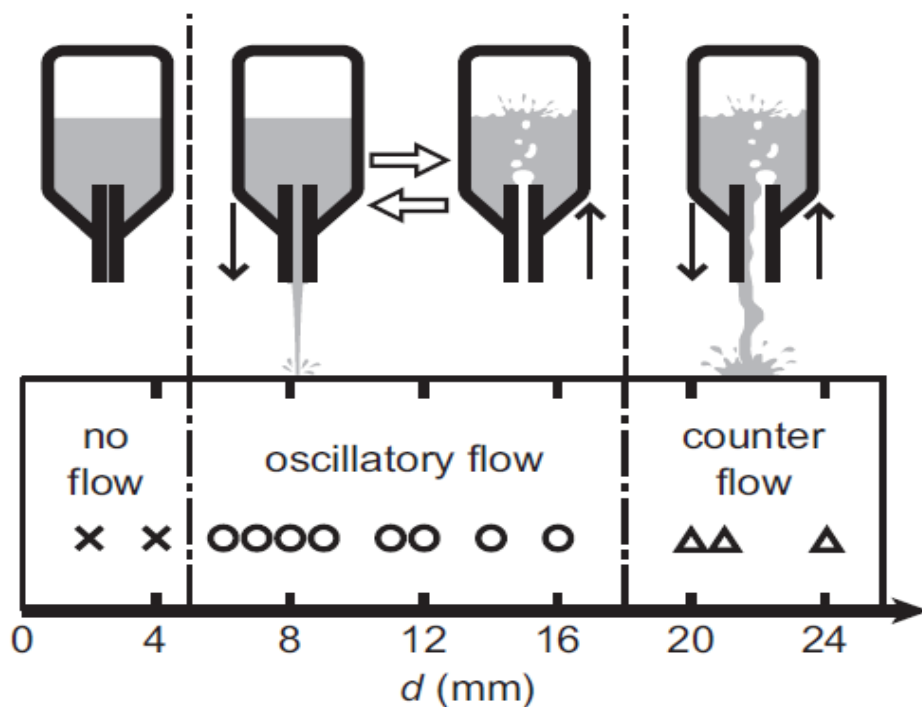


Abbildung 1: Strömungsphänomene beim Leeren einer Flasche (Quelle: Kohira et al. (2007, S. 9))

Der Durchmesser der Mündung ist nicht nur verantwortlich für die Durchflussmenge, sondern bestimmt auch die Art der Strömungen, welche auftreten. Kohira et al. (2007, S. 9) entwickelte ein Strömungsdiagramm (Abb. 1), das die verschiedenen Strömungen beim Auslaufen beschreibt. Kohira et al. (2007, S. 1 ff.) folgend muss zwischen oszillierender und gegenläufiger Strömung unterschieden werden. Zudem muss die Mündung einen gewissen Durchmesser haben, sonst wird die Flüssigkeit von den Kapillarkräften gegen die Schwerkraft in der Flasche gehalten.

Das gegenläufige Strömungsregime ist vom gleichzeitigen Einströmen der gasförmigen Phase und dem Ausfluss der flüssigen Phase gekennzeichnet und verläuft sehr gleichmäßig. Tehrani et al. (1992, (S. 978)) teilt das oszillierende Strömungsregime in vier Phasen ein: (a) dem Ausfluss der Flüssigkeit, (b) dem Aufsteigen der Gasblase, (c) dem Druckausgleich und (d) der Wiederfüllung der Mündung mit Flüssigkeit.

3.1.2 Ablauf der Flaschenreinigung

Die industrielle Flaschenreinigung ist ein hoch komplexer Vorgang, und jede Maschine ist ein Unikat, welches speziell nach den Wünschen des Nutzers angefertigt wird. Das genaue Design einer Flaschenwaschmaschine hängt von der benötigten Leistung, der Art der Flaschen, der typischen Verschmutzung der Flasche und den räumlichen Gegebenheiten des Abfüllbetriebs ab. Grundsätzlich wird in Ein- und Doppelendmaschinen, weiterhin in Ein- und Mehrlaugenmaschinen unterschieden (Achhammer et al., 2005, S. 12). Die Zufuhr der verschmutzten Flaschen und die Abgabe der gereinigten Flaschen befinden sich bei Einendmaschinen auf derselben Seite der Maschine. In Abb. 102 ist eine Doppelendmaschine zu sehen. Die Flaschenzufuhr und -abfuhr wird an verschiedenen Enden der Maschine vorgenommen. Die räumliche Trennung von verschmutzten und gereinigten Flaschen bringt insbesondere hygienische Vorteile mit sich.

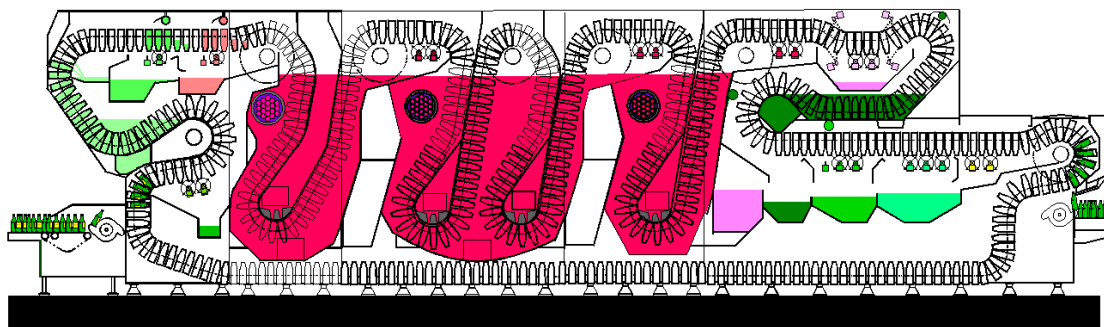


Abbildung 2: Flaschenwaschmaschine (Quelle: KHS GmbH)

Auch wenn der Aufbau einzelner Maschinen sehr unterschiedlich sein kann, so ist doch das grobe Schema oft sehr ähnlich. Achhammer et al. (2005 S. 15 ff.) teilen eine typische Flaschenreinigungsmaschine in acht Bereiche ein, die sie -wie folgt- beschreiben: (a) Restentleerung, (b) Vorweiche, (c) Vorlauge, (d) Laugenweichezone und Laugenspritzung, (e) Zwischenspritzung, (f) Warmwasserzone, (g) Kaltwasserzone, (h) Frischwasserspritzung. Die (a) Restentleerung hat zum Ziel, frei ablaufende Produktreste aus der Flasche zu entfernen, ohne den Einsatz von Wasser und Reinigungsmitteln zu benötigen. In der (b) Vorweiche werden die Flaschen mit gebrauchtem Wasser zum einen auf Temperatur gebracht, zum anderen von leicht zu lösenden Verschmutzungen befreit. Die Vorweiche kann zudem je nach Maschine um einige Spritzstationen ergänzt sein. Neben der langsamen Erwärmung der Flaschen zur Vermeidung von Spannungsrissen und -brüchen wird auf diese

Weise auch das Bauchwasser abgekühlt. Dies ist sowohl energetisch als auch ökologisch von Vorteil. Der nächste Schritt ist die (c) Vorlauge, in der die Flaschen weiter erwärmt werden. Das Herzstück einer jeden Flaschenreinigungsmaschine ist die (d) Laugenweichzone und Laugenspritzung, in der die höchsten Temperaturen erreicht werden. Die Abschnitte (e) Zwischenspritzung, (f) Warmwasserzone und (g) Kaltwasserzone haben die Aufgabe, den Laugeaustrag zu verringern und die Wärmeenergie aus den Flaschen zurückzugewinnen. Bei allen Anlagentypen ist die letzte Behandlung die (h) Frischwasserspritzung, bei der die Flaschen von letzten Reinigungsmittelresten befreit werden (Schlüßler & Mrozek, 1968, S. 17).

Aus dem schematischen Aufbau der Flaschenreinigungsmaschine wird deutlich, dass Energierückgewinnung und Recycling von Frischwasser und Reinigungsmittel wichtig sind. Um dies zu erreichen, ist besonders entscheidend, dass keine Verschleppung von Reinigungsmitteln und Verschmutzung zwischen den verschiedenen Zonen stattfindet. Dies kann zum einen durch ein schlecht gewartetes Transportsystem, zum anderen durch nicht richtig leer gelaufene Flaschen verursacht werden. Eine zu lang gewählte Austropfzeit hingegen geht zu Lasten der Leistung, da weniger Flaschen gereinigt werden können. Die Leerungsdauer einer Flasche hat entscheidenden Einfluss auf den Prozess.

Zu Dauer und Temperatur des einzelnen Reinigungsprozesses lassen sich nur schwer allgemein gültige Aussagen treffen, da dieser immer individuell von der Verschmutzung der Flasche und der verwendeten Maschine abhängt. Achhammer et al. (2005, S. 17) gibt für leicht zu reinigende Glasflaschen eine Tauchzeit von 6 min an, für schwer zu reinigende Flaschen 12 bis 14 min bei einer Reinigungstemperatur von ca. 80° C. Abhängig von dem verwendeten Material muss die Spitzentemperatur gesenkt werden.

3.1.3 Kritische Punkte in der Flaschenreinigung

Asteriadou et al. (2009, S. 948) beschreiben die große Problematik, welche durch ungeeignete Geometrien, welche nicht oder schlecht reinigbar sind, in der Lebensmittelindustrie entstehen kann. Totzonen, in denen die Strömungsgeschwindigkeit gegen null tendiert oder keine Benetzung erfolgt, sind eine stetige Brutstätte für mikrobiologische Verschmutzungen. Die Gründe, weshalb derartige Totzonen entstehen, sind unterschiedlich. Zum einen können konstruktive Fehler bei der Flasche Ursache für derartige Bereiche sein, zum anderen kann eine falsche Prozesssteuerung zu derartigen Problemen führen.

Als konstruktive Fehler müssen alle Totzonen gewertet werden, die auch bei einer verfahrenstechnisch richtig durchgeführten Reinigung nicht erreicht und gesäubert werden können. So konnten Jensen et al. (2007, S. 52) belegen, dass Totzonen sich häufig auch durch pulsierte und beschleunigte Reinigungsströmungen nicht erreichen lassen. Ein Problem sind z. B. Rohrleitungssysteme, in denen nicht alle Bereiche mit genügend Geschwindigkeit erreicht werden können (Fryer & Asteriadou, 2009, S. 255). Verfahrenstechnische Fehler entstehen insbesondere durch den Anwender, der die Reinigungsparameter Dauer, Häufigkeit, Temperatur, Reinigungsmittel und Intensität ohne ausreichende Evaluierung verändert. Die Wahl der richtigen Reinigungsparameter ist oft sehr schwierig, und ökologische und ökonomische Faktoren stehen in starker Konkurrenz. Studien von Wöhler (2002) zeigen, dass Mehrwegflaschen unterschiedlich stark verschmutzt sind. Aus Sicherheitsgründen werden 99 % der Flaschen überreingt, 0,9 % genau richtig gereinigt und 0,1 % unzureichend gereinigt.

Der Prozess der Flaschenreinigung, s. 3.1.2, ist äußerst komplex, da nicht nur verschiedene Flaschentypen gesäubert werden, sondern auch die Art der Verschmutzung sehr unterschiedlich sein kann. Einen umfangreichen Überblick über mögliche Probleme, die auftreten können, und Verfahren zur Flaschenreinigung liefern u. a. Schlüsler & Mrozek (1968) und Achhammer et al. (2005). Typische Schwierigkeiten sind sichtbare Belagsbildung, zu starkes Schäumen, zerfaserte Etikettenreste und ungereinigte Flaschen.

Bzgl. der Flascheninnenströmung ist besonders die Verschleppung von Reinigungsmittel ein großes Problem, da sie großen Einfluss auf die Effizienz des gesamten Reinigungsprozesses hat. Verschleppt werden neben Reinigungsmitteln auch Verunreinigungen (Achhammer et al., 2005, S. 178). Theoretisch wäre auch eine Verbraucherschädigung durch verschleppte Reinigungsflüssigkeit möglich. Dies wird in der Regel aber durch nachgeschaltete Inspektionssysteme ausgeschlossen. Die genaue Kenntnis des Strömungsverlaufs in der Flasche ist zudem für die Quantifizierung des Reinigungs- und Desinfektionserfolgs entscheidend. Schlüsler & Mrozek (1968) konnte schon 1968 klar belegen, dass mechanische Effekte zur Entfernung und Einwirkzeiten zur Abtötung von Keimen enorm wichtig sind.

Achhammer et al. (2005, S. 32 f.) schreiben besonders dem Boden und der Schulter große Bedeutung für die gute Reinigungsmöglichkeit einer Flasche zu. Evers et al. (2009, S. 48) belegen zudem, dass besonders in gerippten Flaschen auch durch Erhöhung des Drucks beim Rinsen das Reinigungsergebnis nur unwesentlich verbessert werden kann. Bisher fehlen jedoch genaue Studien, die Aufschluss über die Strömungen in der Flasche geben könnten. Die einzige dem Autor bekannte CFD-Studie von Hain et al. (2009, o. S.) beschäftigt sich mit dem Füllen von Flaschen.

3.2 Strömungsmechanische Phänomene bei Strömungen in Flaschen

Der in 3.1.2 beschriebene Reinigungsprozess der Flasche besteht im Wesentlichen aus dem wiederholten Untertauchen und Ausspülen der Flasche. In dieser Arbeit stehen besonders das Entleeren der Flasche und die dabei auftretenden Phänomene, wie Oberflächenspannung und Benetzung (3.2.1), Turbulenz und Grenzschicht (3.2.2) und Zweiphasenrohrströmung (3.2.3), im Fokus.

Im Flaschenreinigungsprozess sind flüssige und gasförmige Fluide involviert. Die Strömungen von Flüssigkeiten und Gasen haben aber so viele Gemeinsamkeiten, dass es zweckmäßig ist, sie gemeinsam zu behandeln (Oertel, 2008, S. 45). Im Gegensatz zu einem Festkörper ist ein Fluid dadurch definiert, dass ein Fluidelement, auf das Schubspannungen wirken, sich immerzu verformt und nicht zur Ruhe kommt (Böswirth, 2010, S. 2). Das Fließ- und Verformungsverhalten von Stoffen wird allgemein als Rheologie bezeichnet. Die beim Flaschenreinigen verwendeten Fluide sind in der Regel alle newtonsch, was bedeutet, dass sie eine lineare Viskosität aufweisen. Viskosität ist eine Konstante, die das Fließverhalten von Fluiden beschreibt. Die Konstante wird entweder als dynamische (Gl. 1) oder kinematische (Gl. 2) Viskosität angegeben. Die beiden Konstanten korrelieren (Gl. 3) über die Dichte ρ (Evers, 2004, S. 4).

Dynamische Viskosität: $\eta = \frac{N \cdot s}{m^2} = Pa \cdot s$	(1)
Kinematische Viskosität: $\nu = \frac{m^2}{s}$	(2)
$\nu = \frac{\eta}{\rho}$	(3)

Dynamische und kinematische Viskosität sind, so wie die Dichte, druck- und temperaturabhängig. Allgemein gilt, dass die Viskosität von Flüssigkeiten bei steigenden Temperaturen ab- und bei Gasen zunimmt (Bohl & Elmendorf, 2008, S. 24), wobei jedoch für jeden Stoff eine entsprechende empirische Tabelle herangezogen werden sollte, die etwa für Wasser und Luft in Bohl & Elmendorf (2008, S. 431 ff.) zu finden ist.

3.2.1 Oberflächenspannung und Benetzung

Die Grenzfläche zwischen zwei sich nicht mischenden Fluiden wird als freie Oberfläche bezeichnet. Freie Oberflächen von Flüssigkeiten zeigen das Bestreben, sich zu verkleinern und sog. *Minimalflächen* zu bilden (Oertel, 2008, S. 40). In diesem Zusammenhang stehen Effekte wie Tropfenbildung und Kapillareffekte. Die Oberflächenspannung wird immer zwischen zwei Phasen bestimmt, wie z. B. Oberflächenspannung σ_{FG} zwischen Flüssig- und Gasphase, Oberflächenspannung σ_{GW} zwischen Gasphase und Wand, Oberflächenspannung σ_{FW} zwischen Flüssigphase und Wand. Mit Gl. 4 lässt sich aus σ_{FG} , σ_{GW} und σ_{FW} der Kontaktwinkel α an der Wand berechnen, wie in Abb. 3 dargestellt wird. Dieser beschreibt, wie sich die Flüssigkeit an der Wand verhält.

$\cos \alpha = \frac{\sigma_{GW} - \sigma_{FW}}{\sigma_{FG}} \quad (\text{Bohl \& Elmendorf, 2008, S. 38})$	(4)
---	-----

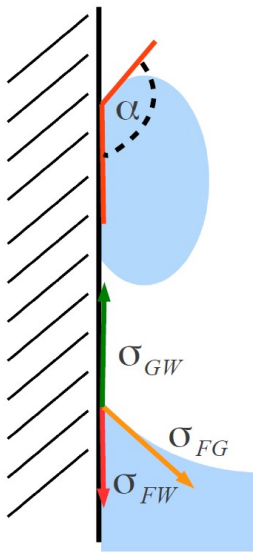


Abbildung 3: Kontaktwinkel und Oberflächenspannung

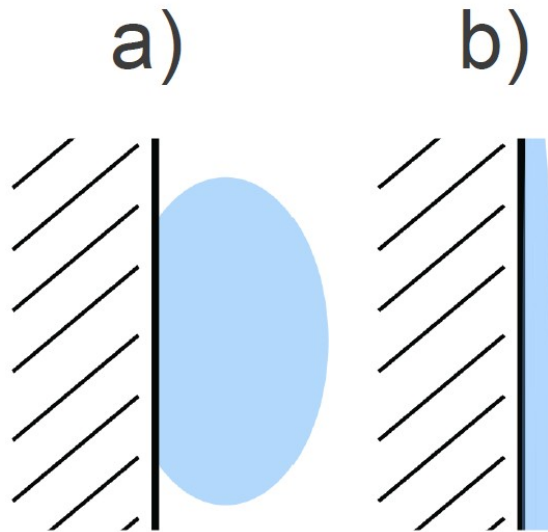


Abbildung 4: a) partielle Benetzung und b) vollständige Benetzung

Grundsätzlich muss zwischen (a) partieller und (b) vollständiger Benetzung unterschieden werden, s. Abb. 4. Welche Art der Benetzung auftritt, hängt sowohl von der Oberfläche als auch von den Fluiden ab. Ein Beispiel für die Veränderung der Oberflächenspannung ist die Verwendung von Tensiden, welche sich an der Wasseroberfläche ansammeln und die Wechselwirkung der Wassermoleküle reduzieren (Evers, 2004, S. 6). Die Oberflächenspannung ist folglich herabgesetzt, und die Flüssigkeit neigt zur vollständigen Benetzung. Die meisten verwendeten Verpackungen sind wiederum hydrophob und haben eine geringe Oberflächenspannungsenergie (Meiron & Saguy, 2007, S. 653). Dies bedeutet, dass sie zu einer partiellen Benetzung neigen; Restflüssigkeit sammelt sich zu Tropfen und läuft in Rinnsalen, nicht verteilt über die Fläche, ab. Eine genaue Diskussion von Benetzungen ist in Padday (1992, S. 1348 ff.) und Oertel (2008, S. 654 ff.) zu finden. Die Möglichkeiten der Kontaktwinkelmessung sind in Meiron & Saguy (2007, S. 653 ff.) diskutiert.

3.2.2 Turbulenz und Grenzschichten

Die Strömungsmechanik unterscheidet zwischen laminarer und turbulenter Strömung. Bei laminarer Rohrströmung bewegen sich die Fluidteilchen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten auf zur Rohrachse parallelen Stromlinien ohne sich zu vermischen und bei turbulenter oder wirbelbehafteter Strömung treten zusätzliche chaotische Querbewegungen auf, die bei laminarer Strömung fehlen (Bohl & Elmendorf, 2008, S. 145). Turbulenz tritt entweder bei großen Geschwindigkeiten oder bei entsprechenden Geometrien auf. Sie überlagert die Hauptbewegung und breitet sich nach ihrem Entstehen stromabwärts aus (Oertel, 2008, S. 126 f.). Böswirth (2010, S. 166) beschreibt folgenden Prozess als typisch für Turbulenz: (a) Wirbelbildung in Gebieten mit steilen Geschwindigkeitsanstiegen, (b) Austauschbewegung von Wirbeln von verschiedener Größe, (c) Totlaufen von Wirbeln (Die Energie eines Wirbels wird durch Reibung immer schwächer), (d) kinetische Energie wird über immer kleinere Wirbel in Wärme umgesetzt (Energiekaskade).

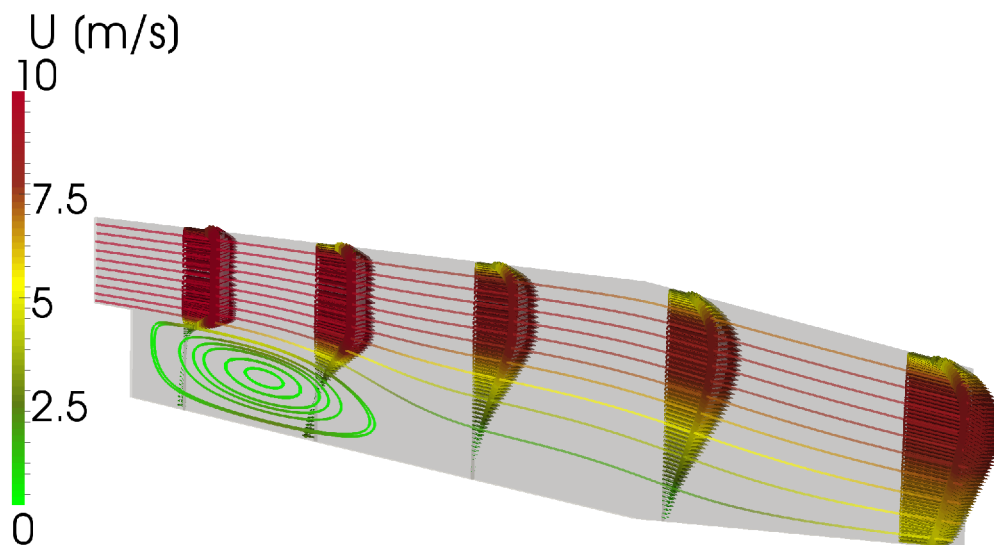


Abbildung 5: Rohrströmung

Der hochgradig chaotische Charakter turbulenter Strömung erschwert die mathematische Beschreibung derartiger Strömungen. Der Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung vollzieht sich qualitativ in einer Strömung, wenn der molekulare Impulsaustausch nicht mit ausreichender Effizienz den makroskopischen Transport der Geschwindigkeitsschwankung ausgleichen kann (Oertel, 2008, S. 327).

$\Re = \frac{w \cdot L}{\nu}$	(5)
-------------------------------	-----

Zur Beschreibung eines quantifizierbaren Übergangs wird bis heute die dimensionslose Reynoldszahl ($\mathfrak{R}$) genutzt, welche aus der charakteristischen Länge (L), der charakteristischen Geschwindigkeit (w) und der kinematischen Viskosität (ν) errechnet wird. Für eine Rohrströmung ist die charakteristische Geschwindigkeit die mittlere Geschwindigkeit, und die charakteristische Länge (L) ist der Durchmesser des Rohres (Böswirth, 2010, S. 146). Bei Reynoldszahlen größer als 2350 kann in Rohren von einer turbulenten Strömung ausgegangen werden (Bohl & Elmendorf, 2008, S. 145). Die Reynoldszahl ist auch für Experimente sehr wichtig, die mit einem Modell durchgeführt werden. Die Reynoldszahl von untersuchtem Phänomen und Modell müssen übereinstimmen, um belastbare Ergebnisse zu erzielen. Weitere Informationen zur Reynoldszahl und Ähnlichkeitsmechanik sind bei Bohl & Elmendorf (2008), Böswirth (2010) und Oertel (2008) zu finden.

Die Art der vorliegenden Strömung ist auch entscheidend für das Verhalten der Strömung an der Wand und den Einfluss, den die Wand auf die Strömung hat. Wie allgemein bei Strömungen kann zwischen laminarer und turbulenter unterschieden werden (Böswirth, 2010, S. 157). Die laminare Grenzschicht zeichnet sich durch einen langsameren Geschwindigkeitsabfall zur Wand hin aus. Bei Rohrströmungen ist ein V-ähnliches Profil der Geschwindigkeit zu erkennen, während bei turbulenter Grenzschicht ein U-Profil der Geschwindigkeit mit einer sehr dünnen laminaren Unterschicht zu finden ist. Die Geschwindigkeit fällt auf kurzer Distanz sehr schnell ab. Zwar legt die Haftbedingung fest, dass ein Fluid an der Wand immer genau die Geschwindigkeit der Wand hat (Oertel, 2008, S. 109), jedoch ist die laminare Unterschicht so dünn, dass bei turbulenter Strömung die Rauigkeit der Wand größere Bedeutung hat. Zur Bestimmung der laminaren Unterschicht geben Bohl & Elmendorf (2008, S. 156 f.) allein vier Formeln vor, die sie bei realen Anwendungen aber für ungeeignet halten, da die Formeln sehr unterschiedliche Ergebnisse liefern.

3.2.3 Zweiphasenrohrströmung

Zweiphasenströmungen sind für eine Vielzahl von technischen Prozessen sehr wichtig, da gerade durch den Phasenübergang eine erhebliche Menge an Energie transportiert wird oder prozessrelevante Vorgänge ausgelöst werden. In 3.1.1 werden die Ergebnisse von Kohira et al. (2007, S. 1) vorgestellt, welche das Leerungsverhalten in Bezug zum Mündungsdurchmesser der Flaschen setzen (Abb. 1). Diese Ergebnisse zählen zu den wenigen Untersuchungen, die sich mit der qualitativen Beschreibung von Strömungsregimen in Flaschen beschäftigen. Erheblich mehr Forschungsergebnisse liegen für die Untersuchung der Zweiphasenströmung in Rohrleitungen vor.

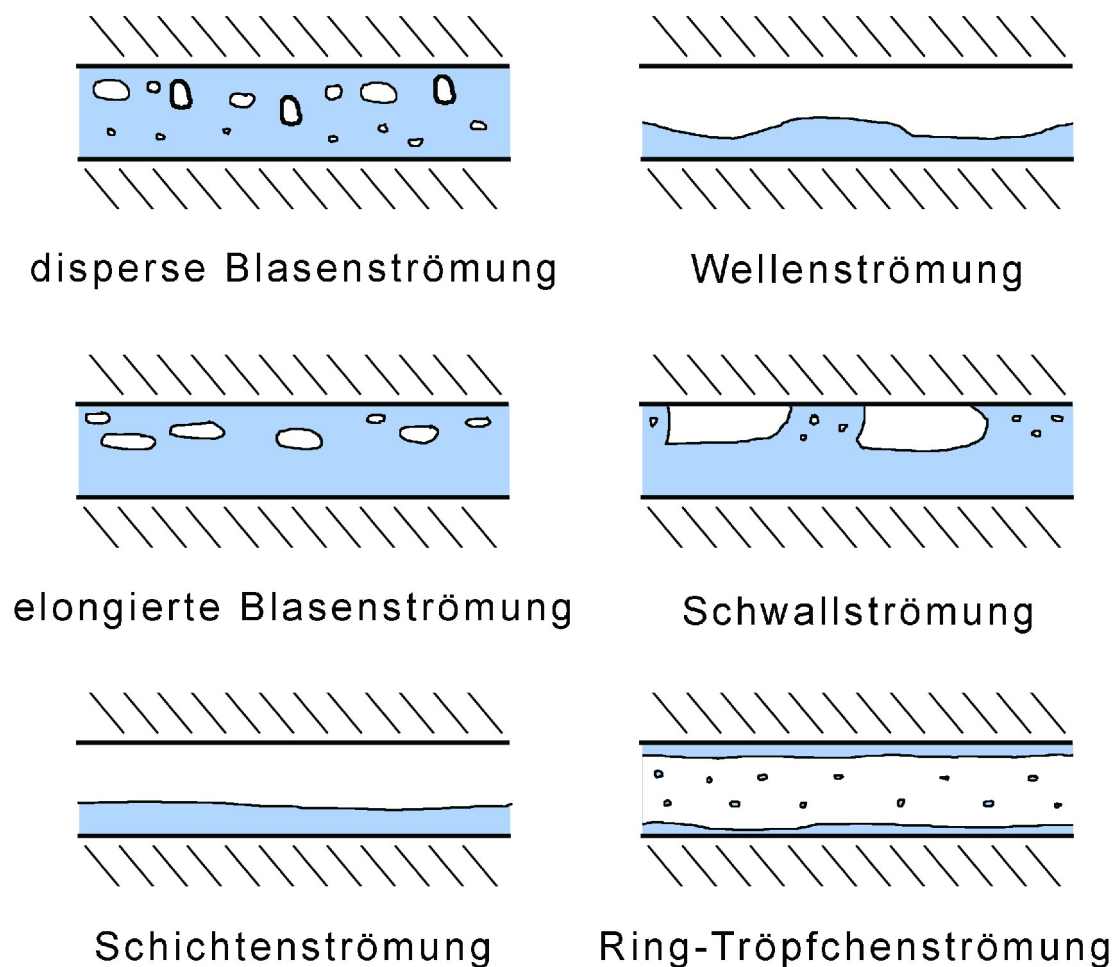


Abbildung 6: Strömungsformen im horizontalen Rohr (nach Oertel (2008, S. 435))

Abb. 6 zeigt die verschiedenen Strömungsformen, die in einer horizontalen Rohrleitung zu finden sind. Die Art des Strömungsregimes ist von vielen Parametern abhängig, wie z. B. Oberflächenspannung, Geschwindigkeit der Fluide, Art der Fluide, dem Durchmesser des Rohres und der Schwerkraft. Ujang et al. (2006, S. 527) differenzieren zwischen hydrodynamischen und topologischen Ursachen für das Auftreten bestimmter Strömungen; hydrodynamische Ursachen könnten das Verhältnis von Luft zu Wasser bei einer bestimmten Geschwindigkeit, während topologische Ursachen in der Geometrie zu suchen sind.

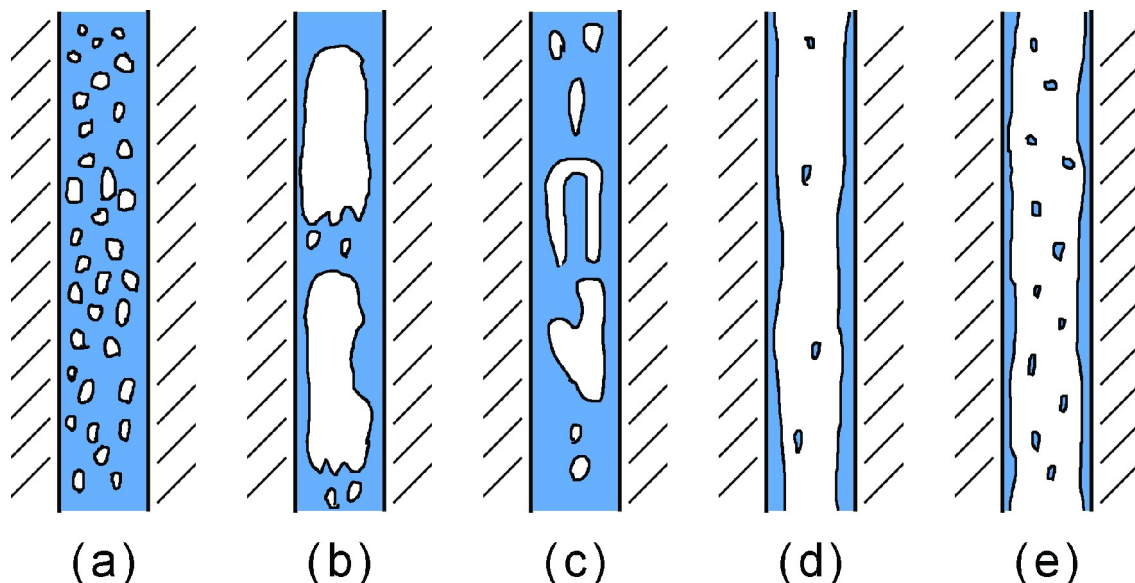


Abbildung 7: Strömungsformen im senkrechten Rohr: (a) Blasen-, (b) Pfropfen-, (c) Schaum-, (d) Ring- und (e) Ring-Tröpfchenströmung (nach Oertel (2008, S. 439))

In Abb. 7 werden die typischen Zweiphasenströmungen in senkrechten Rohrleitungen aufgezeigt, wobei der Gasgehalt von links (a) nach rechts (e) zunimmt. Vijayan et al. (2001, S. 801) stellen bei Untersuchung derartiger Phänomene fest, dass je nach Phänomen die Fließgeschwindigkeit stark verringert ist und sehr starke Turbulenzen auftreten.

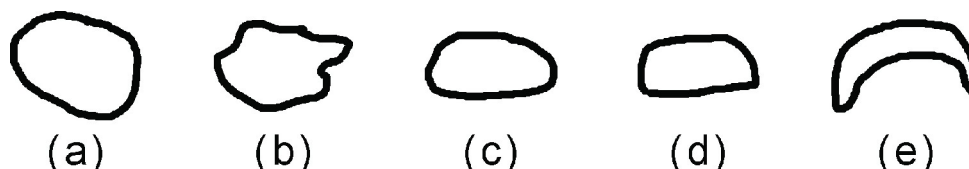


Abbildung 8: Typische Blasenformen (a) kugelig, (b) wackelig, (c) elliptisch, (d) Kugelkappe (e) gesäumt (nach Oertel (2008, S. 452))

In Abb. 8 sind einige der gängigsten Blasenformen der Zweiphasenströmung zusammengefasst. Die genaue Form einer Blase hängt von den lokalen Strömungsbedingungen ab.

3.3 Mathematische Modellierung und Simulation

Die Mathematik liefert die Grundlagen zur systematischen Untersuchung von Prozessen und Verfahren. Insbesondere die Modellierung und Simulation bieten die Möglichkeit, komplexe Systeme zu untersuchen und zu verstehen. Ein Überblick und eine systematische Betrachtung der wichtigsten Methoden sind in Velten (2009, S. 39 ff.) gegeben. In der Getränkeindustrie werden mit mathematischen Modellen sowohl ganze Anlagen wie z. B. eine Abfüllanlage von Cooke et al. (2005, S. 491 ff.) als auch nur einzelne Teilstücke wie z. B. die Reinigungsmöglichkeit eines T-Stücks von Asteriadou et al. (2007, S. 88 ff.) untersucht.

Grundsätzlich können Modelle in zwei Typen eingeteilt werden: (a) phänomenologische und (b) mechanistische Modelle. Erstere (a) basieren auf experimentellen Daten und nutzen keine Informationen über den Prozess; letztere (b) versuchen, den Prozess selbst zu beschreiben (Velten, 2009, S. 47). Datta (2008, S. 121) stellt fest, dass besonders „*physik-basierende*“ Modelle für Lebensmittelprodukte, -herstellung und -produktionsanlagen sehr hilfreich sind, da der experimentelle Aufwand für reale Experimente zu groß wäre, um derart detaillierte Informationen zu erhalten. Das hängt jedoch vom untersuchten Prozess und den Informationen, die für diesen Prozess verfügbar sind, ab; daher werden für die Reinigung meistens phänomenologische Modelle genutzt, wie etwa die von Popovic et al. (2009, S. 307 ff.) oder Lelievre et al. (2002, S. 310 ff.). Die genaue Mechanik der Reinigung ist häufig nicht bekannt, da die Verschmutzung sehr unterschiedlich sein kann.

Eine spezielle Form der mathematischen Modellierung und Simulation ist die numerische Strömungsmechanik oder engl. *Computational Fluid Dynamics* (CFD), welche in 3.3.1.2 beschrieben ist. Diese Methode versucht, die Physik eins zu eins abzubilden. CFD hat sich in den letzten 20 bis 25 („10 bis 15“ in 2004) Jahren nicht nur zur Entwicklung und Erforschung neuer Prozesse, sondern auch zur Optimierung bekannter Verfahren (Aubin et al., 2004, S. 431) als sehr nützlich erwiesen. Die Simulationen liefern häufig genauere Daten, als sie durch temporale oder lokale Messung zu generieren wären (Al-Baghdadi et al., 2009, S. 40). Speziell für die Lebensmittelindustrie konnten Jensen et al. (2007, S. 52 ff.) und Asteriadou et al. (2009, S. 948 ff.) anhand eines T-Stücks zeigen, dass CFD ein gut geeignetes Werkzeug ist, um Geometrien auf ihre Reinigungsmöglichkeit zu untersuchen.

Besonders in der Vor- Prototypphase kann CFD genutzt werden, um das Design einer Anlage im Hinblick auf ihre Reinigungseigenschaften zu optimieren (Friis & Jensen, 2002, S. 281). Eine Übersicht über verschiedene Anwendungsbereiche von CFD in der Lebensmittelindustrie gibt Norton & Sun (2006, S. 600 ff.).

Der enorme Berechnungsaufwand, den derartige CFD- Simulationen haben, erfordert geeignete Strategien, um die Anzahl der nötigen Läufe zu reduzieren. Fang et al. (2006, S. 16) stellten fest, dass gerade die Optimierung von Prozessen und Formen (Geometrien) die Anzahl der nötigen Läufe dramatisch ansteigen lassen kann. Diesem Problem kann durch die Anwendung verschiedener statistischer Werkzeuge begegnet werden. Hierzu zählen die statistische Versuchsplanung, s. 3.3.2.1, und die Nutzung von *Response Surface Plots* (3.3.2.3.3), die bei der Auswertung der Simulationen hilfreich sind. Besonders wichtig ist, dass statistische Werkzeuge nicht entkoppelt von Fachwissen genutzt werden, da sie nur ein Werkzeug darstellen, um dieses besser zu nutzen, dieses jedoch nicht ersetzen können (Box et al., 2005, S. 13 f.).

3.3.1 Mathematische Modelltypen

Modelle werden als, vereinfachte Beschreibungen eines komplexen Systems werden von Forschern und Ingenieuren genutzt, um in Simulationen Fragen bezüglich des komplexen Systems beantworten zu können (Velten, 2009, S. 3 ff.). Diese Methodik ist nötig, da die Untersuchung des eigentlichen Systems zu schwierig, teuer, gefährlich oder unmöglich ist. Im Falle der Flaschenreinigung stehen eine Beschleunigung des Entwicklungsprozesses und der Gewinn detaillierter Informationen im Vordergrund, um die Prozesse zu verbessern. Hierbei sind verschiedene mathematische Wege der Modellierung denkbar. Die einzelnen Möglichkeiten unterscheiden sich in Technik, Komplexität, Aufwand, Zuverlässigkeit und Genauigkeit.

3.3.1.1 Empirische Modelle

Aufgrund der einfachen Durchführbarkeit sind Getränkeflaschen bereits in verschiedenen experimentellen Studien betrachtet worden (mehr dazu in 3.1.1). Im Zuge dieser Studien sind auch aus unterschiedlichen Gründen zwei verschiedene Modelle entstanden, die eventuell genutzt werden können, um Rückschlüsse auf Entleerungsdauer und -verhalten der Flaschen zu ziehen. Ein besonderer Vorteil dieser Modelle ist der geringe Aufwand, den die Lösung der Modelle erfordert. Allerdings ist fraglich, ob diese Modelle auch für andere Flaschen und Szenarien geeignet sind. Ein wichtiges Ziel der Arbeit ist die Findung von Modellen, die das Verhalten digital berechnen lassen, so dass keine Experimente durchgeführt werden müssen und eine aufwändige Kalibrierung entfällt. Dies könnte v. a. bei empirischen Modellen problematisch sein.

3.3.1.1.1 Whalley- Modell (Wha)

Das erste Modell, welches sich auf die Arbeiten von Whalley (1987 & 1991) stützt, hat die Absicht, aus den geometrischen Daten der Flasche, den physikalischen Eigenschaften und der Dauer der Entleerung die Konstante C abzuschätzen. Die Konstante C, die häufig als „Wallis Konstante“ bezeichnet wird (Whalley, 1991, S. 145), ist die Grundlage für die von Whalley verbesserte Gl. 6.

$$C = \frac{(\rho_G^{1/4} + \rho_L^{1/4})}{[(\rho_L - \rho_G) g d]^{1/4}} \left(\frac{4 V}{\pi d^2 T_e} \right)^{1/2} \quad (\text{Whalley, 1991, S. 145}) \quad (6)$$

Die Gleichung beinhaltet die Dichte der Gasphase (ρ_G) und der Flüssigkeit (ρ_L), die Erdanziehungskraft (g), den Durchmesser der Mündung (d), das Volumen der Flasche (V) und die Gesamtentleerungszeit (T_e). Die Gl. 6 nach T_e aufgelöst lässt sich nutzen, um die zu erwartende Entleerungszeit für eine spezifische Flasche zu berechnen.

$$T_e = \left\{ \frac{(\rho_G^{1/4} + \rho_L^{1/4})^2}{[(\rho_L - \rho_G) g d]^{1/4}} \right\} \left(\frac{4 V}{\pi d^2 C^2} \right) \quad (7)$$

Flasche Nr.	Typ	Volumen [mL]	Mündungsdurchmesser [mm]	C Wert für Entleerung	C Wert für Befüllung
1	„Chemical“	2830	15,13	0,94	0,71
2	„Sherry“	725	19,65	0,98	0,66
3	„Water“	1070	18,61	0,93	0,64
4	„Milk“	580	26,04	0,92	0,71
5	„Brandy“	730	18,62	1,00	0,66

Tabelle 2: C- Werte für verschiedene Flaschen (Quelle: Whalley (1991, S. 147))

Werte für die Konstante C, die zur Nutzung der Gl. 7 nötig sind, lassen sich bei Whalley (1991, S. 147) und in anderen Studien finden. Die Tabelle 2 zeigt dabei deutlich, dass die Werte für C für die Entleerung nur zwischen 1 und 0,92 variieren, obwohl die berücksichtigten Flaschen sehr unterschiedlich sind. Da die Werte so nah beieinander liegen, kann die Gleichung weiter vereinfacht werden. C^2 wird durch 0,9 ersetzt. Dies entspricht einem $C \approx 0,95$. Durch diese Annahme lässt sich Gl. 8 zur Prognose der Entleerungszeit für verschiedene Flaschen und Fluide nutzen.

$$T_e = \left\{ \frac{(\rho_G^{1/4} + \rho_L^{1/4})^2}{[(\rho_L - \rho_G) g d]^{1/4}} \right\} \left(\frac{4 V}{0,9 \pi d^2} \right) \quad (8)$$

3.3.1.1.2 Clanet- und Searby- Modell (CSe)

Ein zweite Möglichkeit zur Prognose der Entleerungszeit einer Flasche lässt sich aus der Arbeit von Clanet & Searby (2004, S. 145 ff.) herleiten. Sie untersuchen in ihrer Studie die Ursachen für die spezielle Charakteristik des oszillierenden Ausflusses, dessen Ursache sie in der Kompressibilität der Gasphase finden (Clanet & Searby, 2004, S. 145). Hierbei verwenden sie Gl. 9, die neben Mündungsdurchmesser (d) und Gesamtentleerungszeit (T_e) auch Durchmesser der Flasche (D_0) und Gesamtentleerungszeit der Flasche mit Druckausgleich (T_{e0}) berücksichtigt. Der Druckausgleich kann durch ein Loch im Boden der Flasche realisiert werden. Folglich fließt die Flüssigkeit kontinuierlich ab, während durch die zusätzliche Öffnung Luft in die Flasche eingesaugt wird.

$\frac{T_e}{T_{e0}} = \left(\frac{D_0}{d}\right)^{5/2} \quad (\text{Clanet \& Searby, 2004, S. 145})$	(9)
---	-----

Da sich T_{e0} durch Gl. 10 abschätzen lässt, kann Gl. 9 durch Einsetzen zu Gl. 10 umgeformt werden.

$$T_{e0} \approx \frac{3.0 V}{\sqrt{g D_0}} \quad \text{Clanet \& Searby (2004, S. 145)} \quad (10)$$

Gl. 10 prognostiziert die Dauer der Flaschenentleerung aus der Erdanziehungskraft (g), dem Durchmesser (D_0) und dem Volumen der Flasche (V). Allerdings ist anzumerken, dass Clanet & Searby (2004) ihr Modell nur für eine vereinfachte Flaschengeometrie validiert haben. Deshalb können die gefundenen Werte auch nur eine Abschätzung sein. Die Genauigkeit der Abschätzung wird in 5.1 geprüft. Die Geometrie der Flasche ist insoweit vereinfacht, dass sie nur aus einem Zylinder besteht, der oben geschlossen ist und im Boden ein kreisförmiges Loch hat.

$T_e \approx \left(\frac{D_0}{d}\right)^{5/2} \cdot \frac{3.0 V}{\sqrt{g D_0}}$	(11)
---	------

3.3.1.2 CFD- Modelle

CFD (*engl. computational fluid dynamics*), numerische Strömungsmechanik, ist die Analyse von Systemen durch computergestützte Simulationen, in denen Strömung, Wärmeübergang und ähnliche Prozesse, wie z. B. chemische Reaktionen oder Verbrennung auftreten (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 1). CFD dient kurz gesagt dazu, jede Art von Problem, das Fluidströmungen angeht, durch mathematische Modelle abzubilden (Velten, 2009, S. 296). Aus dieser Definition wird bereits der enorme Umfang der CFD- Methodik klar. CFD erfordert Verständnis und Methoden der Mathematik, der Computertechnik und der Strömungslehre (Tu et al., 2008, S. 2). Die in 4.1 dargestellten Grundlagen, Techniken und Methoden der CFD sind daher auf die wesentlichen Aspekte, die in dieser Arbeit benötigt werden, um das entwickelte Modell zu verstehen, beschränkt. Weitere Informationen, z. B. eine detaillierte Begründung und Herleitung, sind in der entsprechenden Fachliteratur, wie in Tu et al. (2008), Hirsch (2007), Laurien & Oertel (2009), Ferziger & Peric (2008) oder Versteeg & Malalasekera (2007), zu finden.

CFD wird häufig als Synonym für die Anwendung der *Navier- Stokes- Gleichung* genutzt (Velten, 2009, S. 296 f.), auch wenn dies nur die Anwendung der Grundgleichungen für ein viskoses Fluid ist (Hirsch, 2007, S. 39 f.). Die allgemeine mathematische Grundlage für die Modellierung von Transportprozessen sind Bilanzgleichungen (Gl. 12), die aus vier Termen bestehen: (a) dem Speicherterm, der die lokale und zeitliche Änderung der Transportgröße (ϕ) beschreibt; (b) dem konvektiven Transportterm, der den Transport von ϕ aufgrund von Geschwindigkeitsunterschieden zwischen Fluidelement und Bezugssystem darlegt; (c) dem molekularen Transportterm, der je nach transportierter Größe Diffusion, Wärmeleitung oder viskose Reibung darstellt; und (d) dem Quellterm, der sowohl das Entstehen als auch die Vernichtung von ϕ beschreiben kann (Paschedag, 2004, S. 9 f.).

$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_a = - \underbrace{\vec{\nabla}(\vec{v}\phi)}_b - \underbrace{\vec{\nabla} \vec{J}_\phi}_c + \underbrace{S_\phi}_d \quad (\text{Paschedag, 2004, S. 9})$	(12)
--	------

Hirsch (2007, S. 11) definiert fünf Phasen, die zur Durchführung einer CFD- Simulation nötig sind:

1. die Auswahl des mathematischen Modells und die Festlegung der Simulationstiefe
2. die Raumdiskretisierung und die Gleichungsdiskretisierung
3. die Analyse und die Festlegung der Genauigkeit und Stabilität des Systems
4. die Lösung des Gleichungssystems
5. die Aufbereitung der Daten

Die Beschreibung des verwendeten und entwickelten Modells orientiert sich im Wesentlichen an dieser Struktur: In 4.1.1, 4.1.2 und 4.1.3 werden das verwendete Modell und die Vereinfachungen dargestellt; in 4.1.4 wird die Raum- und Gleichungsdiskretisierung im Einzelnen näher beleuchtet; in 4.1.5 werden die Verfahren beschrieben, welche zum Lösen der Gleichungssysteme eingesetzt werden.

3.3.2 Statistische Versuchsplanung und Auswertung (DoE)

Für diese Dissertation bilden zwei verschiedene Arten von Experimenten die Grundlage. Zum einen werden virtuelle Experimente in Form von Computersimulationen durchgeführt, zum anderen werden reale Experimente vorgenommen, die die Prognosen der Modelle validieren.

Zur statistischen Planung der Experimente sind verschiedene Methoden notwendig, welche im Einzelnen in den folgenden Abschnitten dargestellt werden. Die drei grundlegenden Prinzipien einer statistischen Versuchsplanung sind Randomisierung, Wiederholungen und Blockbildung (Montgomery, 2005, S. 12). Diese Methoden stellen auf unterschiedliche Weise sicher, dass die Ergebnisse der Experimente die geforderten Aufgaben erfüllen und mögliche Störgrößen entweder nur minimalen Einfluss nehmen oder entsprechend identifiziert werden können.

	Block	x_1	x_2	x_3	
C1.1	1	-1	1	-1	Randomisierung
C1.2	1	1	-1	1	
C1.3	1	0	0	0	
C1.4	1	0	0	0	
C2.1	2	1	-1	-1	Wiederholung
C2.2	2	-1	1	1	
C2.3	2	0	0	0	Blockbildung
C2.4	2	0	0	0	
C3.1	3	-1	-1	-1	Blockbildung
C3.2	3	1	1	1	
C3.3	3	0	0	0	
C3.4	3	0	0	0	

Abbildung 9: Methoden der Versuchsplanung im Beispiel

3.3.2.1 Versuchsdesign

Ein geeignetes Versuchsdesign berücksichtigt nicht nur die drei grundlegenden Prinzipien, sondern eröffnet auch die Möglichkeit, sowohl die Anzahl der Experimente zu reduzieren, als auch die Aussagekraft der einzelnen Experimente zu erhöhen. Dies geschieht durch eine geeignete Anordnung der Experimente. Bei bekannten Abhängigkeiten können diese berücksichtigt werden. Ein einfaches Beispiel ist eine lineare Kalibrierkurve, die durch die mehrfache Wiederholung der Randwerte genauer bestimmt werden kann als durch die Streuung der Kalibrierpunkte über den gesamten Bereich.

Das konkrete Ziel des Experiments legt das Design fest. Soll mit dem Experiment ein *Screening* durchgeführt werden, bei dem möglichst viele Faktoren auf ihre Relevanz geprüft werden, oder soll der Einfluss bestimmter Faktoren genau quantifiziert werden, um ein Modell zu bilden? Für die Erstellung eines Versuchsdesigns sind verschiedene Methoden verfügbar. Diese haben unterschiedliche Vor- und Nachteile (Fang et al., 2006, S. 3 f.). Besonders häufig verwendete Verfahren sind im Folgenden dargestellt:

3.3.2.1.1 Häufige Versuchsdesigns

- einfaktorielles Design

Das einfaktorielle Design ist kein Design im eigentlichen Sinne, sondern beschreibt die Vorgehensweise, immer nur einen Parameter gleichzeitig zu ändern und zu untersuchen. Dementsprechend wird der einzelne Parameter immer nur für die starre Konfiguration der anderen optimiert. Obwohl die Nachteile überwiegen, ist diese Methode häufig im Einsatz, da keine statistischen Kenntnisse nötig sind und der Einfluss des einzelnen Parameters direkt erkannt wird. Negativ ist zu bewerten, dass immer nur lokale Optima gefunden und Wechselwirkungen in keiner Weise berücksichtigt werden können. Abb. 10 zeigt die Untersuchung eines unbekannten Untersuchungsraums. Der in der Grafik farbige Hintergrund und die Höhenlinien stellen das unbekannte Ergebnis dar. Durch Experimente an den Punkten wird der Wert an der jeweiligen Stelle ermittelt. Die 1. und 2. Versuchsreihe, in denen jeweils einer der zwei Parameter variiert wird, finden nur das lokale Maximum. Das absolute Maximum wird nicht erkannt. Owen et al. (2001, S. 308 ff.) warnen davor, dass die Ergebnisse ein unvollständiges Bild des Ergebnisraums wiedergeben und die Robustheit eines Prozesses, vgl. 3.3.2.3, überhaupt nicht abgeschätzt werden kann.

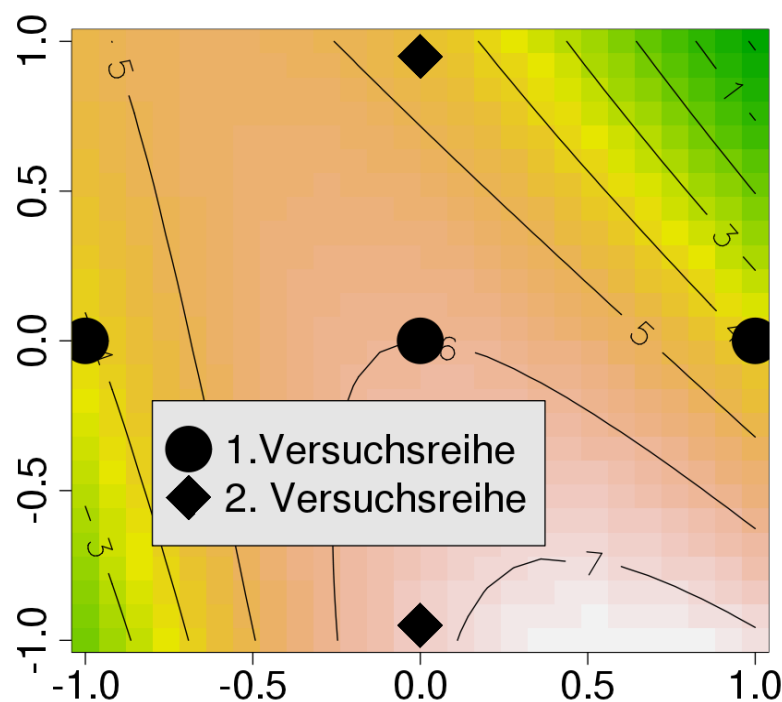
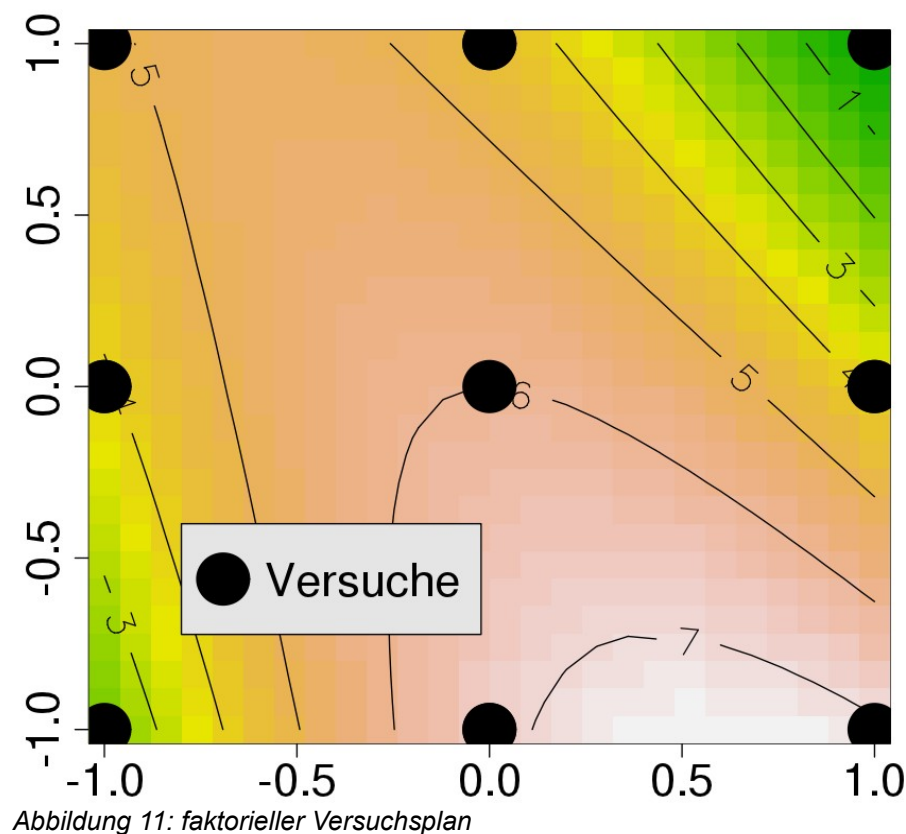


Abbildung 10: Ein- Variablen- Versuchsplan

- faktorielles Design

Das faktorielle Design ist ein Versuchsdesign, bei dem verschiedene Faktorstufen und Faktoren kombiniert werden. Dieses Design wird häufig zum Identifizieren der wichtigsten Faktoren und deren Stufen genutzt, da nicht alle Kombinationen durchgeführt werden müssen. Die Abb. 11 zeigt deutlich, dass mit diesem Design besser die Extremwerte identifiziert werden können, da die Untersuchung gleichmäßig verteilt über den Versuchsraum durchgeführt wird. Konkret für das vorangegangene Beispiel bedeutet dies, dass am Punkt (1|-1) ein besseres Ergebnis erzielt wird als das, welches durch ein einfaktorielles Design gefunden wurde. Zusätzlich erlaubt die Verteilung der Punkte die Bildung eines Modells, mit dem das Maximum bei (0.5|-1.9) gefunden werden kann (hierzu mehr in Abs. 3.3.2.3.1).



- vollfaktorielles Design

Das vollfaktorielle Design ist eine besondere Art des faktoriellen Designs, dessen Faktoren und Faktorstufen in all ihren verschiedenen Kombinationen abgeprüft werden. Der Umfang derartiger Versuchspläne ist oft sehr groß, da mit jedem zusätzlichen Faktor (F) und mit jeder weiteren Faktorstufe (S) die Anzahl der Versuche exponentiell ansteigt, vgl. Formel 13. Daher kann dieses Design nur bei Versuchen mit wenigen Faktoren und wenigen Faktorstufen verwendet werden.

$$\text{Anzahl der Versuche} = S^F$$

(13)

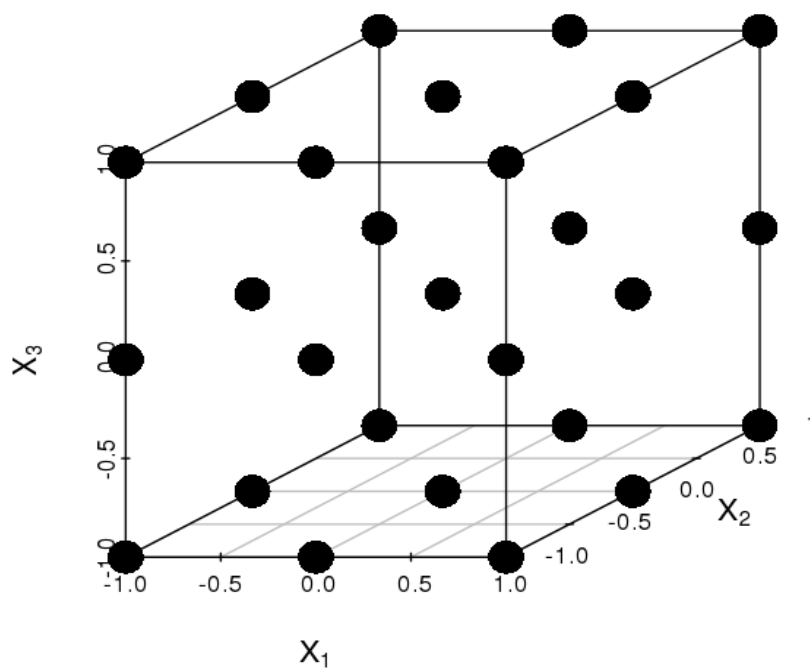


Abbildung 12: vollfaktorielles Design für 3 Faktoren auf 3 Faktorstufen

- *Central Composite Design*

Das CCD (engl. *Central Composite Design*), vgl. Abb. 13, bezeichnet und setzt sich aus einem Quadrat und einem Stern zusammen. Der zu untersuchende Versuchsraum wird hierbei durch den Würfel definiert. Im Beispiel, Abb. 13, ist der Aufbau für einen Versuchsplan mit drei Faktoren visualisiert. Diese Art des Aufbaus ist auch ohne Probleme für Versuchspläne mit einer höheren Anzahl an Faktoren realisierbar. Allerdings ist die optische Visualisierung schwierig, da die Anzahl der Dimensionen größer als drei ist.

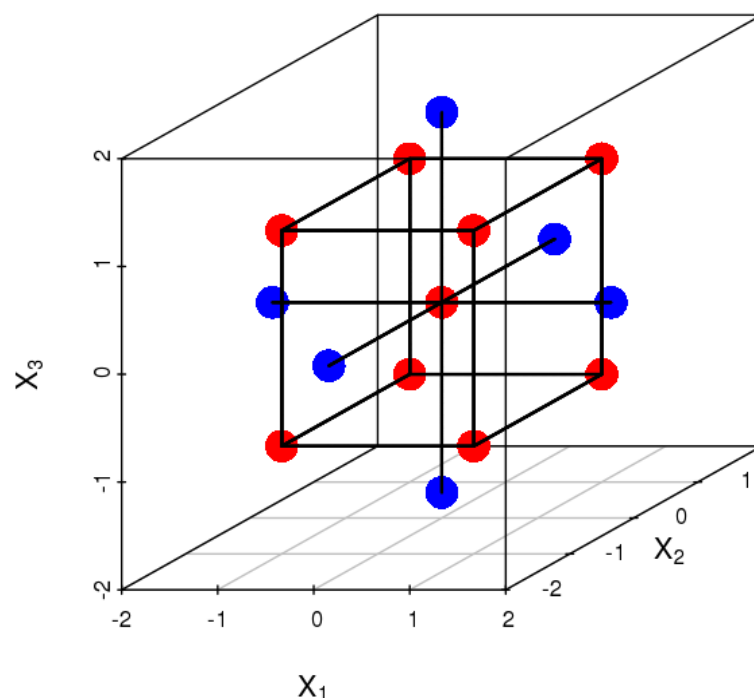


Abbildung 13: CCD- Design

Abb. 13 zeigt den klassischen Aufbau für ein CCD-Design, bestehend aus einem Würfel und einem Stern, dessen Versuchspunkte über den eigentlichen Versuchsraum hinausreichen. Dies ist häufig trotz seiner Vorteile problematisch. Die Ursache hierfür ist, dass sich die physikalischen Eigenschaften schlagartig ändern können, z. B. durch das Gefrieren von Wasser bei einer Temperatur von unter 0°C oder, konkret für diese Arbeit, beim Unterschreiten eines Flaschenmündungsdurchmessers unter 4 mm, bei dem kein Ausfluss mehr zu erwarten ist. Die Ergebnisse an solchen Versuchspunkten sind nicht hilfreich, da sie wenig Aussagekraft abzgl. des eigentlichen Untersuchungsraums haben. Der Grund für die Anordnung der Versuchspunkte außerhalb des eigentlichen Versuchsraums ist, dass derartige Punkte weitere Level in

den Versuchsplan einfügen und dessen Aussagekraft erhöhen. Eine Möglichkeit ist ein CCF (engl. *Central Composite Facing Design*), bei dem der Stern verkleinert wird, vgl. Abb. 14. Die Ecken des Sterns liegen auf den Ebenen, die durch die Eckpunkte des Würfels aufgespannt werden. Diese Änderung des Designs lässt die quadratischen Effekte untereinander stärker korrelieren, so dass sie folglich schlechter erkannt werden können (Siebertz et al., 2010 S. 38 ff.) (hierzu mehr im Abs. 3.3.2.1.2).

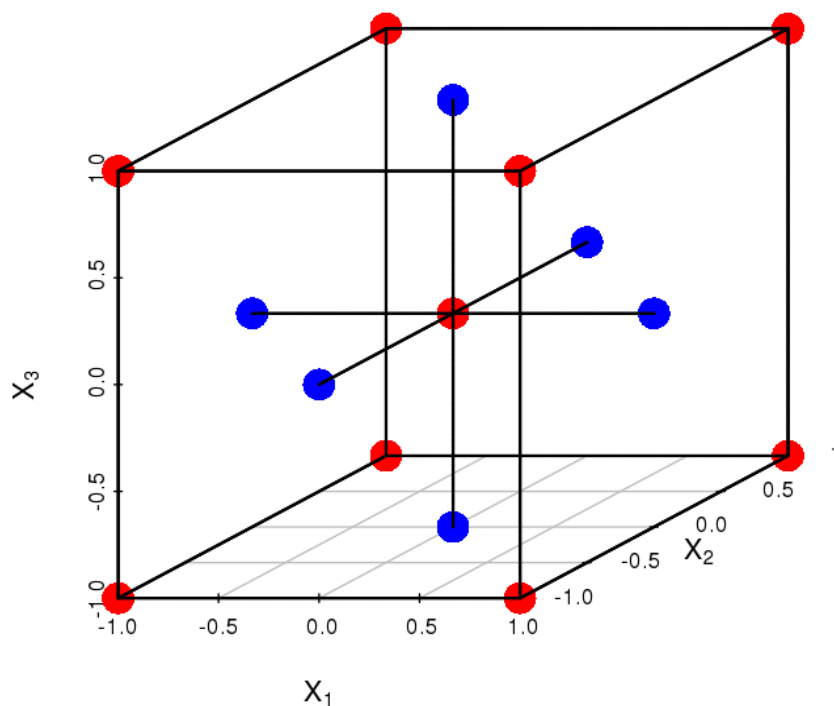


Abbildung 14: CCF- Design

- Box-Behnken-Design

Das Box-Behnken-Design wurde im Jahr 1960 von Box & Behnken (1960) entwickelt mit dem Ziel, ein Modell, das auf einem Polynom zweiter Ordnung beruht, effizient fitten zu können. Box & Behnken (1960) beschreiben ihr Design selbst als unvollständiges dreistufiges faktorielles Design, das sowohl die Kriterien der Drehbarkeit als auch der Orthogonalität weitestgehend erfüllt, (Box & Behnken, 1960, S. 455 ff.). Dass dieses Modell trotz seines Alters die gesetzten Ziele immer noch erfüllt, wird von Ferreira et al. (2007) bestätigt. Des Weiteren betätigen sie, dass das Modell das effizienteste sei, welches bei der Nutzung einer Response Surface, vgl. Abs. 3.3.2.3.3, verwendet werden könne.

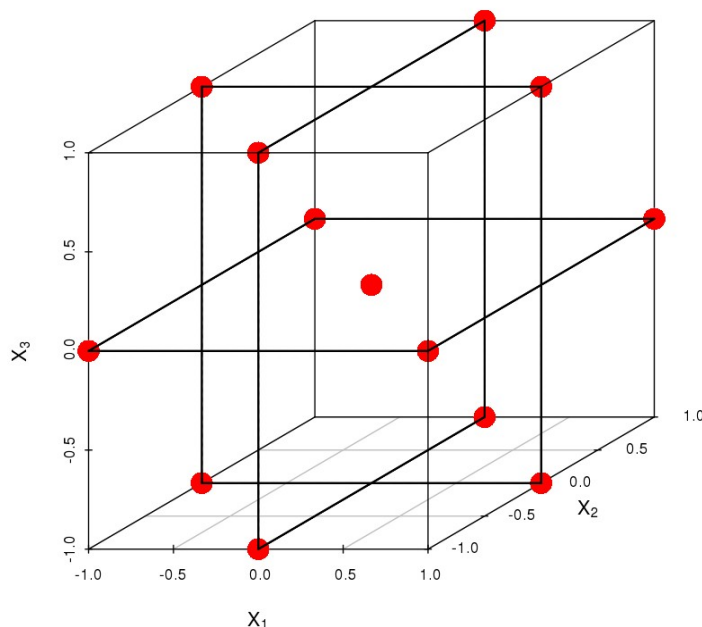


Abbildung 15: Box- Behnken Design

Abb. 15 zeigt den Aufbau eines solchen Designs und lässt die kritischen Bereiche erkennen. Die Extrempunkte am absoluten Rand des Versuchsraums werden nicht beachtet (Klein, 2007). Die Versuchspunkte werden auf die Mitte der Seitenflächen verteilt. Diese Schwäche wird häufig akzeptiert, da das Optimum in der Nähe des Mittelpunktes vermutet wird. Weiterer Vorteil ist die nur schwache Korrelation zwischen Wechselwirkung und quadratischen Effekten (Siebertz et al., 2010, S. 40 ff.). Der Umfang derartiger Pläne kann durch Gl. 14 bestimmt werden. Ideal sind sie für Experimente mit drei bis fünf Faktoren.

$$\text{Anzahl der Versuche} = 2 * F * (F - 1) + C_P$$

(14)

- optimale Designs

Optimale Designs sind Versuchspläne, in denen bereits zur Planung der Experimente ein Modell zu Grunde gelegt wird, mit welchem der vermutete Zusammenhang beschrieben werden kann. Hierbei ist keine Einschränkung gegeben. Jedes Modell kann verwendet werden; besonders empirische Zusammenhänge lassen sich verwenden. Ein optimales Design erlaubt, die Versuchspunkte so festzulegen, dass zum einen möglichst wenige Experimente nötig sind, zum anderen die Aussagekraft der einzelnen Experimente möglichst groß ist. Fang et al. (2006, S. 60 ff.) stellen hierzu klar, dass optimale Designs die beste Wahl sind, wenn das genutzte Modell wahr ist. Derartige Pläne seien jedoch ungeeignet, wenn die Zusammenhänge unbekannt sind, da nur die durch das Modell berücksichtigten Zusammenhänge erkannt werden können. Dies resultiert unter anderem aus der fehlenden Orthogonalität derartiger Pläne. Das Design des Versuchsplans wird durch verschiedene Methoden sichergestellt, und die Erstellung ist üblicherweise nur mit geeigneter Software möglich, da eine Vielzahl von Einstellungen auf den Plan Einfluss nimmt (Goupy & Creighton, 2007, o. S.). Die Anzahl der beabsichtigten Versuche, das verwendete Modell und die bereits durchgeführten Versuchsläufe sind bspw. zu berücksichtigen. Die Pläne werden als A-, D- oder G- Optimal bezeichnet. Häufig verwendete Arten sind D- und A-Optimale Designs (Pukelsheim, 2006, S. 28). Erreicht werden kann dies durch die Minimierung von $|(X'X)^{-1}|$, wobei X für die Matrix des Versuchsplans unter der Berücksichtigung des verwendeten Modells (Montgomery, 2005) steht. Beim D- Optimal- Design wird das Volumen des gemeinsamen Vertrauensbereichs für die Regressionskoeffizienten (Produkt) minimiert. Der A- Optimale Versuchsplan optimiert die Position der Versuche durch die Minimierung des Vertrauensbereichs der Regressionskoeffizienten (Mittelwerte der Quadrate). Das E- Optimale Design maximiert die Eigenwerte der Informationsmatrix (Kleppmann, 2008). Weitere Erläuterungen zur Bedeutung der einzelnen Werte können 3.3.2.1.2 und der entsprechenden Fachliteratur entnommen werden, in der gezielt auf die Bewertung verschiedener Versuchsdesigns eingegangen wird.

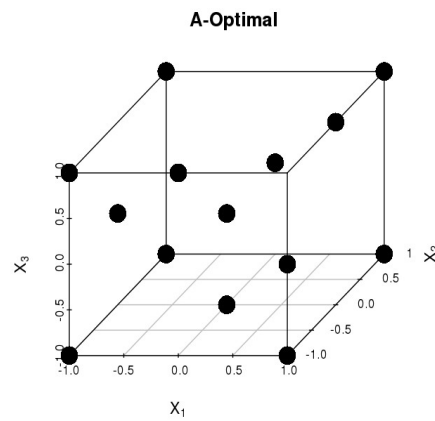


Abbildung 16: A-Optimales Design

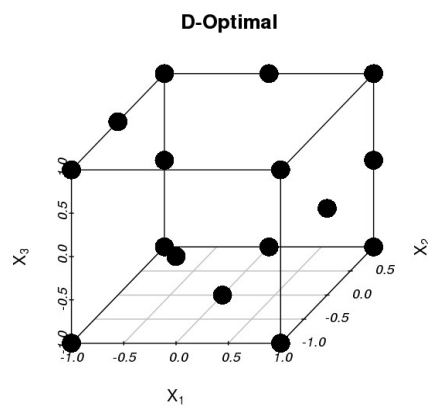


Abbildung 17: D-Optimales Design

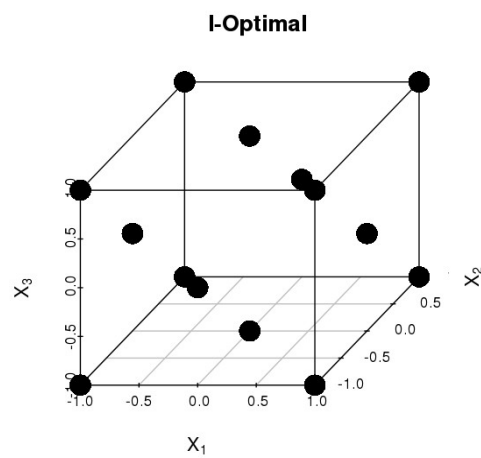


Abbildung 18: I-Optimales Design

- Monte Carlo Designs

Monte Carlo Designs oder auch CRD (*engl. Completely randomized designs*) (Myers et al., 2009, S. 303 ff.) beruhen auf der zufälligen Verteilung der Versuchspunkte im Versuchsraum. Dies ist nur sinnvoll für automatisierte Versuchsabläufe, da eine hohe Wiederholungszahl nötig ist, um brauchbare Ergebnisse zu erzielen (Siebertz et al., 2010). Daher ist diese Art von Experimenten für diese Arbeit von untergeordneter Bedeutung, da sowohl die Experimente als auch die CFD-Simulationen mit großem Aufwand verbunden sind. Allerdings lässt die rasant wachsende Rechnerleistung diese Art von Versuchsaufbau für virtuelle Experimente immer interessanter werden.

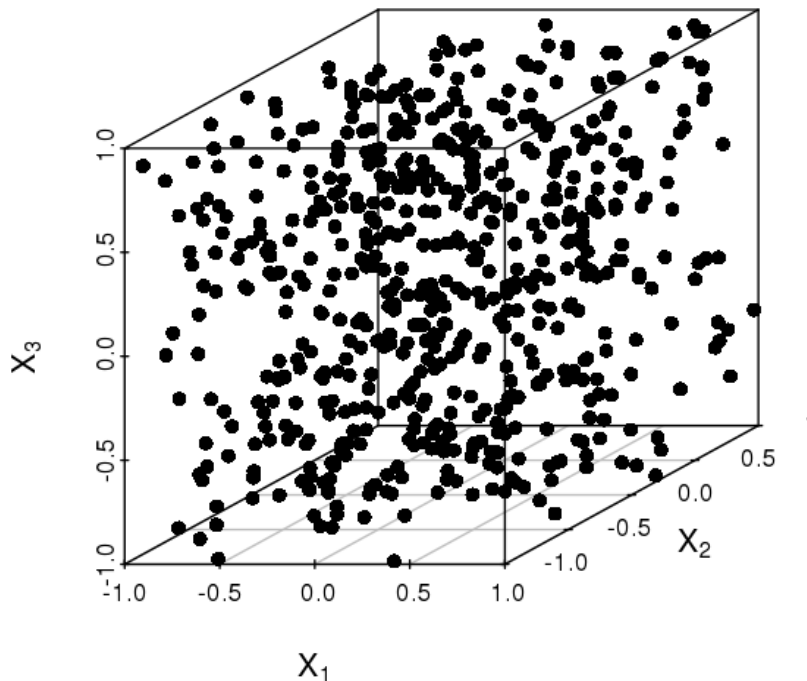


Abbildung 19: Monte Carlo Design

3.3.2.1.2 Bewertung der verschiedenen Designs

Zur Bewertung und zum Vergleich eines Versuchsdesigns werden nicht nur Eigenschaften abgeprüft, sondern auch Kennzahlen errechnet. Zudem erfolgt eine optische Visualisierung.

Die wesentlichen Eigenschaften sind Orthogonalität, Drehbarkeit und Sättigung. Ein Plan wird als orthogonal bezeichnet, wenn die Faktorstufen gleichmäßig verteilt sind. Dies ist wichtig, um die Effekte sicher zu erkennen. Sowohl der ganze Plan als auch dessen einzelne Blöcke sollten orthogonal verteilt sein. Die Vorteile sind, dass die ermittelten Ergebnisse, die zum Anpassen der Koeffizienten β genutzt werden, vgl. z. B. Gl. 15, unabhängig voneinander sind. Zusätzlich ist der Vertrauensbereich für β , im Gegensatz zu Plänen, die nicht orthogonal aufgebaut sind sehr schmal.

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i \chi_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} \chi_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} \chi_i \chi_j + \epsilon \quad (15)$$

Mit der Drehbarkeit oder auch Symmetrie eines Plans wird ein gleichmäßiger Aufbau eines Plans beschrieben. Hierbei ist ein drehbarer Plan in alle Richtungen symmetrisch, während ein symmetrischer nur zu einer Ebene symmetrisch sein muss. Diese Art von Plänen ist besonders dann sinnvoll, wenn die Lage des gesuchten Optimums nicht bekannt ist, da solche Pläne eine gleichmäßige Untersuchung des Versuchsgebiets erlauben (Myers et al., 2009, S. 321 ff.).

Die Sättigung eines Plans wird durch die Gl. 16 bestimmt, in die die Anzahl der Versuche im Versuchsplan (N) und die Anzahl der Faktoren (F) eingehen (Montgomery, 2005, S.60 ff.).

$$F = N - 1 \quad (16)$$

Versuchspläne mit einer höheren Anzahl an Faktoren werden als übersättigt bezeichnet, Versuchspläne mit einer geringeren Anzahl als ungesättigt.

Wichtige Kennzahlen, die auch bei den optimalen Plänen, 3.3.2.1, als Grundlage der Optimierung genutzt werden, sind der A-, D-, I-, E-, Dea- und Ge- Wert. In Abb. 21 und 20 werden die Werte für ein entsprechendes D-Optimales Design (X_A) ermittelt. Einige der Kennzahlen beruhen auf einem direkten Vergleich von zwei Versuchsplänen. Hier wird als Referenzversuchsplan der vollfaktorielle Versuchsplan (X_B) verwendet, vgl. Abb. 20.

Der D-Wert setzt sich aus dem Verhältnis der beiden Pläne zusammen und kann mit Gl. 17 errechnet werden, wobei F der Anzahl an Parametern entspricht (Montgomery, 2005). Der A- Wert wird mit Gl. 18 errechnet (Montgomery, 2005, S. 439 ff.).

$$D = \left(\frac{|(X_A' X_A)^{-1}|}{|(X_B' X_B)^{-1}|} \right)^{\frac{1}{F}} \quad (17)$$

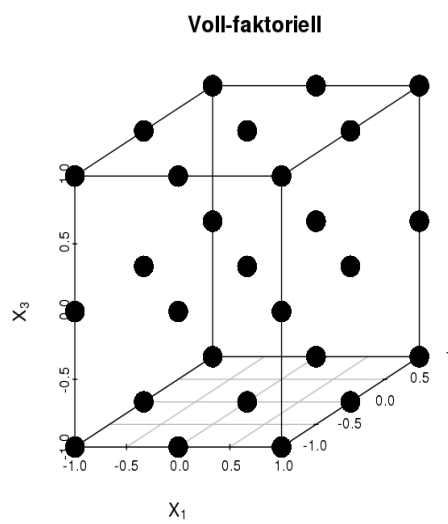


Abbildung 20: Versuchsplan (X_B)

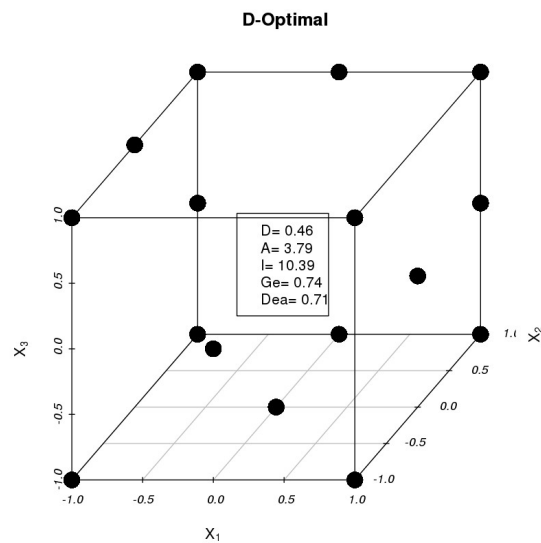


Abbildung 21: Versuchsplan (X_A)

$$A = \text{tr}(X' X) \quad (18)$$

Beim A-Optimalen Design wiederum wird dieser Wert minimiert. tr steht für die Berechnung der Spur. Der I-Wert wird über Gl. 19 errechnet, mit X_i , der Inversmatrix von X , und N als der Anzahl an Versuchspunkten (Montgomery, 2005, S. 439 ff.). Auf weitere Werte wird an dieser Stelle nicht eingegangen, da sie für diese Arbeit keine Bedeutung haben. Sie können aber in der entsprechenden Literatur gefunden werden, wie z. B, Montgomery (2005), Kleppmann (2008) oder Atkinson & Donev (1992).

$$I = \text{tr}(X' X * \frac{X_i}{N}) \quad (19)$$

Ein wichtiges Werkzeug beim Bewerten eines Versuchsplans ist die Visualisierung. Diese hilft zu erkennen, in welchen Bereichen Untersuchungen durchgeführt und welche vernachlässigt werden. Üblicherweise liegt jeder Versuchsplan als Tabelle vor, s. Abb. 22, die je nach Umfang eine genaue Vorstellung ermöglicht oder zu komplex wird, um die genaue Lage der Versuchspunkte zu verstehen.

	Block	x_1	x_2	x_3
C1.1	1	-1	1	-1
C1.2	1	1	-1	1
C1.3	1	0	0	0
C1.4	1	0	0	0
C2.1	2	1	-1	-1
C2.2	2	-1	1	1
C2.3	2	0	0	0
C2.4	2	0	0	0
C3.1	3	-1	-1	-1
C3.2	3	1	1	1
C3.3	3	0	0	0
C3.4	3	0	0	0

Abbildung 22:
Musterversuchsplan

Die einfachste Möglichkeit zur Visualisierung der Versuchspunkte ohne die Einbeziehung weiterer Informationen ist die Darstellung der Versuchspunkte im ein-, zwei- oder dreidimensionalen Raum, vgl. Abb. 21 oder 20. Diese simple Methode hat den Nachteil, dass die Anzahl der darstellbaren Dimensionen stark beschränkt ist.

Weitere Informationen kann die Einbeziehung eines beabsichtigten Regressionsmodells und die Annahme einer zu erwartenden Streuung liefern. Der Hebelwert (*engl. Leverage*) dient dazu, deutlich zu machen, ob es sinnvoll ist, weitere Versuchspunkte zu platzieren (Leardi, 2009, S. 161 ff.). Der *Leverage* kann für jeden einzelnen möglichen Versuchspunkt im Versuchsraum berechnet werden. Ein Wert von nahe Eins bedeutet, dass das Ergebnis an diesem Punkt einen hohen Einfluss auf das Modell hat. Ein Wert von deutlich unter Eins hingegen zeugt von einem geringeren Einfluss. Daraus leitet Leardi (2009, S. 161 ff.) ab, dass in solchen Bereichen, in denen der *Leverage* sehr gering ist, ein weiteres Experiment wenig Sinn macht, da dessen Ergebnis durch das Modell gut prognostiziert werden kann. In den Abb. 23 und 24 ist jeweils der Unterschied der *Leverage* für ein Regressionsmodell erster und zweiter Ordnung für ein Box- Behnken- Design dargestellt. Die höhere Flexibilität des Modells zweiter Ordnung lässt den Randpunkten höhere Bedeutung zukommen. Bei

Experimenten, die sehr großer Streuung unterliegen, sollten die Werte mit besonders hohen Hebelwerten mehrfach getestet werden, da sie enorme Bedeutung für das Ergebnis haben (Jang & Anderson-Cook, 2011) .

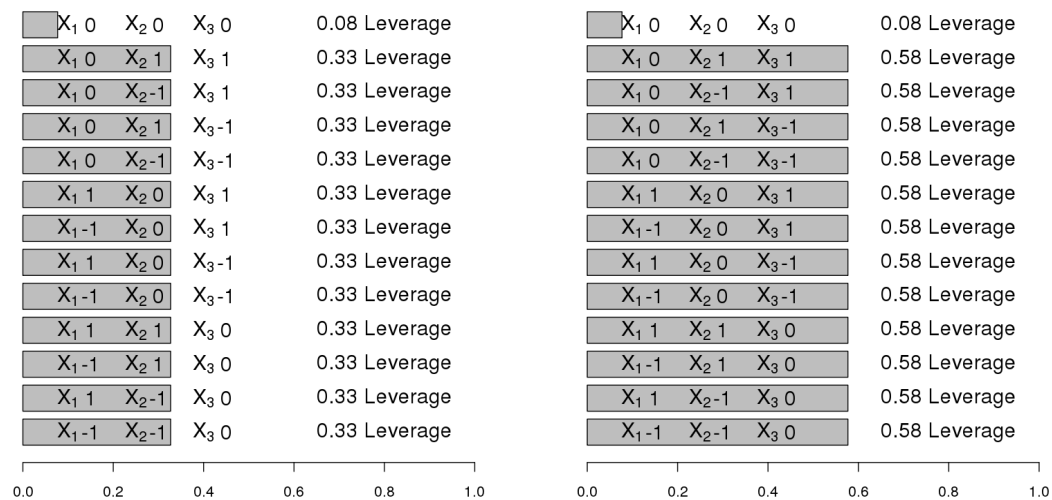


Abbildung 23: Leverage für den Box-Behnken-Plan aus Abb. 15 (links) mit Modell erster Ordnung und (rechts) zweiter Ordnung

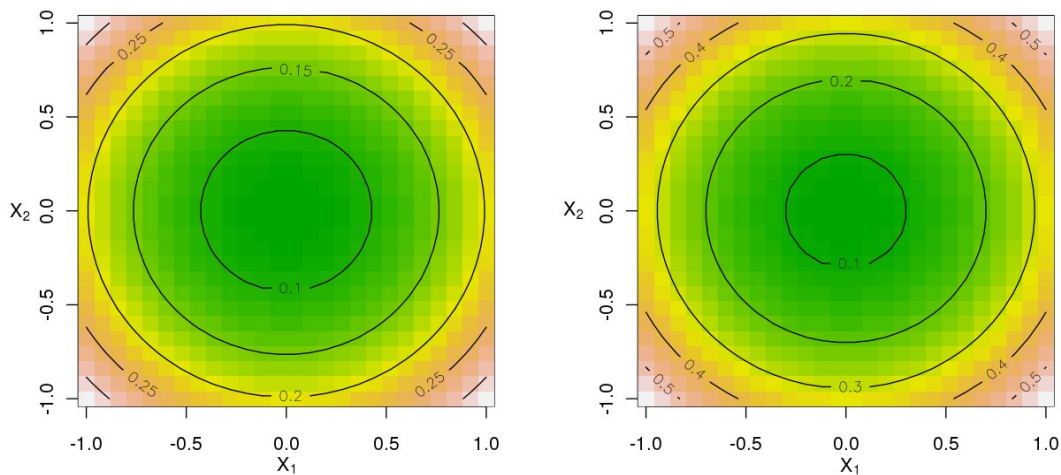


Abbildung 24: Leverage für den Box-Behnken-Plan aus Abb. 15 (links) mit Modell erster Ordnung und (rechts) zweiter Ordnung, aufgetragen für die Parameter X_1 und X_2

Wie zum Teil im Einzelnen dargestellt, sind die Möglichkeiten zur Bewertung eines Versuchsplans sehr vielfältig. Den meisten Methoden bleibt jedoch eine gemeinsame Schwachstelle. Sie setzen bereits ein passendes Regressionsmodell bzw. eine Prognose der Ergebnisse, bzw. deren Streuung, voraus. Dennoch ist die Kontrolle und die kritische Überprüfung eines Versuchsplans sinnvoll, um zu gewährleisten, dass er geeignet ist, das gesetzte Ziel zu erreichen und gleichzeitig den Aufwand zu kontrollieren (Jang & Anderson-Cook, 2011, S. 27 ff.).

3.3.2.2 Unterschied von realen und virtuellen Experimenten

Die unterschiedlichen Stärken und Schwächen der verschiedenartigen Experimente machen zum Teil eine unterschiedliche Herangehensweise nötig. Da reale Experimente, trotz sorgfältiger Planung und Ausführung häufig einer Vielzahl von nicht steuerbaren Umwelteinflüssen unterliegen, muss durch die mehrfache Wiederholung des Experiments sichergestellt werden, dass das gefundene Ergebnis des realen Experiments nicht nur ein Ausreißer ist, der durch einige unkontrollierte Versuchsfaktoren zustande gekommen ist. Eine höchstmögliche Wiederholungszahl der einzelnen Versuche ist hierzu eine Option, die häufig genutzt wird. Nicht nur wirtschaftliche und zeitliche Überlegungen, sondern auch methodische Defizite verbieten jedoch eine solche Herangehensweise. Ein effektiver Weg, den Versuchsumfang zu beschränken, ist die Verwendung eines geeigneten Versuchsdesigns, vgl. 3.3.2.1 .

Die realen Experimente dienen in dieser Arbeit als Beleg dafür, dass die Prognosen der CFD-Simulationen mit den realen Prozessen übereinstimmen. Sind die Ergebnisse nicht zutreffend, müssen die Modelle abgelehnt oder verbessert werden. Daher sind stimmige Ergebnisse für das gesamte Projekt wichtig. Die Problematik bei den Simulationen ist eine grundlegend andere, da die weitgehende Unabhängigkeit des Prozesses von unbekannten Einflussfaktoren erhebliche Vorteile mit sich bringt. So lassen sich unbekannte Störgrößen weitestgehend ausschließen. Die Ergebnisse sind unter der Bedingung, dass das verwendete Modell geeignet ist und richtig implementiert wurde, frei von Rauschen und Ausreißern. Ein solches Modell kann zur Untersuchung der Parameter und ihrer Wechselwirkungen genutzt werden. Wie bei den realen Experimenten lässt sich durch ein geeignetes Versuchsdesign die Anzahl der benötigten Simulationen erheblich reduzieren und die Effekte der verschiedenen Parameter samt ihrer Wechselwirkung untereinander können schnell und deutlich erkannt werden.

Unbekannte und unkontrollierbare Einflussgrößen werden als Störgrößen bezeichnet. Ihr Einfluss lässt das Ergebnis trotz gleicher Faktoren und Faktorstufen variieren. Das Fehlen dieses Phänomens ist einer der größten Vorteile von virtuellen Experimenten. Obwohl viele statistische Methoden und Werkzeuge hauptsächlich zur Reduktion und zum Erkennen dieser Einflüsse entwickelt worden sind, bestätigen Fang et al. (2006, S. 127), dass viele statistische Methoden für Simulation benutzt werden können.

3.3.2.3 Auswertung

Bei der Auswertung der Experimente gelten die gleichen Prinzipien wie bereits bei der Planung. Sowohl das fachspezifische Wissen, als auch der Unterschied von virtuellen zu realen Experimenten muss berücksichtigt werden. Beides wird benötigt, um das Ergebnis eines Experiments richtig deuten zu können. Im ersten Schritt wird geprüft, ob das Ergebnis in dem zu erwartenden Bereich liegt oder ob es sich um einen Ausreißer handelt. Ausreißer sind Werte, welche durch falsche Versuche, unberücksichtigte Faktoren oder falsche Annahmen zustande kommen. Solche auffälligen Messwerte, die besonders bei der mehrfachen Wiederholung des gleichen Versuchs erkannt werden können, sollten nach Möglichkeit bei der weiteren Beurteilung der Ergebnisse ausgeschlossen werden (Kleppmann, 2008, S. 53 ff.). Dies ist im Einzelfall jedoch nicht immer klar, da gerade vermeintliche Ausreißer auf unbekannten Effekten beruhen und daher besonders interessant sind.

Der Effekt beschreibt den Einfluss eines Faktors auf das Ergebnis. Hierbei ist zwischen Haupteffekt und Wechselwirkungen zu unterscheiden. Haupteffekte sind jene, die einen direkten Einfluss auf das Ergebnis haben. Wechselwirkungen nehmen in Kombination oder indirekt Einfluss auf das Ergebnis. Zum Beispiel hat die Temperatur beim Gefrieren von Wasser einen direkten Einfluss, die Konzentration eines Frostschutzmittels hingegen kann das Eintreten nur verzögern. Darüber hinaus ist seine Wirkung immer abhängig von der Temperatur. Berechnet wird der Effekt jeweils durch den Vergleich der Ergebnisse auf den verschiedenen Faktorstufen $(\bar{y}_2, \bar{y}_1)$. Hierbei ist $\bar{d}$ ein Schätzwert für die wahre Differenz (δ) der beiden Mittelwerte (Kleppmann, 2008).

$\bar{d} = \bar{y}_2 - \bar{y}_1$	(20)
-----------------------------------	------

Die Standardabweichung s_d des Effekts wird durch Gl. 21 berechnet, in die die Anzahl der Experimente (N) im Ganzen und s, die Varianz der Einzelwerte, einfließen (Siebertz et al., 2010, S. 9 ff.).

$s_d = \sqrt{\frac{4}{N} * s^2}$	(21)
----------------------------------	------

Die Bestimmung der Freiheitsgrade (f) erfolgt durch Gl. 22.

$f = N - 2$	(22)
-------------	------

Dieser Wert gibt Auskunft, wie viele Informationen aus den Versuchen gewonnen werden können. Dies ist für die Wahl der Modelle wichtig, da umfangreichere Modelle mehr Informationen zum Anpassen benötigen, vgl. 3.3.2.3.2 .

3.3.2.3.1 Regression

Ein Werkzeug der statistischen Versuchsauswertung ist neben der Analyse in Form von Mittelwert, Varianz und Standardabweichung die Anwendung der Regression und der Regressionsanalyse. Bei der Regression wird die Abhängigkeit der Zielgrößen von den Einflussgrößen durch ein Modell beschrieben, so dass die Zielgrößen prognostizierbar werden. Diese Modelle drücken die wahre Funktion $y=f(x)$ durch die Näherung $y=g(x)$ aus. Hierzu werden verschiedene Arten von Funktionen genutzt. Die beliebtesten sind Polynome; prinzipiell kann aber jede Funktion genutzt werden, die eine Annäherung ermöglicht, vgl. 3.3.2.3.2 . Box et al. (2005, S. 440) stellten hierzu fest: „*All models are wrong; some models are useful.*“. Bei virtuellen Experimenten wird das Modell vom Modell als Metamodell bezeichnet. Der Gebrauch von Metamodellen ist eine effektive Methode, um den Rechenaufwand bei virtuellen Experimenten zu senken (Fang et al., 2006, S. 127 ff.).

Die Regressionsanalyse untersucht mit Hilfe verschiedener Methoden, wie exakt die Regression ist. Hierbei ist besonders zu beachten, dass das Modell eines Vorgangs meist nur in einem bestimmten Bereich gültig ist, für den das Modell *gefittet* wurde. *Gefittet* bedeutet in diesem Zusammenhang „angepasst“. „*Over-fitting*“ ist das zu starke Anpassen des Modells an den Prozess. Dies erfolgt zum einen durch die Berücksichtigung von nicht relevanten Parametern, zum anderen durch deren falsche Gewichtung. „*Under-fitting*“ hingegen bedeutet, dass das Modell nicht in ausreichendem Maße an die Daten angepasst ist. Zum Testen der Übereinstimmung wurden verschiedene Methoden in Form von Tests und Kennzahlen entwickelt, deren wichtigste hier besprochen werden.

Der erste Schritt ist die Betrachtung der Residuen, die den Unterschied von Prognose ($\hat{y}$) und Stichprobe (y) beschreiben. Im Unterschied zum statistischen Fehler, der die Abweichung vom absoluten Wert beschreibt, der aber nicht genauer als die Stichprobe ermittelt werden kann, lassen sich diese berechnen und darstellen.

Ein Residuenplot ist hilfreich, da aus der optischen Darstellung der Abweichung die Tendenz und mögliche Gründe für die Abweichung abgelesen werden können. In Abb. 25 sind beispielhaft drei verschiedene Residuenplots dargestellt: „Modell A“ zeigt ein geeignetes Modell, da die Abweichungen zufällig auftreten; das „Modell B“ ist weniger geeignet, weil die ansteigende Tendenz, die sowohl durch die anfängliche Abweichung nach unten als auch durch die spätere Abweichung nach oben impliziert ist, nicht beachtet wird; in „Modell C“ ist der typische Verlauf für einen Datensatz dargestellt, in dem eine lineare Regression durchgeführt wurde, obwohl die Abweichungen an den Rändern auf einen quadratischen Zusammenhang schließen lassen.

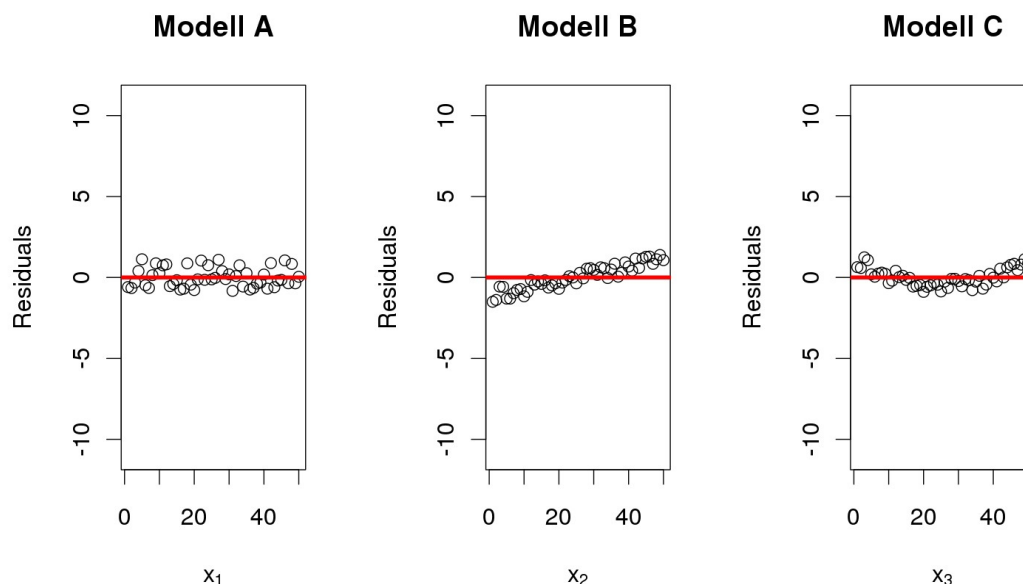


Abbildung 25: Muster Residuenplot

Zur besseren Vergleichbarkeit von Modellen wird von vielen Anwendern die standardisierte Variante der Residuen bevorzugt (Montgomery, 2005, S. 405 ff.). In dieser Variante, die auch als normalisiert oder student'isiert bezeichnet wird, wird das Residual durch die geschätzte Varianz geteilt, um das Residual unabhängig von der vorliegenden Y- Größe zu machen. Dieses hat den Vorteil, dass Residuen und deren Plots der verschiedenen Modelle besser vergleichbar sind. Da sich aus der Normalisierung keine grundlegende Änderung bei der Auswertung ergibt, wird an dieser Stelle auf entsprechende Fachliteratur verwiesen, in der die genaue Berechnung des externen oder internen student'ischen Residuals dargelegt ist (Montgomery, 2005, S. 405 ff.).

Eine weitere grafische Methode, welche sehr effektiv genutzt werden kann, ist das gegenseitige Plotten des prognostizierten und gemessenen y-Werts, wie in Abb. 26 zu sehen ist. Hierbei werden die Werte jeweils gegeneinander geplottet, um zu sehen, ob sich Abweichungen ergeben. Die Analyse erfolgt analog der Residuenanalyse. Die vorhandenen Abweichungen sollten zufällig verteilt sein und keinem festen Trend folgen. Besonders sinnvoll ist diese Methode, wenn sie mit der Kreuzvalidierung kombiniert wird, wie auch bei Velten (2009, S. 79) vorgestellt. Die Kreuzvalidierung teilt den Datensatz in Trainings- und Testdaten auf. Der Trainingsdatensatz wird genutzt, um das Modell auszuwählen und zu fitten. Der Testdatensatz wiederum dient dazu, um zu überprüfen, ob die Prognosen des Modells mit den tatsächlichen Ergebnissen übereinstimmen. Dieses einfache Verfahren kann sehr effektiv sein, um falsche Modelle zu identifizieren (Kjeldahl & Bro, 2010, S. 558 ff.). Dies erfordert jedoch eine gewisse Mindestgröße des Datensatzes, damit die Verwendung Sinn macht.

Sowohl die grafische Auswertung als auch eine rein quantitative Analyse sind alleine nicht in jeder Hinsicht aussagekräftig, da auf unterschiedliche Arten untersucht wird. Die grafische Analyse stellt den Verlauf einer Kennzahl in den Vordergrund, während

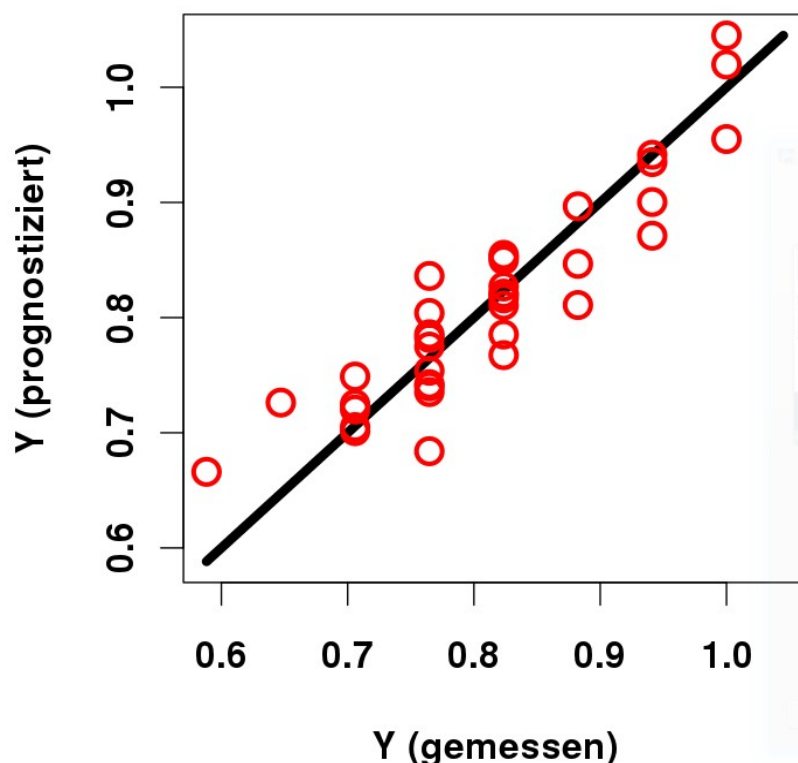


Abbildung 26: Vergleich von gemessenen und prognostizierten Y-Werten

die quantitative Untersuchung häufig nur die Kennzahl selbst berücksichtigt. Die quantitative Übereinstimmung des Modells kann durch eine Varianzanalyse (*ANOVA*, engl. *Analysis of Variance*) ermittelt werden. Allus et al. (1989, S. 65 ff.) empfehlen diese Methode, da durch die *ANOVA* Tabelle, vgl. Abb. 27, gut die Korrelation von einzelnen Faktoren mit dem Modell geprüft werden kann. Die Varianzanalyse wird immer dann genutzt, wenn aus einem großen Datensatz von Versuchsdaten die relevanten Parameter zu filtern sind (Velten, 2009, S.67 f.). Die *ANOVA* ist somit sowohl für die Bewertung als auch für das Aufstellen eines Regressionsmodells ein geeignetes Hilfsmittel.

```

                Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
x1                1 10854.1 10854.1  1194.5 < 2.2e-16 ***
Residuals       48   436.2     9.1
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

```

Abbildung 27: Musterergebnisse einer Varianzanalyse (ANOVA)

Die Voraussetzungen zur Nutzung der *ANOVA* sind, dass die Messwerte unabhängig, die Varianzen in den Gruppen gleich groß und die Ergebnisse in der Gruppe selbst normal verteilt sind (Schürmann, 2000, o. S.). Diese Voraussetzungen sind bereits durch die Anwendung eines geeigneten Versuchsplans sichergestellt, vgl. 3.3.2.1. Die spezifischen Eigenschaften von virtuellen Versuchen machen zusätzliche Wiederholungen einzelner Experimente obsolet, da auch bei mehrmaliger Wiederholung des gleichen Versuchs keine Streuung zu erwarten ist, vgl. 3.3.2.2. Die beschriebene Vorgehensweise mit der Nutzung der *ANOVA* kann bei der Untersuchung mehrerer Responsevariablen gleichzeitig durch die *MANOVA* (engl. *multivariate Analysis of Variance*) ersetzt werden.

Bei der Interpretation der Kennzahlen oder der Plots sind immer alle Werte zu berücksichtigen, da die partikulare Betrachtung häufig zu falschen Schlussfolgerungen führt. Ein häufiger Fehler ist z. B. die Fehlinterpretation von prozentualen Übereinstimmungen, die häufig nur unzureichend die Güte eines Modells bestimmen, wenn absolute Werte wie Vorhersagefehler oder besser validierte Fehler nicht berücksichtigt werden (Kjeldahl & Bro, 2010, S. 558 ff.).

3.3.2.3.2 Modelle für die Regression

„A mathematical model is a triplet (S, Q, M) where S is a system, Q is a question relating to S, and M is a set of mathematical statements

$M = \{\sum_1, \sum_2, \dots, \sum_z\}$ which can be used to answer Q“ (Velten, 2009, S. 12).¹

Die von Velten angesprochenen mathematischen Aussagen, die für ein mathematisches Modell nötig sind, werden in der Regel durch Gleichungen ausgedrückt. Diese stellen den Zusammenhang zwischen unabhängigen und abhängigen Variablen einer Funktion her. Hierzu können verschiedene Funktionen genutzt werden, je nachdem, welche Art von Modell das Ziel ist.

Modelle lassen sich hierbei in zwei Kategorien einteilen: phänomenologische Modelle, die ausschließlich statistische Daten nutzen, und mechanistische Modelle, die auch weitere Informationen mit einbeziehen (Velten, 2009, S. 35 ff.). In dieser Arbeit finden beide Arten Verwendung. Bei der CFD- Simulation werden mechanistische Modelle verwendet, die die physikalischen Vorgänge simulieren. Diese werden in 4.1 betrachtet. Für RSM (vgl. Abs. 3.3.2.3.3) hingegen werden ausschließlich phänomenologische Modelle eingesetzt. Besonders Polynome sind gut geeignet, da sich die Terme leicht nach Bedarf erweitern und reduzieren lassen. Montgomery stellt in diesem Zusammenhang fest, dass besonders Polynome zweiter Ordnung geeignet sind, das Umfeld von Extrempunkten zu beschreiben (Montgomery, 2005, S. 413 f.). Giunta et al. (1998, o. S.) bestätigen mit ihrer Untersuchung, dass diese Art der Modelle in der Anwendung genauere Ergebnisse liefern kann als andere. Solche Modelle lassen sich auch leicht durch die Minimierung der quadrierten Residuen fitten. Aufgrund dieser Vorteile werden im Weiteren nur derartige Modelle besprochen.

Polynome werden in verschiedene Grade unterschieden. Einfache Polynome (Gl. 23) des ersten Grades sind fähig, lineare Zusammenhänge wiederzugeben.

$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \epsilon \quad (\text{Giovannitti-Jensen \& Myers, 1989, S. 159})$	(23)
--	------

¹ engl.: Ein mathematisches Modell ist ein Triplett (S, Q, M), in dem S ein System ist, Q eine Frage bezüglich S und M ist eine Sammlung mathematischer Aussagen $M = \{\sum_1, \sum_2, \dots, \sum_z\}$, welche zur Beantwortung von Q benutzt werden können.

Besser geeignet sind Polynome vom Grad 2, welche auch komplexere Zusammenhänge darstellen können, vgl. Gl 24.

$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i < j} \beta_{ij} x_i x_j + \epsilon$ (Giovannitti-Jensen & Myers, 1989, S. 159)	(24)
---	-------------

3.3.2.3.3 Response Surface

Response Surface Methodology (RSM) (engl. Reaktions-Oberflächen-Methode) bezeichnet eine Sammlung von verschiedenen Methoden der Versuchsplanung, Modellierung und Visualisierung (Montgomery, 2005, S. 405). Die Methoden versuchen, das Ergebnis eines Prozesses durch die Justierung der Parameter zu optimieren, wahlweise durch Maximierung oder Minimierung des Ergebnisses (Khuri, 2006, S. 66). Der Name der Methode leitet sich von den verwendeten Grafiken ab. Sowohl 28 als auch 29 zeigen beispielhafte RSM-Plots, wobei jeweils der Effekt von zwei Variablen auf das Ergebnis visualisiert wird. In der 3D- Darstellung wird das Ergebnis durch die Z-Achse visualisiert. In der 2D- Darstellung werden hierzu Höhenlinien verwendet.

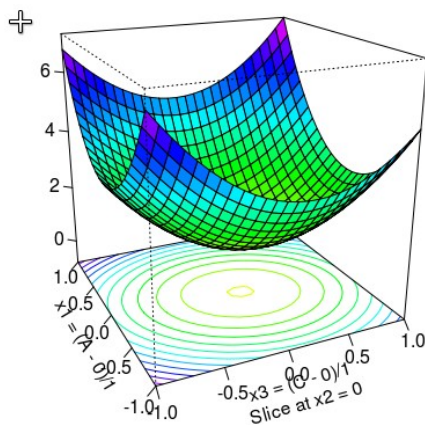


Abbildung 28: Response Surface Plot in 3D

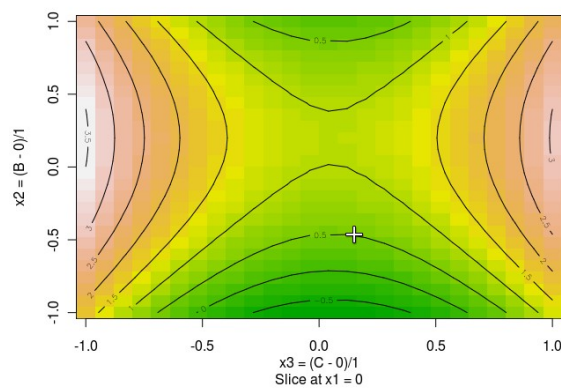


Abbildung 29: Response Surface Plot in 2D

Die Stärke von RSM ist die klare Strukturierung. Abb. 30 zeigt den genauen Ablauf und verdeutlicht, dass die Versuchsdaten selbst bestimmen, wie viele Versuche nötig sind. Sobald die Daten ausreichen, ein entsprechendes Modell zu fitten, wird auf weitere Versuche verzichtet.

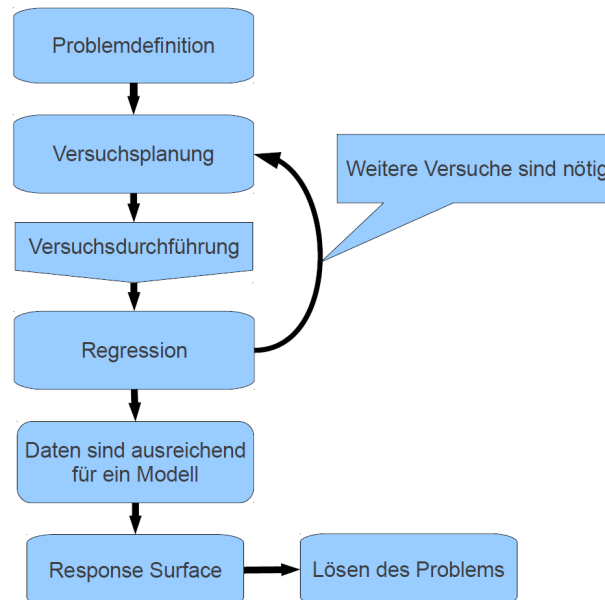


Abbildung 30: Ablauf einer RSM

In der Regel werden Polynome erster oder zweiter Ordnung für die Modellierung verwendet (Montgomery, 2005, S. 406). Aufgabe der Modelle ist es, einen möglichst engen Zusammenhang zwischen den unabhängigen und den abhängigen Variablen herzustellen, so dass Ergebnisse für den Untersuchungsraum prognostizierbar werden. Die Modelle berücksichtigen hierzu ausschließlich den empirischen Zusammenhang und vernachlässigen physikalische oder anderweitige Faktoren vollständig. Das System wird wie eine *Black-Box (engl.)* behandelt (Velten, 2009, S. 34). Da der Untersuchungsraum oft sehr klein ist, genügen Modelle von niedriger Ordnung. Vor allem Modelle zweiter Ordnung sind geeignet, da sie die Verhältnisse an einem Extrempunkt deutlich darstellen. Bessere Ergebnisse könnten mit mechanistischen Modellen erzielt werden, weil weniger Parameter benötigt werden, eine genauere Extrapolation möglich und die Abweichung geringer ist (Khuri, 2006, S. 66). Da mechanistische Modelle ein detailliertes Wissen über die inneren Abhängigkeiten voraussetzen, finden diese hier nur selten Verwendung. Wie in Abschnitt 3.3.2.3.2 dargestellt, ist bei gleicher Prognosequalität ein einfaches Modell vorzuziehen, um den Versuchsaufwand gering zu halten. Weitere Informationen zu RSM sind in der entsprechenden Fachliteratur zu finden bei Myers et al. (2009), Montgomery (2005) oder Khuri (2006).

3.4 Free Software und Open-Source Software

Die Verwendung von zugänglicher und kostenfreier Software hat viele Vorteile gegenüber dem Einsatz von proprietärer Software, die im Eigentum eines Einzelnen steht, die nicht ohne dessen Zustimmung verändert werden darf, deren Quellcode nicht einsehbar ist und deren Nutzung für gewöhnlich kostenpflichtig ist (Lakhani & Wolf, 2005, S. 15 ff.). Gosh et al. (2006, o. S.) beziffern den Wert der existierenden *Free* und *Open source Software* (F/OSS) im Jahr 2006 auf 12 Milliarden Euro und die Wertentwicklung zeigte in den acht vorangegangenen Jahren eine Verdopplung alle 18 bis 24 Monate. Der Kostenvorteil, der durch die kostenlose Lizenz entsteht, wird jedoch stark überbewertet. Die Entwicklungsmöglichkeiten, die Qualität der Software und die Zugänglichkeit des Quellcodes werden als Vorteile hingegen oft nicht hoch genug eingeschätzt (Raymond, 1999, S. 23) .

Die genaue begriffliche und inhaltliche Abgrenzung zwischen *Free* und *Open source Software* ist schwierig, da die Ziele der beiden Ideen sehr nahe beieinander liegen, ohne identisch zu sein. Die Begriffe sind untrennbar mit den jeweils federführenden Organisationen verbunden, der *Free Software Foundation* und der *Open Source Initiative* (Henley & Kemp, 2008). Diese beiden Organisationen beschäftigen sich sowohl mit der Überprüfung und Ausarbeitung der Lizenzierungsmodelle, als auch mit der Verbreitung und der Organisation derartiger Projekte. Sie organisieren Konferenzen, helfen, die Community weiter auszubauen und stellen die Finanzierung derselben sicher. Dies geschieht in der Regel durch das Sammeln von Spenden und die kostenfreie Mitarbeit der Mitglieder. Die wichtigste Grundlage der F/OSS-Software und der Unterschied zwischen den beiden Strömungen sind die verwendeten Lizenzen, unter denen die einzelne Software verbreitet wird. Die Lizenzen stellen sicher, dass die Software nur im Sinne der Entwickler genutzt werden darf. Hierzu sind verschiedene Lizenzmodelle entwickelt worden, wie z.B. *GNU General Public License*, *Nokia Open Source License* oder *Fair License*. Die Anzahl der Lizenzen ist sehr umfangreich. Von einzelnen Lizenzen sind bereits verschiedene Versionen verfügbar, was an dieser Stelle aber nicht weiter vertieft wird. Genauere Informationen zur Rechtslage geben Jaeger & Metzger (2006) .

Die Idee und die Methode von F/OSS existiert bereits seit den Anfängen der Software- und Computerentwicklung. In den 60er und 70er Jahren wurde die Grundlagenforschung für das Internet und die Betriebssysteme in universitären Einrichtungen oder firmeneigenen Forschungszentren vollzogen (Lerner & Tirole, 2005, S. 101 f.). Das Besondere der firmeneigenen Forschungszentren war deren weitreichende Autonomie. Prominente Beispiele sind *Bell Labs* und *Xerox's Parc*. In diesem Umfeld wurden die entwickelten Programme und Codeteile ohne Beschränkung und rechtlichen Rahmen kopiert und weiterentwickelt (Lerner & Tirole, 2002, S. 198 ff.). Mit der Kommerzialisierung des IT-Marktes endete diese Phase, ohne dass die Ideen vergessen wurden, nachdem erste Firmen sich Codeteile rechtlich schützen ließen. Die rechtlichen Grundlagen zur gemeinsamen Weiterentwicklung und Nutzung von Programmen und Technologien wurden dann durch Richard Stallmann mit der Gründung der *Free Software Foundation* im Jahr 1985 gelegt (Henley & Kemp, 2008, S. 77 ff.) . Sowohl die Anzahl der Nutzer als auch die der Entwickler ist mit der Verbreitung des Internets weiter rasant angestiegen (Ghosh et al., 2006, S. 9 f.) . Eine komplette Revolution der Software- Entwicklung durch *open source* datiert Bretthauer (2002, o. S.) auf das Jahr 1998.

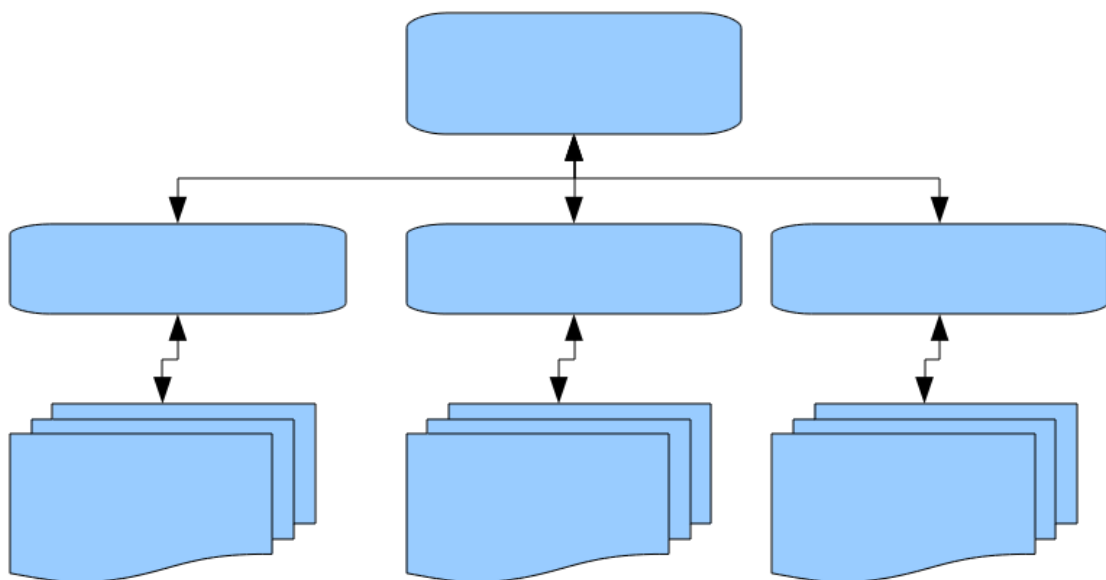


Abbildung 31: Organisationsprinzip Kathedrale

In der gleichen Zeit entstand der bekannte Essay *The Cathedral and the Bazar* von Raymond (1999), der die unterschiedlichen Funktionsprinzipien der Software-Entwicklung bei proprietärer Software und bei F/OSS beleuchtet. Die Grafiken 31 und 32 erläutern den theoretischen Aufbau eines solchen Projekts. In der praktischen Umsetzung können sich Mischformen beider Varianten ausbilden.

Die klassische Organisationsstruktur eines Softwareprojekts wird von Raymond (1999, S. 23 ff.) mit dem Aufbau einer Kathedrale beschrieben. Wenige Fachleute und eine feste hierarchische Struktur prägen den Aufbau des gesamten Projekts. Der Endnutzer hat erst Zugriff auf das fertige Endprodukt, welches durch und durch geplant und in der Theorie frei von *Bugs* (Fehlern) ist. Die Interaktion von Nutzern und Entwicklern im Entstehungsprozess ist nicht vorgesehen, mit der Folge, dass auf Wünsche nur in der Planungsphase Rücksicht genommen werden kann. Eine Individualisierung oder Verbesserung des Produkts durch den Nutzer nach dessen Fertigstellung ist nicht eingeplant. Genauso wenig ist die inhaltliche Kontrolle des Programms möglich, da dem Nutzer nur die semantisch unleserliche Maschinensprache vorliegt und nicht der lesbare Quellcode.

Im Gegensatz dazu hat die vom Basar abgeleitete Organisationsform, vgl. Abb. 32, die durch die spezifischen Erfordernisse von F/OSS entstanden ist, bemerkenswerte Vorteile. Die Grundidee kann auf Linus Torvalds Entwicklungsart zurückgeführt werden (Raymond, 1999, S. 27 f) : Das Produkt soll frühzeitig und oft zugänglich gemacht werden, um möglichst viele Teilnehmer zu gewinnen. Die gesamte Entwicklung folgt keinem festen Plan und wird von verschiedenen Gruppen nach Interesse und Bedarf vollzogen.

Von Raymond (1999) wird dieses Gebilde als *babbling bazaar* (engl. redender Basar) bezeichnet. Nach Bedarf finden sich verschiedene Gruppen zusammen, die nach ihren Fähigkeiten und Erfordernissen einzelne Probleme lösen. Der Einfluss der Nutzer ist durch ihre aktive Beteiligung immens, und die Verbesserungen können unmittelbar eingearbeitet werden. Die Teilleistung jedes Einzelnen kann sich somit zu einem großen funktionierenden Projekt zusammenfinden.

Die Erfahrung mit derartigen Projekten zeigte auch, dass derartig entwickelte Software entscheidende Vorteile im Bereich Sicherheit und Stabilität hat, da viele Augen eine bessere Fehlerkontrolle gewährleisten. Die Funktionsfähigkeit dieses Prinzips ist mittlerweile vielfach belegt und kann auf andere Gebiete übertragen worden, wofür Wikipedia als Beispiel dient.

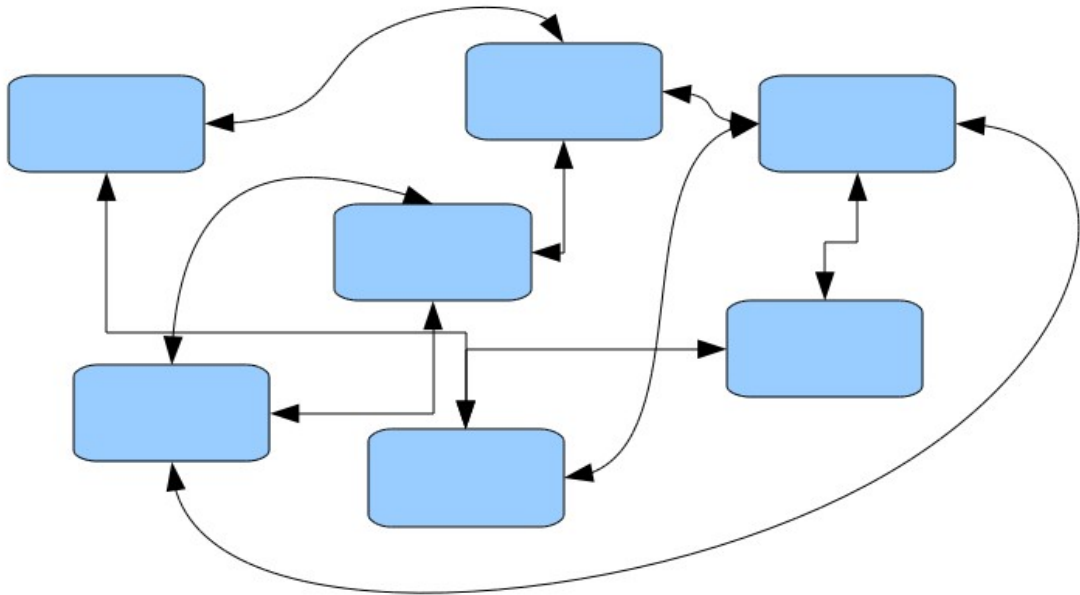


Abbildung 32: Organisationsprinzip Basar

4 Material und Methoden

4.1 CFD- Modell

Das verwendete CFD- Modell basiert auf dem Erhaltungsgesetz für Masse (Gl. 25), Impuls (Gl. 26) und Energie (Gl. 27) und beschreibt die Bewegung für jedes Fluid vollständig (Hirsch, 2007, S. 39 f.).

Massenerhaltung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$ (Hirsch, 2007, S. 61)	(25)
Impulserhaltung $\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v} + p \mathbf{I} - \boldsymbol{\tau}) = \rho \mathbf{f}_e$ (Hirsch, 2007, S. 61)	(26)
Energieerhaltung $\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} H - k \vec{\nabla} - \boldsymbol{\tau} \cdot \vec{v} = W_f + q_H)$ (Hirsch, 2007, S. 61)	(27)

Allerdings sind die Erhaltungsgleichungen und partielle Differentialgleichungen komplexer, als sie erscheinen, weil sie nicht linear gekoppelt und nur schwer zu lösen sind. Daher sind Vereinfachungen für bestimmte Fälle üblich, in denen einzelne Terme gleich Null sind oder keine Bedeutung haben (Ferziger & Peric, 2008, S.14 f.). Übliche Vereinfachungen orientieren sich immer am konkreten Simulationsziel. Für die durchgeführten Simulationen sind sie in 4.1.1 genauer beschrieben.

4.1.1 Annahmen und Vereinfachungen

Da die Computertechnologie in den letzten Jahren große Fortschritte gemacht hat, steigt die Komplexität möglicher Simulationen beständig an. Gitter können stetig verfeinert und Phänomene mit immer mehr Details simuliert werden. Allerdings verbieten nicht nur ökonomische Gesichtspunkte, sondern auch der Wunsch nach Stabilität, die Modelle komplizierter zu gestalten als nötig. Die Forschung und Anwender der CFD- Technik haben über die Jahre verschiedene Techniken und Methoden entwickelt, um den Rechenaufwand zu reduzieren und die Stabilität zu erhöhen. Einige dieser Methoden benötigen bestimmte Voraussetzungen, wie ein newtonsches Fluid, um sinnvoll eingesetzt werden zu können.

Kunkelmann (2011, S. 25 f.) fasst diese Vereinfachung für das benutzte Modell, das *interFoam- Solver* von OpenFOAM, wie folgt zusammen:

- **Die Materialeigenschaften sind konstant.**

In dem verwendeten Modell werden die Dichte, die Viskosität und die Oberflächenspannung, welche in 3.2 näher beschrieben sind, für die Fluide als konstant angenommen. Änderungen, die durch Temperaturschwankungen oder Druckänderung entstehen, haben darauf keine Auswirkungen. Dies kann sicher vorausgesetzt werden, da die Temperatur in den Simulationen sowohl für die Flüssigphase als auch für die Gasphase als konstant angenommen wird. Die Temperatur wird auf Raumtemperatur festgelegt und die Konstanten entsprechend gewählt. Die gleiche Verfahrensweise gilt für den Druck. Die Konstanten werden für Atmosphärendruck auf Meeresspiegel festgelegt. Zwar wird durch diese Annahme ein Fehler in das System eingeführt, da beim Auslaufen ein Unterdruck in der Flasche entsteht, welcher die Fluideigenschaften bzgl. Viskosität, Oberflächenspannung und Dichte ändert, aber dieser Fehler ist minimal, da der maximal auftretende Unterdruck mit 30 Pa bestimmt wurde. Diese geringe Druckänderung verändert die Eigenschaften der Fluide kaum.

- **Die Fluide sind inkompressibel.**

Diese Bedingung bezieht sich auf das Verhalten der Fluide bei den untersuchten Geschwindigkeiten. Hohe Geschwindigkeiten haben je nach Fluid Dichteänderungen zur Folge. Hierbei muss zwischen den einzelnen Fluidarten, Gas und Flüssigkeit, unterschieden werden. Während bei Flüssigkeiten meist klar ist, dass diese nur bei extremem Druck komprimiert werden können, ist bei Gasen eine genauere Betrachtung notwendig. Ferziger & Peric (2008, S. 15) legen 0,3 Ma als Grenzwert fest. Die *Machzahl* muss für das jeweilige Fluid mit (Gl. 28) berechnet werden. Bei maximalen Strömungsgeschwindigkeiten unterhalb von 0,3 Ma kann sicher eine inkompressible Strömung angenommen werden. Die Folge ist, dass sich die Impulserhaltungs- (Gl. 26) und Massenerhaltungsgleichung (Gl. 25) stark vereinfachen lassen, wenn die Strömung zugleich *isotherm* ist, da die Viskosität ebenfalls konstant bleibt (Ferziger & Peric, 2008, S. 15). Die Divergenz im Geschwindigkeitsfeld ist somit gleich 0 (Gl. 29).

$Ma = \frac{u}{\sqrt{\kappa R_{Gas} T}}$ (Kunkelmann, 2011, S. 10)	(28)
$\nabla \cdot \vec{u} = 0$ (Kunkelmann, 2011, S. 10)	(29)

- **Das Fluid ist newtonsch.**

Die Rheologie von Fluiden ist in 3.2 beschrieben. Stark vereinfacht, *newtonsche* Fluide zeichnen sich durch einen linearen Zusammenhang im Fließverhalten aus. Dieser lineare Zusammenhang zwischen Druck und Verformungsgeschwindigkeit vereinfacht den Stresstensor (τ) bei fehlender Divergenz des Geschwindigkeitsfelds wie folgt (Kunkelmann, 2011, S. 11):

$\tau = -\left(p + \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot \vec{u}\right) \mathbf{I} + [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T]$ (Kunkelmann, 2011, S. 11)	(30)
$\tau = -p \mathbf{I} + [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T]$ (Kunkelmann, 2011, S. 11)	(31)

- **Ein Phasenübergang der Fluide tritt nicht auf.**

Diese Annahme ist wichtig, da die Annahme bzgl. Inkompressibilität und konstanten Materialeigenschaften sonst ihre Gültigkeit verliert. Zusätzlich ist die verwendete Methode Phasentrennung in der implementierten Form nicht fähig, den Phasenübergang aufzulösen, s. 4.1.4.1.

4.1.2 Turbulenz

Turbulenz (4.1.2) ändert die Anforderungen an die Simulationen erheblich. Das Auftreten der Turbulenzwirbel, die Strukturen kleiner als $10\ \mu\text{m}$ enthalten und die in einer Frequenz von 10 kHz auftreten können, würde für die räumliche Diskretisierung eines Gebietes von $10 \times 10\ \text{cm}$ eine Auflösung in 10^9 bis 10^{12} Rechenzellen und eine zeitliche Diskretisierung von $100\ \mu\text{s}$ nötig machen (Tu et al., 2008, S. 102). Dies wird als DNS (engl. *direct numerical simulation*) bezeichnet. Diese Anforderungen sind auch im Jahre 2012 nur von den schnellsten Computern der Welt lösbar und würden einen erheblichen Einsatz an Zeit erforderlich machen. Zur Lösung dieses Problems sind verschiedene Techniken entwickelt worden, die es erlauben, sowohl die räumliche als auch die zeitliche Diskretisierung zu vergrößern und somit den Rechenaufwand erheblich zu reduzieren.

In der Regel wird zwischen drei Hauptarten der Simulation unterschieden: DNS, LES und RANS. Zusätzlich gibt es verschiedene Misch- und Sonderformen, die in diese Darstellung keinen Eingang finden. Die Struktur von Turbulenz, s. 4.1.2, besteht aus einer Vielzahl von ineinander verschachtelten Wirbeln. Ihre Größe und Energie macht sie bei Weitem zu den effektivsten Trägern der Erhaltungsgrößen (Ferziger & Peric, 2008, S. 330 ff.), obwohl die großskaligen Bewegungen im Allgemeinen viel energiereicher sind als die kleinskaligen. Diesen Umstand macht sich die LES (engl. *Large eddy simulation*), Grobstruktursimulation, zu Nutze. Die Gitter- und Zeitschrittweite muss so gewählt werden, dass nur die kleinsten Strukturen modelliert werden und die großen energiereichen Strukturen im vollen Umfang mit berechnet werden. Die DNS geht noch einen Schritt weiter, verzichtet vollständig auf die Modellierung und simuliert auch die kleinste Fluktuation. Für viele Anwendungen ist eine derartige Auflösung der turbulenten Strukturen mit LES oder DNS aber nicht nötig, da die modellierten Effekte ausreichend genau sind, um die Hauptströmung richtig zu beschreiben (Tu et al., 2008, S. 251 f.). Im Beispiel der Auslaufströmung in der Flasche wird aus diesem Grund die RANS (engl. *Reynolds-averaged Navier-Stokes Equation*), oder auch RNS genannt, verwendet. Diese Technik erlaubt die komplette Modellierung der Turbulenz und somit eine erhebliche Reduktion des Rechenaufwands, da sowohl Zeitschritte als auch Rechengitterweiten größer gewählt werden können. Ferziger & Peric (2008, S. 80) sehen LES und DNS nur als letztes Mittel, wenn kein anderes Modell funktioniert. Darüber hinaus halten sie es nur im

akademischen Bereich zur Überprüfung von Modellen für verwendbar.

Die RANS beruht auf der Annahme, dass eine Mittlung der Turbulenz möglich ist. Ferziger & Peric (2008, S. 345 ff.) unterscheiden zwischen einer Zeitliechenmittlung bei stationärer Strömung und einer Ensemblemittlung bei instationärer Strömung, wie sie beim Auslaufen der Flasche vorliegt. Sie stellen die Methode, wie folgt, vor: In Gl. 32, die für statistisch stationäre Strömungen verwendet wird, wird die Turbulenz durch einen Wert und die Schwankung um diesen beschrieben. Im Grenzfall, s. Gl. 33, wird $\bar{\phi}$ unabhängig vom Startzeitpunkt der Mittlung bestimmt.

$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i) + \phi'(x_i, t)$ (Ferziger & Peric, 2008, S. 345)	(32)
---	------

$\bar{\phi}(x_i, t) = \lim_{T_M \rightarrow \infty} \frac{1}{T_M} \int_0^T \phi(x_i, t) dt$ (Ferziger & Peric, 2008, S. 345)	(33)
--	------

Die Ensemblemittlung wird verwendet, wenn keine statistisch stationäre Turbulenz vorliegt. Bei dieser Methode wird das Zeitintervall T durch N, die Anzahl der Ensemblemittglieder, ersetzt.

$\bar{\phi}(N_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi_n(x_i, t) dt$ (Ferziger & Peric, 2008, S. 345)	(34)
---	------

Die Anwendung dieser Methode auf die Navier- Stokes- Gleichung führt zu den RANS Gleichungen, welche allerdings nicht geschlossen sind, da durch die Mittlung zusätzliche Terme eingeführt werden. Die wichtigsten zusätzlichen Terme sind die Reynolds- Spannungen (Gl. 35) und der turbulente Skalareffluss (Gl. 36). Das Auftreten dieser Terme in den Erhaltungsgleichungen verhindert, dass diese lösbar sind, da zu viele Unbekannte vorhanden sind. Dieses Problem wird in der Fachliteratur als Schließungsproblem bezeichnet. Gelöst wird dieses Problem durch die Einführung zusätzlicher Gleichungen, die auf Approximation beruhen und als Turbulenzmodell bezeichnet werden (Ferziger & Peric, 2008, S. 347).

Reynolds- Spannungen $\rho \overline{u'_i u'_j}$ (Ferziger & Peric, 2008, S. 346)	(35)
--	------

Turbulenter Skalareffluss $\rho \overline{u'_i \phi'}$ (Ferziger & Peric, 2008, S. 346)	(36)
--	------

Über die Jahre wurden verschiedene Turbulenzmodelle für verschiedene Strömungssituationen entwickelt. Dies ist nötig, da die meisten Turbulenzmodelle auf statistischen Beobachtungen beruhen und nur für den jeweiligen Einzelfall gültig sind. Die Anzahl der zusätzlichen Gleichungen ist sehr unterschiedlich. Ein gutes

Turbulenzmodell zeichnet sich durch Anwendbarkeit, Einfachheit, Genauigkeit, Robustheit und Effizienz aus (Tu et al., 2008, S. 251 f.). Das meist genutzte Turbulenzmodell ist das k- ϵ -Modell, welches zwei zusätzliche Gleichungen einführt (Do et al., 2010, S. 1155 ff.). Das Modell weist allerdings auch einige bekannte Nachteile auf, welche in 4.1.2.1 diskutiert sind. Für die Simulationen wird das k- ϵ -RNG-Modell verwendet, welches in 4.1.2.2 beschrieben ist. In der Literatur, wie z. B. Versteeg & Malalasekera (2007), Wilcox (2006), Pope (2000) und Bernard & Wallace (2002), sind viele weitere Modelle mit ihrer Herleitung und ihren Vor- und Nachteilen aufgeführt, die jedoch in dieser Arbeit nicht weiter thematisiert werden.

4.1.2.1 k- ϵ -Modell

Die Entwicklung des k- ϵ -Turbulenzmodells geht auf Harlow & Nakayama (1968) zurück (Scott-Pomerantz, 2005, S. 1 f.).

$k_t = \alpha \left(\frac{k^2}{\epsilon} k_x \right) - \epsilon$ (Scott-Pomerantz, 2005, S. 1)	(37)
$\epsilon_t = \beta \left(\frac{k^2}{\epsilon} \epsilon_x \right) - \gamma \frac{\epsilon^2}{k}$ (Scott-Pomerantz, 2005, S. 1)	(38)

Im k- ϵ -Modell werden Gl. 37 und 38 verwendet, weshalb derartige Modelle als Zweigleichungsmodelle bezeichnet werden. k [m^2/s^2] ist die turbulente kinetische Energie und ϵ [m^2/s^2] ist die isotrope Dissipationsrate. α , β und γ sind Konstanten. Die Gl. 39 und 40 geben an, wie durch k und ϵ auch die Größe l und die Geschwindigkeit θ der großen, energiereichen turbulenten Wirbel beschrieben werden.

$l = \frac{k^{2/3}}{\epsilon}$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 75)	(39)
$\theta = k^{1/2}$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 75)	(40)

Dieser Zusammenhang ist möglich, da sich bei hoher Turbulenz das Verhältnis von Extraktion aus der Hauptströmung und Verteilung zwischen den kleinen Wirbeln und der Dissipation nicht schnell ändert (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 75). Dieser Zusammenhang wird als Energiekaskade bezeichnet; die Energie wird von den großen Wirbeln über die kleinen Wirbel in innere Energie (Dissipation) umgesetzt (Ferziger & Peric, 2008, S. 349).

Da durch die Größen k und ϵ die Turbulenz auf allen Ebenen zutreffend beschrieben ist, müssen in diesem Modell keine weiteren Größen beachtet werden. Der Transport

der Größen k (Gl. 41) und ϵ (Gl. 42) erfolgt analog zu den Erhaltungsgleichungen mit den Transportgleichungen, wie in 4.1 beschrieben.

k- Gleichung: $\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k U) = \text{div}\left[\frac{\mu_t}{\sigma_k} \text{grad } k\right] + 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \epsilon$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 75)	(41)
ϵ- Gleichung: $\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \epsilon U) = \text{div}\left[\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \text{grad } \epsilon\right] + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} 2\mu_t S_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 75)	(42)

Die Gleichungen enthalten fünf einstellbare Konstanten, welche für viele verschiedene turbulente Strömungen wie folgt bestimmt wurden:

Konstanten im Standard k- ϵ- Modell: $C_{\mu} = 0,09; \sigma_k = 1,00; \sigma_\epsilon = 1,30; C_{1\epsilon} = 1,44; C_{2\epsilon} = 1,92$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 76)	(43)
--	------

Das *Standard k- ϵ - Modell* zählt zu den am häufigsten verwendeten Turbulenzenmodellen, und auch die Arbeit von Hain et al. (2009), die sich mit dem Füllen einer Flasche beschäftigt, nutzt dieses Modell, da das Modell bei moderatem Aufwand hinreichend genaue Ergebnisse liefert und bzgl. der Einströmrandbedingungen sehr robust gegenüber ungenauen Vorgaben ist (Laurien & Oertel, 2009, S. 181). Dieses Modell ist jedoch nicht in jedem Fall die beste Wahl. Das Modell zeigt unter anderem Probleme bei der Abbildung von Sekundärströmungen. Versteeg & Malalasekera (2007, S. 80) attestieren dem Modell, dass es bei (a) offenen Strömungsgebieten, (b) rotierenden Strömungen, (c) komplexen Strömungen (z. B. durch sehr komplexe Geometrien) und (d) Strömungen mit anisotropen Reynolds- Spannungen (4.1.2) unzulänglich sei (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 80). Die Ursache hierfür sind die Annahmen, die für die Turbulenz getroffen werden. Das Modell geht davon aus, dass sich die Turbulenz isotrop verhält und kennt somit keine Unterschiede bzgl. der Ausbreitung. Beim Ausströmen der Flüssigkeit sind sowohl Rezirkulationszonen in der Flasche als auch eine Wirbelbildung an der Mündung zu erwarten. Somit ist das *Standard k- ϵ - Modell* für diese Fälle nur wenig geeignet.

4.1.2.2 k- ε- RNG- Modell

Das k- ε- RNG Modell geht auf Yakhot & Smith (1992) zurück, und „die zu Grunde liegende Mathematik ist sehr abstrus“ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 87). Das Modell beruht auf der Annahme, dass sich die kleinskaligen Bewegungen besser durch größerskalige Bewegungen mit geänderter Viskosität abbilden lassen (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 87 f.). Die daraus resultierenden Transportgleichungen (Gl. 44 und 45), Annahmen (Gl. 47, 46, und 48) und Konstanten (Gl. 49) lassen sich, wie folgt, beschreiben:

k- Gleichung: (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 87)	
$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho k U) = \text{div}[\alpha_\epsilon \mu_{eff} \text{grad } k] + \tau_{ij} \cdot S_{ij} - \rho \epsilon$	(44)
ε- Gleichung: (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 87)	
$\frac{\partial(\rho \epsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho \epsilon U) = \text{div}[\alpha_\epsilon \mu_{eff} \text{grad } \epsilon] + C_{1\epsilon}^* \frac{\epsilon}{k} \tau_{ij} \cdot S_{ij} - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}$	(45)
$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i' u_j'} = 2\mu_t S_{ij} - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (\text{Versteeg \& Malalasekera, 2007, S. 87})$	(46)
$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad \mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (\text{Versteeg \& Malalasekera, 2007, S. 87})$	(47)
$C_{1\epsilon}^* = C_{1\epsilon} - \frac{\eta(1 - \frac{\eta}{\eta_0})}{1 + \beta \eta^3} \quad \eta = \frac{k}{\epsilon} \sqrt{2S_{ij} \cdot S_{ij}}$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 87 f.)	(48)
Konstanten k- ε- RNG Modell:	
$C_\mu = 0,0845; \alpha_k = \alpha_\epsilon = 1,39; C_{1\epsilon} = 1,42;$ $C_{2\epsilon} = 1,68; \eta_0 = 4,377; \beta = 0,012$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 87 f.)	(49)

Die Performance eines Turbulenzmodells lässt sich am besten durch den Vergleich der Simulationsdaten mit experimentellen Daten ermitteln. Für das Auslaufen einer Flasche erfolgt dies in 5.1. Da dem Autor keine anderweitigen CFD- Studien bekannt sind, die sich speziell mit dem Auslaufen von Flaschen beschäftigen, können nur CFD- Studien herangezogen werden, die möglichst ähnliche Prozesse untersuchen. Taha & Cui (2006, o. S.) untersuchten in ihrer Studie das Aufsteigen einer einzelnen großen Blase in einem zylindrischen Rohr.

Weitere Untersuchungen, in denen das k - ϵ - RNG Modell gute Ergebnisse liefert, stammen von Jensen et al. (2007) und Asteriadou et al. (2009). Jensen et al. (2007, S. 52 ff.) und Asteriadou et al. (2007, S. 948 ff.) analysieren die Reinigungskräfte bei verschiedenen Geschwindigkeiten an der Rohrwand. Besonders bei einer Reynoldszahl von 13 000 bis 17 000 zeigt das k - ϵ - RNG Modell die beste Performance (Asteriadou et al., 2009, S. 954). Auch Chen (1995, S. 353) stellt fest, dass das k - ϵ - RNG Modell eine bessere Performance und stabilere Ergebnisse für aufschlagende Strahlströmungen liefert.

Allerdings hat die Verwendung des k - ϵ - RNG Modells auch Nachteile. Mehdizadeh et al. (2009, S. 61) zufolge liegt der Berechnungsaufwand bei 130 % gegenüber dem k - ϵ - Modell, da eine höhere Anzahl an Iteration nötig ist. Dieser Mehraufwand ist allerdings durch die höhere Genauigkeit insbesondere in Wandnähe gerechtfertigt. Deshalb findet das k - ϵ - RNG Modell für alle Untersuchungen in dieser Arbeit, die das Auslaufen der Flasche betreffen, Anwendung.

4.1.3 Phasentrennung

Beim Prozess des Auslaufens der Flasche sind zwei Phasen, Wasser und Luft, wichtig. Beide Phasen haben unterschiedliche physikalische Eigenschaften, und die Verteilung beider Phasen ist entscheidend für die korrekte Beschreibung des Prozesses. An der Phasengrenze treten prozessrelevante physikalische Phänomene auf, wie z. B. die Oberflächenspannung, s. 3.2.1. Die Grenze zwischen beiden Phasen wird als *freie Oberfläche* bezeichnet, da sie sich im Raum frei bewegen kann, im Gegensatz zu einer *festen Oberfläche*, wie die der Flaschenwand, die ortsgebunden ist. Die Lage der freien Oberfläche ist nur für den Beginn der Simulation bekannt. Ihre Bestimmung ist Bestandteil der Simulation.

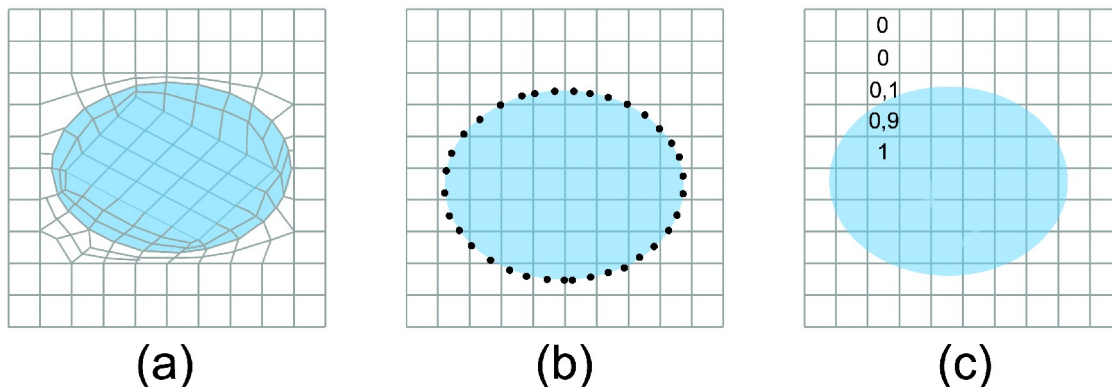


Abbildung 33: Methoden zur Phasentrennung: (a) Interfaceverfolgungsmethode, (b) Interfaceerfassungsmethode mit Partikeln, (c) Interfaceerfassungsmethode durch Füllmenge der Zelle (Abb. nach Rusche (2002, S. 39))

Um den Verlauf der Phasengrenze bestimmen zu können sind verschiedene Methoden entwickelt worden. Ferziger & Peric (2008, S. 462 ff.) unterscheiden zwischen drei grundsätzlichen Methodenarten, der (A) *Interfaceverfolgungs-*, (B) *Interfaceerfassungsmethode* und (C) *Hybridmethoden*. Die (A) *Interfaceverfolgungsmethoden* beschreiben die Bewegung der Phasengrenze durch die Veränderung des Rechengitters (Abb. 33a). Jede Gitterzelle des Rechengitters ist hierbei fest einer und nur dieser einen Phase zugeordnet. Wenn sich die Lage der freien Oberfläche ändert, muss das verwendete Gitter entsprechend der geänderten freien Oberfläche angepasst werden. Die (B) *Interfaceerfassungsmethode*, die im Folgenden genauer beschrieben wird, nutzt hingegen über die gesamte Zeit das gleiche Gitter. Sie verfolgt den Verlauf der Phasengrenze durch *Marker* (Abb. 33b), die den Verlauf der Oberfläche festlegen, oder skalare Werte (Abb. 33c), die die anteilige Füllung der Zelle mit dem jeweiligen Fluid beschreiben. Die (C) *Hybridmethoden* nutzen Elemente beider Methoden, s. Ferziger & Peric (2008, S. 472 f.). Für diese Arbeit sind nur die *Interfaceerfassungsmethoden* von Bedeutung. In dem entwickelten Modell wird die VOF (*Volume of Fluid Method*) verwendet, welche im Weiteren genauer beschrieben wird. Alternativ wäre auch die Verwendung der *Level- Set- Methode* (LS) oder eine Kombination von LS und VOF möglich, wie von Sussman & Puckett (2000, S. 301 ff.) vorgeschlagen. Die *Level- Set- Methode* ist eine Funktion, deren Wert die kürzeste Distanz zwischen dem Punkt und der Phasengrenze angibt (Sussman et al., 1994, S. 10 f.); an der Phasengrenze ist der Wert genau 0 und die Phasen werden durch unterschiedliche Vorzeichen unterschieden (Ubbink, 1997). Zwar ist die LS bei Phasentrennung oder Vermischung aufgrund der Erhaltung einer scharfen Phasengrenze gut geeignet. Bei stark vermischten Phasen zeigen sich jedoch Probleme, was die Massenerhaltung und die Genauigkeit angeht (Pianet et al., 2010, S. 273). Beim Auslaufen der Flasche treten zum Teil starke Vermischungen der Phasen auf, wenn z. B. aufsteigende Blasen auseinander brechen oder starke Rezirkulationen entstehen. Die derzeitig geeignetste Methode für den untersuchten Prozess ist die VOF Methode, da sie einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Berechnungsaufwand liefert. Diese Meinung wird auch von Hain et al. (2009, o. S.), Taha & Cui (2006, S. 676 ff.) und Ratkovich et al. (2009, S. 3576) geteilt, die für ähnliche Untersuchungen das gleiche Phasentrennungsmodell nutzen.

Die VOF geht auf Hirt & Nichols (1981) zurück und basiert auf der Annahme, dass sich die Verteilung der Flüssigkeit im Strömungsgebiet durch einen skalaren Wert beschreiben lässt. Dieser Wert wird als Volumenfraktionswert bezeichnet und wird als α oder γ ausgedrückt. α kann Werte zwischen 0 und 1 annehmen; 1 bedeutet, dass die gesamte Zelle mit Phase 1, Wasser, gefüllt ist. Bei 0 sind keine Anteile der Phase 1 in der Zelle zu finden. Werte zwischen 1 und 0 geben dementsprechend die anteilige Füllung der Zelle wider. Da Phase 2, Luft, immer $(1-\alpha)$ ist, ergibt sich durch α auch die Füllmenge jeder Zelle für Phase 2, ohne dass deren Transport gesondert berechnet werden muss. Der Transport von α erfolgt mittels einer Transportgleichung, Gl. 50. Die Gleichung wird zusammen mit der Massenerhaltungsgleichung, Gl. 51, und Impulserhaltungsgleichung, Gl. 52, gelöst (Berberović et al., 2009, S. 4).

VOF- Modell: (Berberović et al., 2009, S. 4)	
$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (U \alpha) = 0$	(50)
$\nabla U = 0$	(51)
$\frac{\partial (\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = -\nabla p + \nabla \cdot T + \rho f_b$	(52)
$T = 2\mu S - 2\mu (\nabla \cdot U) \frac{I}{3}$	(53)

Den physikalischen Eigenschaften Viskosität und Dichte wird in der Impulserhaltungsgleichung, Gl. 52, Rechnung getragen. Die Gravitation und die Oberflächenspannung werden über einen einfachen Quellterm f_b berücksichtigt, der sich aus der Schwerkraft f_b und der Oberflächenspannung f_σ zusammen setzt. Für die Berechnung von f_σ wird das *Continuum- Surface- Model (CFS)* von Brackbill et al. (1992) genutzt, welches aus der mittleren Krümmung der Oberfläche κ und der Oberflächenspannung σ die wirkende Kraft berechnet (Berberović et al., 2009, S. 5).

$f_b = f_g + f_\sigma$	(54)
$f_\sigma = \sigma \kappa \nabla \alpha$ (Berberović et al., 2009, S. 5)	(55)

$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{ \nabla \alpha } \right) \quad (\text{Berberović et al., 2009, S. 5})$	(56)
--	------

Die Viskosität (μ) und Dichte (ρ) der Fluide werden über den deviatorischen viskosen Spannungstensor (T) in die Gleichung eingeführt und linear mit Gl. 57 und 58 zwischen den beiden Fluiden approximiert. Dies ist nötig, da sowohl das Druckfeld (p) als auch das Geschwindigkeitsfeld (U) für beide Fluide gemeinsam berechnet wird.

$\rho = \rho_1 \alpha + \rho_2 (1 - \alpha) \quad (\text{Berberović et al., 2009, S. 4})$	(57)
---	------

$\mu = \mu_1 \alpha + \mu_2 (1 - \alpha) \quad (\text{Berberović et al., 2009, S. 4})$	(58)
--	------

Ein Problem der VOF ist, dass ein skalarer Wert nur unzureichende Informationen über den genauen Verlauf der Oberfläche geben kann. Der α -Wert gibt an, zu welchem Anteil die einzelne Gitterzelle mit dem jeweiligen Fluid gefüllt ist, aber nicht, wie die Phasen verteilt sind. Deutlich wird diese Problematik in Abb. 106, die verschiedene Methoden zeigt, die dazu dienen, einen möglichst genauen Phasenverlauf zu beschreiben. In Abb. 106 steht der in den Zellen angegebene Wert für den jeweiligen α -Wert, und in blau ist die Verteilung der Phase 1, z. B. Wasser, dargestellt. Abb. 106a zeigt den tatsächlichen Verlauf der Phasengrenze. Die Abb. 106b-e zeigen hingegen verschiedene Varianten, mit denen der Verlauf abgeschätzt werden kann. Die genaue Entwicklung dieser Techniken ist in Ubbink (1997, S. 9 ff.) dargestellt.

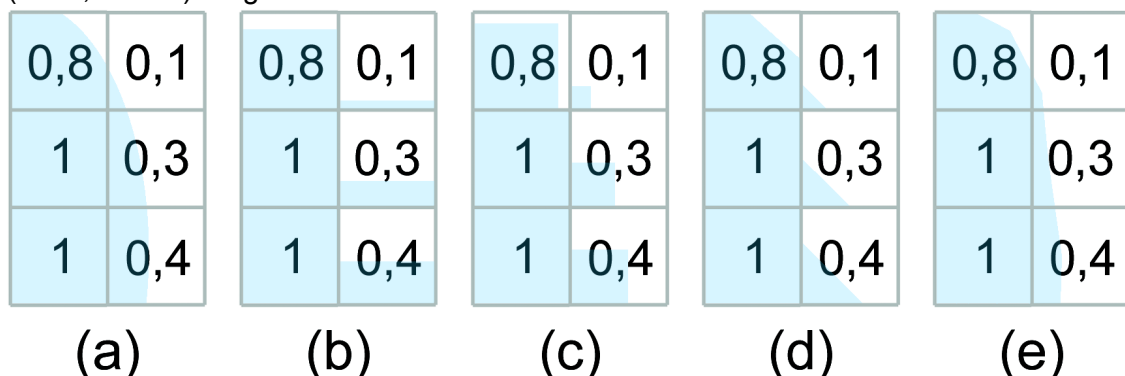


Abbildung 34: Methoden zum Phasengrenzenverlauf: (a) Tatsächlicher Verlauf der Phasengrenze, (b) Verlaufsbestimmung nach Noh & Woodward (1976), (c) Verlaufsbestimmung nach Chorin (1980), (d) Verlaufsbestimmung nach Lotstedt (1982) und Youngs (1982) und (e) Verlaufsbestimmung Ashgriz & Poo (1991) (Abb. nach Ubbink (1997, S. 10))

Wichtiger als die genaue Beschreibung des Phasenverlaufs ist aber die Sicherstellung, dass der Transport der Phasen zwischen den Zellen korrekt abgebildet wird. Besondere Probleme bereitet diesbezüglich die Wahl eines geeigneten Approximationsschemas, das weder gebunden oder zu diffusiv ist noch unphysikalisches Verhalten zeigt (Ubbink, 1997, S. 28 ff.). Gebunden bedeutet in diesem Zusammenhang, dass eine Zelle für α nur Werte zwischen 0 und 1 (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 143 f.) annehmen kann und der Wert nicht höher wird als der in der Nachbarzelle, wenn keine zusätzliche Quelle vorhanden ist (Ubbink, 1997, S. 29). Eine genaue Diskussion der Eigenschaften von Approximationsschemen erfolgt in 4.1.5.3. Ein sehr diffuses Approximationsschema hat eine starke Verschmierung der Phasengrenze zur Folge. In Abb. 35 ist eine sehr gute Auflösung der Phasengrenze zu erkennen. Der graue Bereich, welcher das Gebiet darstellt, in dem eine Zelle nicht klar einem Gebiet zugeordnet werden kann, erstreckt sich nur über zwei Gitterzellen. Bei einem diffusen Approximationsschema würde sich dieses Gebiet deutlich vergrößern. Allerdings ist keine Pauschalierung auf eine bestimmte Zellzahl möglich, da das Volumen der einzelnen Zelle immer mit berücksichtigt werden muss. Grundsätzlich gilt: Je feiner das Gitter, desto besser ist die Auflösung der Phasengrenze.

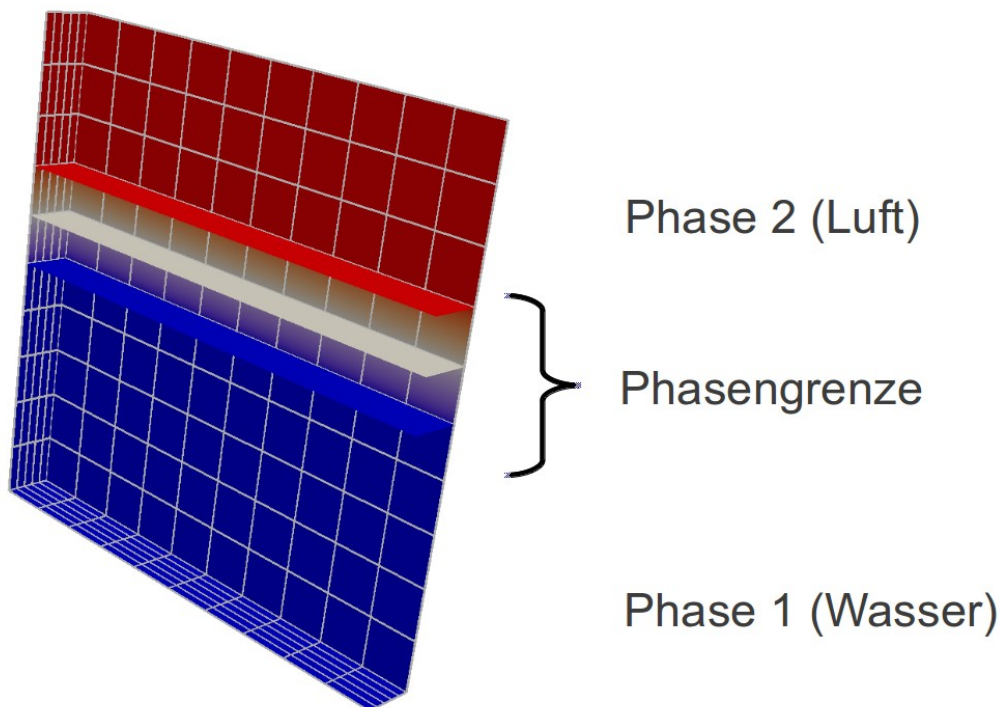


Abbildung 35: Verschmierung der Phasengrenze

Die Bestimmung einer eindeutigen Phasengrenze ist wichtig, um physikalisch korrekte Ergebnisse zu gewährleisten, da an der Phasengrenze zusätzliche physikalische Phänomene, wie z. B. Oberflächenspannungen, auftreten. Vor allem die Verhinderung von zu starker Diffusion durch die Approximation ist hier entscheidend. In der Arbeit wird eine Methode verwendet, die der von Rusche (2002, S. 99 ff.) sehr ähnlich ist (Berberović et al., 2009, S. 5 f.) und zusätzliche Vorteile bietet. Das Modell, welches von OpenFOAM (4.2.2) weiterentwickelt worden ist, verändert die ursprüngliche Transportgleichung, Gl. 59, für α um einen Term, $(\nabla \cdot [(U_I - U_g)\alpha(1-\alpha)])$.

Ursprüngliche Transportgleichung:	
$\frac{\delta \alpha}{\delta t} + \nabla \cdot (U \alpha) = 0 \quad (\text{Berberović et al., 2009, S. 4})$	(59)
Veränderte Variante:	
$\frac{\delta \alpha}{\delta t} + \nabla \cdot (U \alpha) + \nabla \cdot [(U_I - U_g)\alpha(1-\alpha)] = 0$ (Berberović et al., 2009, S. 5)	(60)

Der zusätzliche Term ist aus der Idee heraus entstanden, dass sich sowohl das Geschwindigkeitsfeld U als auch die Summe der Geschwindigkeitsfelder der Phase 1, U_I , und der Phase 2, U_g , darstellen ließe (Gl. 61). Die geänderte Transportgleichung, Gl. 60, ist somit nur die Summe aus Gl. 61 und 62, den Transportgleichungen für die jeweiligen Phasenanteile.

$U = \alpha U_I + (1-\alpha) U_g \quad (\text{Berberović et al., 2009, S. 5})$	(61)
$\frac{\delta \alpha}{\delta t} + \nabla \cdot (U_I \alpha) = 0 \quad (\text{Berberović et al., 2009, S. 5})$	(62)
$\frac{\delta (1-\alpha)}{\delta t} + \nabla \cdot [U_g (1-\alpha)] = 0 \quad (\text{Berberović et al., 2009, S. 5})$	(63)

Diese scheinbar unbedeutende Änderung hat zur Folge, dass ein zusätzlicher konvektiver Term in den Gleichungen auftaucht, der die Verschmierung der Phasengrenze vermindert (Berberović et al., 2009, S. 5). Weitere Informationen zu dieser Technik sind bei Rusche (2002) und Berberović et al. (2009) zu finden.

4.1.4 Diskretisierung

Die meisten der Gleichungen, die bei einer CFD- Simulation verwendet werden, sind partielle Differentialgleichungen (PDE), die nur in speziellen Fällen analytisch gelöst werden können und für deren Lösung sich in der Praxis numerische Methoden etabliert haben (Paschedag, 2004, S. 119). Die numerische Lösung der Gleichung erfolgt durch die Herleitung algebraischer Näherungsgleichungen, die für diskrete Orte im Gebiet eine Näherung der PDEs liefert (Paschedag, 2004, S. 119). Die Überführung der zugrundeliegenden Differenzialgleichungen in eine diskontinuierliche, oder diskrete Beschreibungsweise, die mit einem Digitalrechner lösbar ist, wird als Diskretisierung bezeichnet (Laurien & Oertel, 2009, S. 59). Des Weiteren wird auch die räumliche und zeitliche Festlegung der Orte und Zeitpunkte als Diskretisierung bezeichnet.

Zur Diskretisierung der Gleichungen und des Gebiets sind verschiedene Methoden entwickelt worden. Die bedeutendsten sind die *Finite- Differenzen- Methode* (FDM), die *Finite- Volumen- Methode* (FVM) und die *Finite- Elemente- Methode* (FEM). Weitere Methoden sind die *Monte- Carlo- Methode* und die *Lattice- Boltzmann- Methode* (LBM). Die Methoden sind in Rubinstein & Kroese (2008), Geller et al. (2006) und Peiró & Sherwin (2005) beschrieben. Da einzelne Methoden zum Teil sehr weitreichende Anforderungen an die Raumdiskretisierung stellen, muss bei der Wahl der Methode im Besonderen die Geometrie des zu untersuchenden Raums beachtet werden.

Methode	Flexibilität	Genauigkeit
FDM	relativ unflexibel, da Transformation in den Rechenraum erforderlich	gut
FVM	flexibel, da in physikalischem Raum formuliert	Genauigkeitsverlust durch numerische Vereinfachungen
FEM	sehr flexibel durch unstrukturierte Netze	Genauigkeitsverlust durch ungleichmäßige Netze

Tabelle 3: Vergleich von numerischen Lösungsmethoden (nach Laurien & Oertel (2009, S. 13))

Aufgrund der zum Teil komplexen Geometrie von einzelnen Flaschen wird in den Simulationen FVM genutzt. Diese Methode ist flexibel und orientiert sich an den physikalischen Abläufen; hierzu mehr in 4.1.4.1.

4.1.4.1 Finite- Volumen- Methode

Bei der *Finite- Volumen- Methode* wird das Lösungsgebiet in eine finite Anzahl von nicht überlappenden Kontrollvolumina (KV) geteilt und die Erhaltungsgleichungen werden auf jedes einzelne KV (Abb. 36) angewendet (Ferziger & Peric, 2008, S. 42 f). Die beliebige Anordnung der Gitterzellen erlaubt so auch die exakte Abbildung von komplexen Strömungen (Martin, 2011, S. 141). Die Methode ist zudem konservativ, solange die Oberflächenintegrale für benachbarte Zellen einheitlich berechnet werden (Ferziger & Peric, 2008, S. 42 f). Zudem ist die Methode besonders attraktiv, da die Diskretisierung eindeutig den physikalischen Gegebenheiten entspricht (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 116 f.).

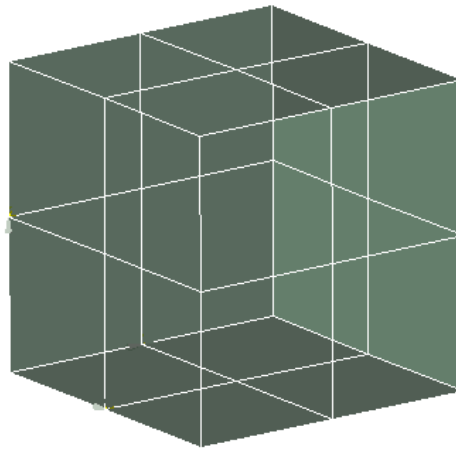


Abbildung 36: Kontrollvolumen

Die einzelnen Variablenwerte der KVs werden für einen zentralen Punkt, in der Regel der Schwerpunkt des KVs, berechnet. Die Genauigkeit kann durch die Verwendung eines gleichmäßigen Gitters erhöht werden, da die Zellgrenze dadurch genau in der Mitte zwischen den benachbarten KVs liegt und so die Fehlerordnung bei Verwendung der Zentraldifferenz- Approximation auf die 2. Ordnung sinkt (Ferziger & Peric, 2008, S. 83). Die Berechnung erfolgt aus den KV- Werten der Nachbarzellen unter Berücksichtigung der Volumen und Grenzflächen (Ferziger & Peric, 2008, S. 42 f). Die im Einzelnen zur Berechnung verwendeten Schemata sind in 4.1.5.3 dargestellt. Im Ergebnis führen die Maßnahmen dazu, dass für jedes KV und jede transponierte Größe ein algebraisches Gleichungssystem vorliegt. Diese Gleichungen lassen sich in einer Matrix zusammenfassen, die das gesamte Rechengebiet beschreibt und deren Anzahl von Unbekannten der Anzahl an KVs entspricht (Ferziger & Peric, 2008, S. 96).

4.1.4.2 Zeitdiskretisierung

Die Zeitdiskretisierung unterscheidet sich insoweit von der räumlichen Diskretisierung, dass die Informationsausbreitung in Zeit und Raum unterschiedlich ist; Informationen können sich im Raum in alle Richtungen ausbreiten, während bei der Zeit nur eine Informationsausbreitung nach vorne möglich ist (Laurien & Oertel, 2009, S. 63). Dieser Tatsache wird in den Simulationen durch die Verwendung eines impliziten Eulerverfahrens, welches 1. Fehlerordnung hat und gebunden ist, Rechnung getragen (Rusche, 2002, S. 89 f.). Das Problem dieser Methode ist, dass sich die Zeitschrittweite, δt , proportional zu dem entstehenden Fehler verhält, da das verwendete Verfahren auf Vorwärtsdifferenz- Approximation beruht (Laurien & Oertel, 2009, S. 65). Je kleiner der Zeitschritt, desto genauer ist das Ergebnis. Jeder zusätzliche Zeitschritt erhöht jedoch den Berechnungsaufwand, da zu jedem Zeitschritt das gesamte Gleichungssystem gelöst werden muss, s. 4.1.5.1.

In der Simulation wird die *Courant- Friedrich- Levy- Bedingung*, deren Wert als Courant Zahl (Co) bezeichnet wird, genutzt, um dieses Problem zu lösen. Die Co ist zwar in erster Linie wichtig, damit die Simulation stabil bleibt, s. 4.1.5. Sie beschränkt aber auch effektiv die Zeitschrittweite. In den durchgeführten Simulationen wird auf die Vorgabe einer festen Zeitschrittweite, δt , verzichtet. Die Zeitschrittweite errechnet sich aus der Gitterweite, δx , und den auftretenden Geschwindigkeiten U . Je größer die auftretende Geschwindigkeit wird, desto kleiner wird der berechnete Zeitschritt. Die Co wird in den Simulationen auf 0,5 beschränkt. Somit können sich die Fluide von einem zum anderen Zeitschritt maximal durch eine halbe Zelle bewegen und das Überspringen von Zellen wird verhindert. Rusche (2002, S. 161) schlägt diesen Erfahrungswert vor, da sich gute Ergebnisse mit diesem Wert erreichen ließen.

$Co=0,5 > \frac{\delta t U }{\delta x}$	(64)
--	------

Für die Phasengrenze wird diese Bedingung nochmals verschärft, um einem Verschmieren der Phasengrenze entgegenzuwirken, s. 4.1.3.

$Co_P=0,4 > \frac{\delta t U_P }{\delta x}$	(65)
--	------

4.1.4.3 Räumliche Diskretisierung

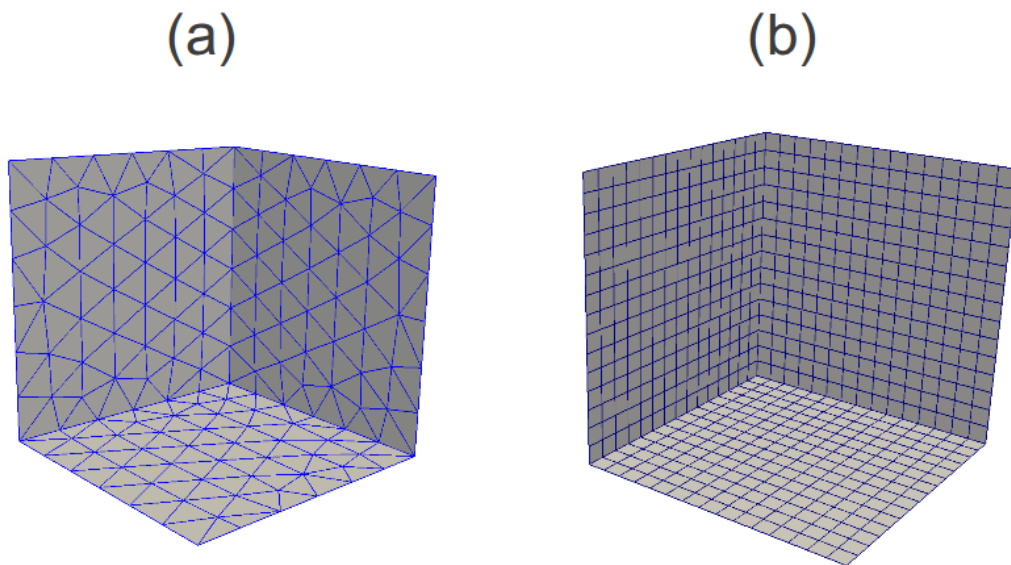


Abbildung 37: a) Tetra- und b) Hexaedergitter

Die numerische Lösung von partiellen Differentialgleichungen erfordert die Aufteilung des Strömungsraums in eine finite Anzahl von Punkten oder Volumen, die eindeutig identifizierbar, nicht überlappend und raumfüllend sind (Thompson et al., 1985, S. 1). Die in den Simulationen verwendete FVM (4.1.4.1) basiert auf Volumen. Folglich muss das gesamte Strömungsgebiet durch eine finite Anzahl von Volumen beschrieben werden. Theoretisch kann jede mögliche Volumenform, wie z. B. ein Kegel oder eine Pyramide, verwendet werden. Häufig genutzte Formen sind Tetraeder und Hexaeder, da mit ihnen ein kompletter Formschluss einfacher zu realisieren und die Anzahl an benachbarten Zellen überschaubar ist. In Abb. 37 sind beide Varianten abgebildet.

Die Gittergenerierung kann entweder durch manuelle Festlegung der Gitterpunkte oder automatisierte Programme erfolgen. Die manuelle Gitterkonstruktion ist nur für sehr einfache Geometrien effizient. Die verschiedenen Programme haben verschiedenen Algorithmen implementiert, wie z. B. die *advancing Front Method*, welche für Tetraedergitter genutzt wird, um Gitter automatisch generieren zu können (Cebeci et al., 2005, S. 292). Weitere Informationen hierzu sind in Thompson et al. (1985) und Thompson et al. (1999) zu finden.

Für die durchgeführten Studien werden nach Möglichkeit Hexaedergitter verwendet, da diese orthogonal sind. Orthogonale Gitter produzieren weniger zusätzliche Terme bei der Diskretisierung der Gleichung, wodurch sich der Berechnungsaufwand (Thompson et al., 1985, S. 331) reduziert. Zusätzlich ist die Genauigkeit bei der Gleichungsdiskretisierung bei orthogonalen Gittern am höchsten. Die Erzeugung eines komplett orthogonalen Gitters lässt sich jedoch für komplexe Geometrie meist nur sehr schwer oder gar nicht realisieren (Thompson et al., 1999, o. S., K. 7-1). Die Orthogonalität des Gitters in den Ecken der Zellen ist unwichtig; nur die Winkel zwischen den Vektoren, die das Zellzentrum mit dem der benachbarten Zelle verbinden, und die zugehörige Zellwand sind entscheidend (Ferziger & Peric, 2008, S. 412). Die runde Form der Flasche macht ein reines Hexaedergitter fast unmöglich. Daher werden in den Simulationen *hexadominante* Gitter verwendet, welche in der Mehrzahl aus Hexaedern bestehen und nach Bedarf mit Polyedern ergänzt werden, um die Geometrie abbilden zu können. Die Folge sind zum Teil nicht orthogonal angeordnete Zellen. Jasak (1996, S. 207 ff.) beschreibt das Problem, welches aus den nicht orthogonal angeordneten Zellen entsteht, und löst es, indem er den Fluss zwischen zwei Zellen in einen orthogonalen und einen nicht orthogonalen Anteil aufspaltet, s. Gl. 66. Der nicht- orthogonale Anteil wird in zusätzlichen Iterationsschleifen gelöst, welche allerdings den Berechnungsaufwand steigern (Silva et al., 2008, S. 2937).

$\underbrace{\mathcal{S}(\nabla \phi)_f}_{\text{Gesamter Volumenfluss}} = \underbrace{\mathcal{O}(\nabla \phi)_f}_{\text{Orthogonaler Anteil}} + \underbrace{\mathcal{NO}(\nabla \phi)_f}_{\text{Nicht orthogonaler Anteil}}$ (Silva et al., 2008, S. 2937)	(66)
--	------

Zur Erzeugung eines hexaederdominanten Gitters wird in dieser Arbeit das *open-source* Tool *snappHexMesh* genutzt, welches Bestandteil von OpenFOAM (4.2.2) ist. In Abb. 38 ist der Ablauf des Gittergenerierungsprozesses dargestellt. Aus einem reinen Hexaedergitter (Abb. 38a) wird durch Ausschneiden der Geometrie (Abb. 38b) ein Rechengitter (Abb. 38c) gebildet. Zusätzlich wird die Oberfläche durch zusätzliche Gitterschichten feiner aufgelöst. Eine genaue Beschreibung des Prozesses ist im Anhang **B** der Arbeit zu finden.

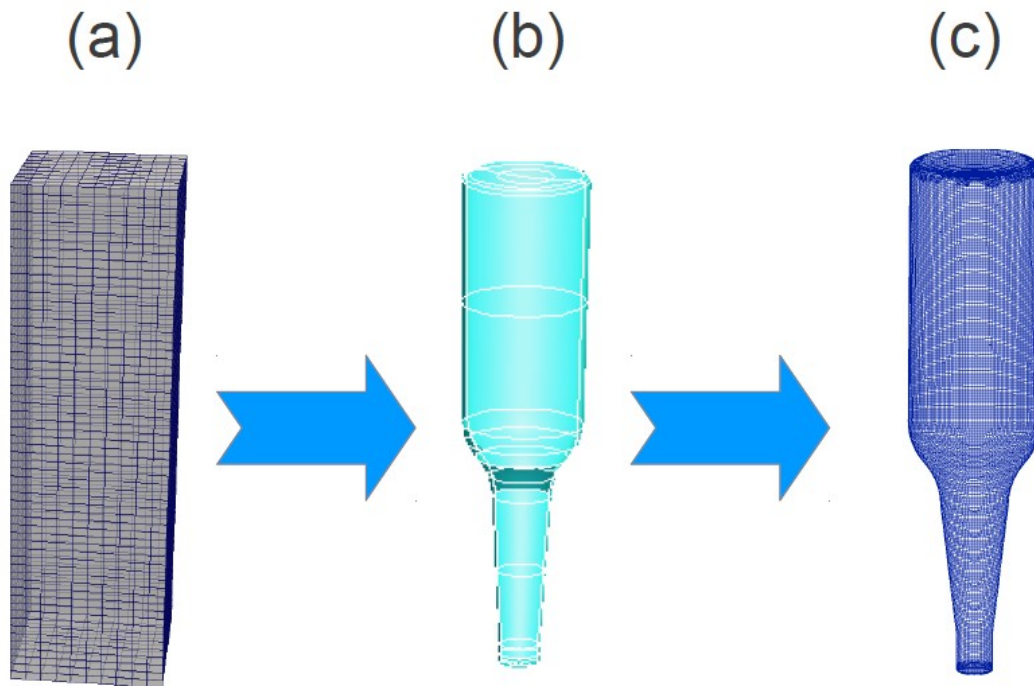


Abbildung 38: Ablauf der Gittergenerierung: a) Grundgitter, b) CAD- Daten und c) Rechengitter

Die mit *snappHexMesh* erzeugten Gitter weisen einen gut strukturierten Aufbau auf; sie lösen zum einen die Wandschicht gut auf und stellen zum anderen sicher, dass ein Großteil der Zellen durch orthogonal ausgerichtete Hexaeder gebildet wird (Wackers et al., 2012, S. 2). In Abb. 39c ist der Querschnitt durch ein typisches verwendetes Gitter zu sehen. Im Wand- und Halsbereich wird ein stark verfeinertes Gitter verwendet, während die Mitte des Strömungsraums durch ein gröberes komplett orthogonales Gitter abgebildet wird. In der Abb. 39a ist die komplette Oberfläche des Gitters dargestellt, und in Abb. 39b steht die Art der einzelnen Gitterzellen im Fokus; die blauen Zellen sind Hexaeder und die roten Zellen Polyeder. Der automatisierte Gittergenerierungsprozess wird durch die Vorgabe von Regeln gesteuert. Hierzu zählen maximale Anzahl, maximales Volumen, maximale „Nicht- Orthogonalität“ und minimales Volumen der Zellen. Zusätzlich können die Anzahl und die Dicke der Wandschicht sowie Regionen, die besonders fein aufgelöst werden sollen, vorgegeben werden.

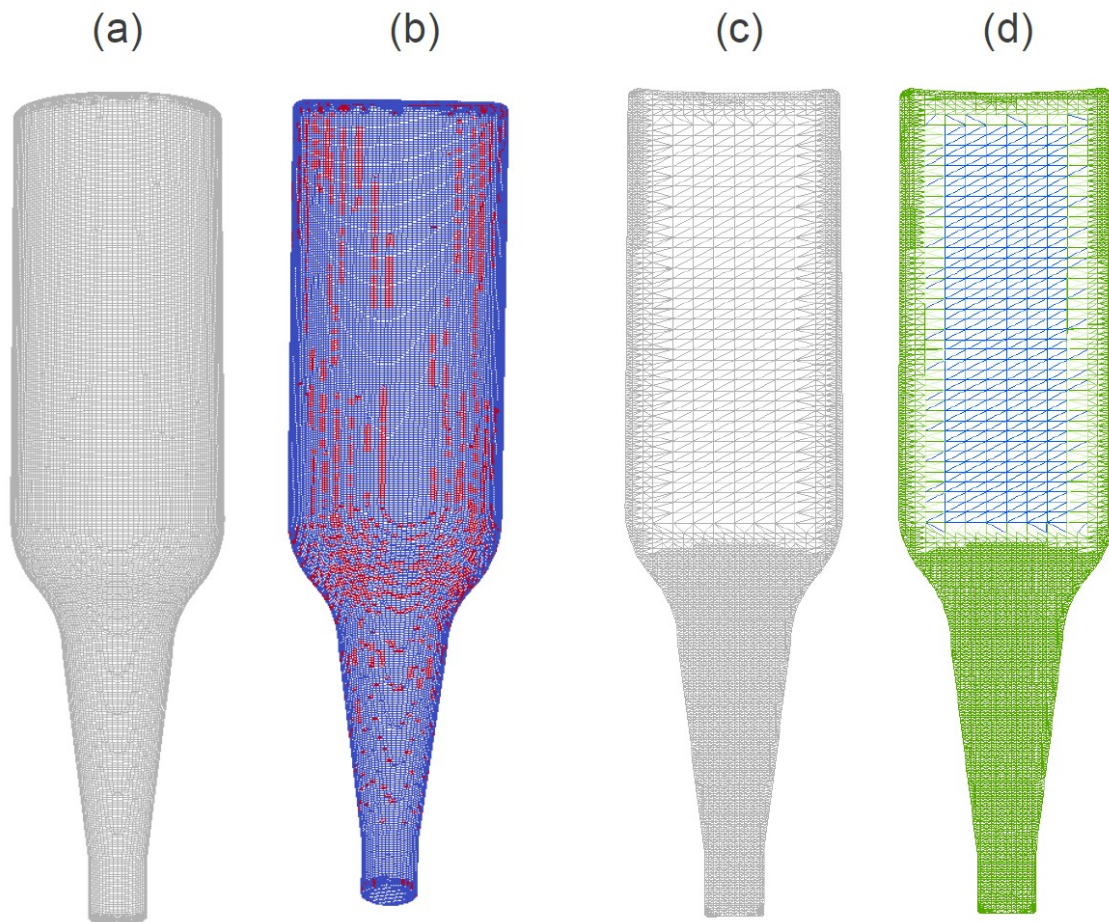


Abbildung 39: Ablauf der Gittergenerierung: a) Rechengitter, b) Kontrolle der Gitterzellen (blau Hexaeder und rot Polyeder), c) Querschnitt und d) Volumen der Zellen (grün $<10^{-9} \text{ m}^3$ und blau $>10^{-9} \text{ m}^3$)

Die Erzeugung eines geeigneten Gitters ist jedoch nicht nur von der Geometrie des Strömungsraums abhängig, sondern muss auch an die Strömung selbst und die verwendeten Modelle angepasst sein. An der Wand und in Rezirkulationszonen ist oft eine feinere Auflösung des Gitters notwendig. Um derartige Zonen identifizieren zu können, sind verschiedene Kennzahlen entwickelt worden. Eine wichtige Größe ist der y^+ Wert, welcher beschreibt, ob die Gitterzelle in der laminaren Unterschicht ($y^+ \leq 11,63$) oder im turbulenten Bereich der Strömung liegt (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 275). Je nach verwendetem Turbulenzmodell werden wichtige wandnahe Effekte nicht aufgelöst, sondern durch Wandfunktionen (4.1.5.2) abgebildet.

Ein wichtiges Ziel bei der Gestaltung des Gitters ist die Größe, da davon direkt der Berechnungsaufwand abhängt. Wenn der zu untersuchende Prozess aber zu komplex ist, um in akzeptabler Zeit auf einen Prozessor berechnet zu werden, muss die Berechnung über mehrere Prozessoren verteilt werden. Die Berechnung wird parallelisiert. Thompson et al. (1999, o. S., K. 12-17) nennen hierfür drei theoretische Möglichkeiten, die Parallelisierung der Ausführungsbefehle, des numerischen Lösungsprozesses und des Strömungsraums. Praktische Anwendung findet nur die Aufteilung des Strömungsraums, da die beiden anderen Varianten entweder nicht stabil oder nicht effizient parallelisierbar sind; besonders die Skalierbarkeit über viele hundert oder tausend Prozessoren stellt ein Problem dar (Thompson et al., 1999, o. S., K. 12-17). Der Strömungsraum oder genauer das Gitter, welches den Strömungsraum abbildet, wird hierbei aufgeteilt, s. Abb. 40, und die in 4.1.5 vorgestellten Lösungsverfahren werden nur auf das jeweilige Teilgebiet angewendet. Zwar reduziert sich die Gesamtanzahl der Zellen nicht, aber die Lösung kann auf viele Prozessoren verteilt werden. Die Lösung des gesamten Gebiets wird anschließend durch das Zusammenfügen der Teillösungen vorgenommen. Die Kommunikation der verschiedenen Teilgebiete erfolgt durch Randbedingungen, die an den Bruchkanten der Teilstücke eingefügt werden. Die eingefügten Randbedingungen nehmen jeweils den Wert des entsprechenden Anschlussgebietes an. Da dies zur Folge hat, dass jedes einzelne Gebiet gelöst sein muss, bevor der nächste Zeitschritt gelöst werden kann, hat die geschickte Aufteilung des Gebiets eine große Bedeutung für die Effizienz der Berechnung.

In den durchgeführten Studien wird hierfür das *Scotch*-Verfahren genutzt. Dieses erlaubt, das Gebiet ausgehend von der Leistungsfähigkeit der Prozessoren zu zerlegen. Leistungsstarken Prozessoren werden mehr Gitterzellen zugeordnet als leistungsschwachen. Zusätzlich stellt das Verfahren sicher, dass sowohl die Anzahl der Zellen im Randgebiet als auch die Anzahl der Teilgebiete, die über Randbedingungen kommunizieren müssen, so gering wie möglich sind. Eine Beschreibung und ein Performancevergleich zu anderen verfügbaren Verfahren, wie z. B. *metis*, ist in Turka et al. (2012, o. S.) zu finden.

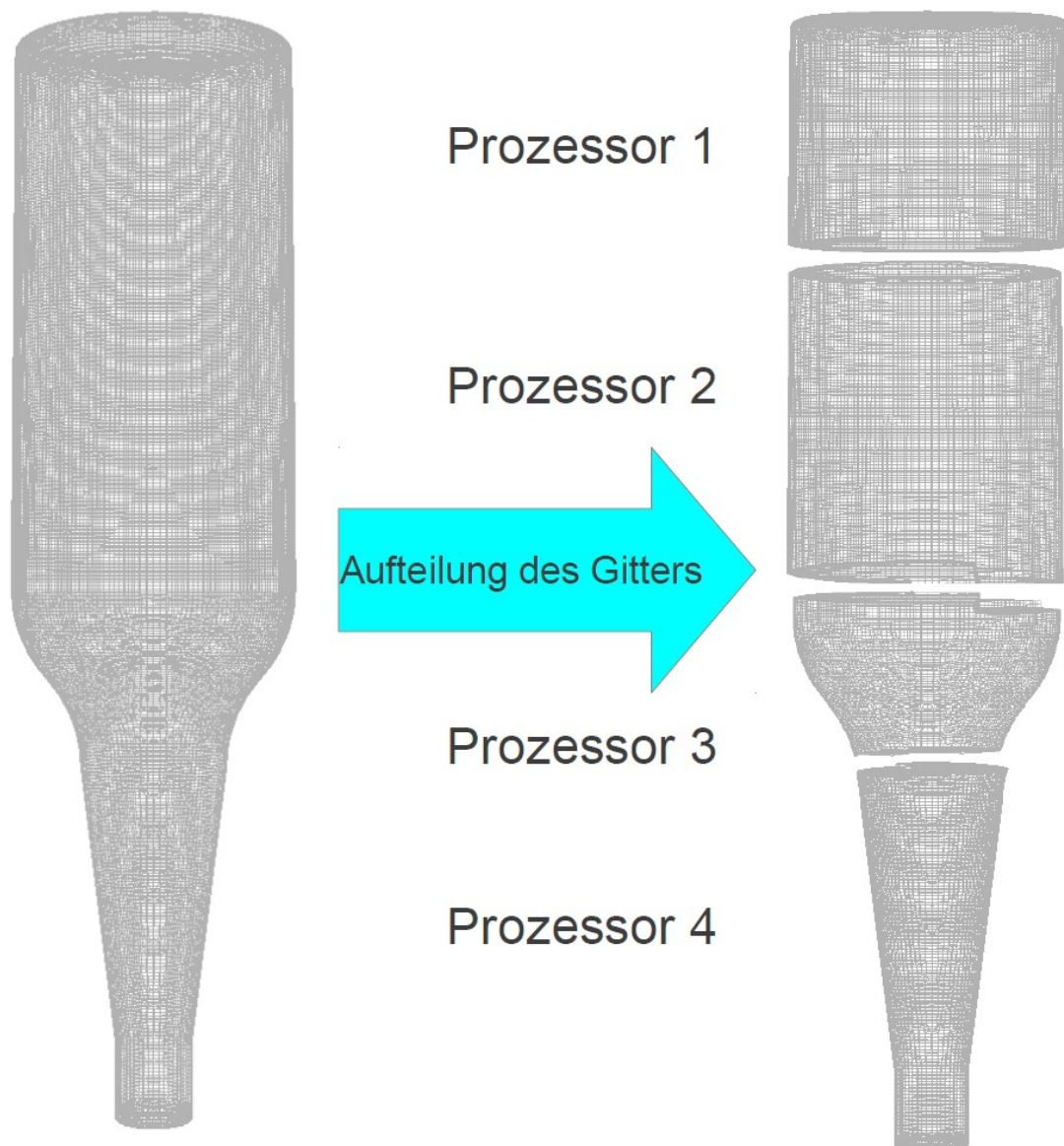


Abbildung 40: Parallelisierung des Rechengitters

4.1.5 Lösung der Gleichungen

Die Diskretisierung der Gleichung führt zu einem Gleichungssystem, für dessen Lösung zwei Arten von Verfahren zur Verfügung stehen, nämlich direkte und iterative Methoden (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 212 f). Direkte Verfahren führen nach endlich vielen Rechenschritten (bis auf Rundungsfehler) zur exakten Lösung des Gleichungssystems; das bekannteste Verfahren ist das Gaußsche Eliminationsverfahren. Da das entstehende Gleichungssystem aber nicht linear ist, werden iterative Methoden zur Lösung benötigt (Ferziger & Peric, 2008, S. 37).

Iterative Methoden lösen das Gleichungssystem nicht im eigentlichen Sinne, sondern nähern sich der Lösung an durch das wiederholte Ausführen eines Rechenverfahrens, basierend auf der vorangegangenen Lösung, s. 4.1.5.3. Bei derartigen Verfahren gilt es einige Kriterien bei der Durchführung zu beachten. Wichtige Voraussetzungen sind, dass das Verfahren stabil ist und konvergiert. Ein Verfahren wird als stabil bezeichnet, wenn es die numerischen Fehler, die im Laufe des numerischen Lösungsprozesses auftreten, nicht anfach (Ferziger & Peric, 2008, S. 38). Konvergenz liegt vor, wenn die Lösung bei unendlich kleinen Gitterabständen zur exakten Lösung der DGL tendiert (Ferziger & Peric, 2008, S. 39). Zusätzlich ist für eine exakte Lösung sowohl eine lokale als auch globale Konservativität wichtig. Dies bedeutet, dass die Erhaltungsgrößen, z. B. Geschwindigkeit oder Masse, die eine Zelle verlassen, denen entsprechen, die in eine Zelle einströmen und somit keine zusätzlichen Quellen und Senken entstehen (Ferziger & Peric, 2008, S. 39). Eine weitere Anforderung, die an die Lösungsschemen gestellt wird, ist die Beschränktheit auf bestimmte Grenzen. So müssen die physikalisch nicht negativen Größen, wie z. B. Turbulenz und Dichte, immer positiv sein (Ferziger & Peric, 2008, S. 39), und der α -Wert (4.1.3), welcher die Phasenverteilung beschreibt, muss immer zwischen 0 und 1 sein.

Peiró & Sherwin (2005, S. 25) beschreiben verschiedene Möglichkeiten und Verfahren, wie einzelne Lösungsschemen (4.1.5.3) auf diese Eigenschaften geprüft werden können. Eine sehr häufig verwendete Stabilitätsbedingung ist die Co- Zahl (4.1.4.2), welche die Ausbreitungsgeschwindigkeit pro berechnetem Zeitschritt ins Verhältnis zur Gitterzellengröße setzt (Laurien & Oertel, 2009, S. 76). Ein Co kleiner als 1 stellt sicher, dass die Simulation stabil bleibt, weil die Eigenwerte der Gleichungsmatrix kleiner als 1 bleiben; dies führt dazu, dass die Schwankungen der Lösungen kleiner werden (Ferziger & Peric, 2008, S. 168 f.).

Dennoch bleibt festzustellen, dass für viele Lösungsmethoden der gekoppelten Gleichungssysteme keine ausreichenden Stabilitätskriterien vorliegen und bei der Lösung der Gleichung Erfahrung und Intuition eine große Rolle spielen (Ferziger & Peric, 2008, S. 39); die Wahl der Zeitschritte (4.1.4.2), das Setzen von Unterrelaxationsparametern (4.1.5.4) oder die Verwendung bestimmter Lösungsschemen (4.1.5.3) muss individuell für das verwendete Modell erfolgen.

4.1.5.1 Ablauf der Lösung

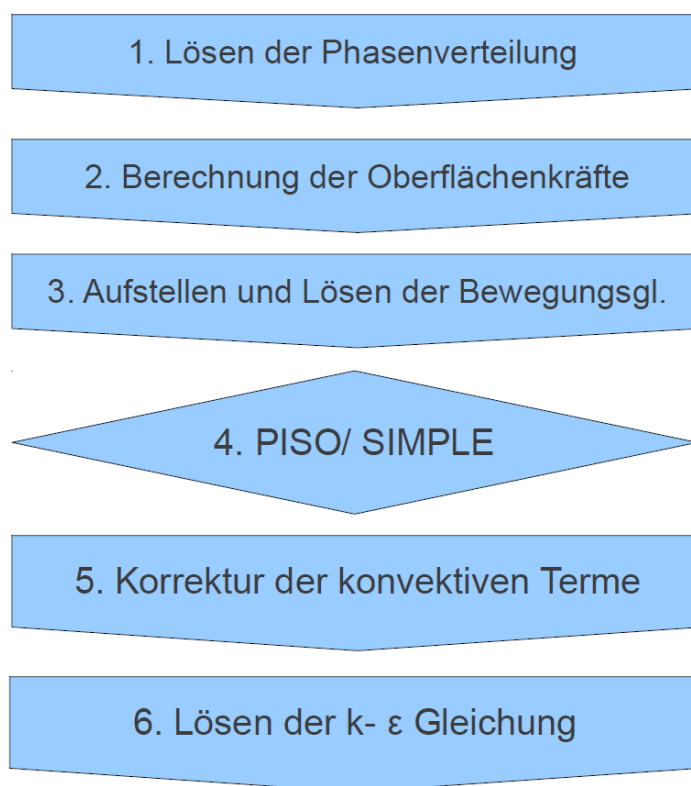


Abbildung 41: Ablauf der Lösung (nach Selma et al. (2010, S. 17))

Bei der Lösung des Gleichungssystems ist die Reihenfolge und die Aufteilung der Lösung von großer Bedeutung, da durch geschicktes Strukturieren der Lösung erhebliche Effizienz- und Genauigkeitsvorteile entstehen. Für die Lösung der gekoppelten Gleichungen existieren eine Vielzahl von Schemen. Das Kernstück der Lösung ist die Lösung der gekoppelten Druck- Geschwindigkeitsgleichung, welche z. B. mit SIMPLE (*semi implicit method for pressure linked equations*) (Patankar, 1981) oder PISO (*pressure implicit splitting of operators*) (Issa, 1985) (Biscarini et al., 2010, S. 708) gelöst werden kann. SIMPLE ist ein Algorithmus zur Lösung von

Gleichungssystemen, die einen stationären Zustand beschreiben. Abb. 42 zeigen den Ablauf des Algorithmus, welcher in Laurien & Oertel (2009, S. 86 ff.) genau beschrieben ist. Das Verfahren ist iterativ und muss sequenziell durchgeführt werden (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 190). Die Ausführung endet durch eine Abbruchbedingung, s. 4.1.5.4, wenn die Kontinuität erreicht ist.

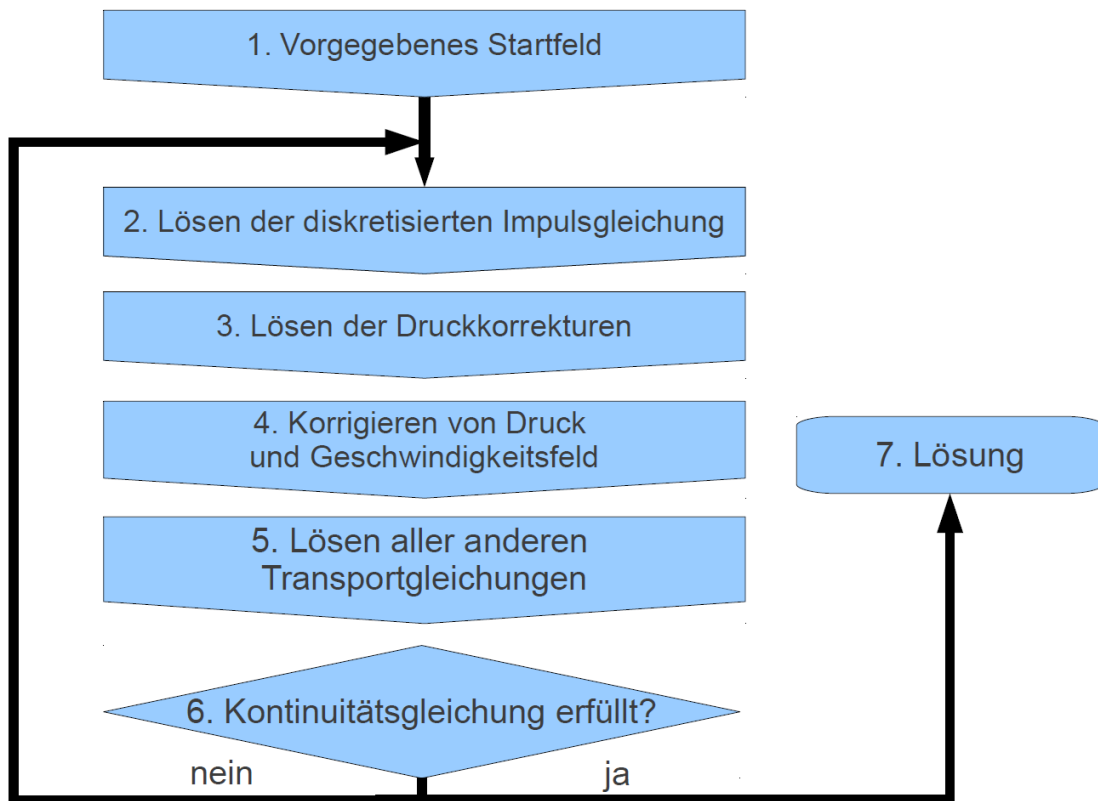


Abbildung 42: Ablauf des SIMPLE- Verfahrens

Das in den Simulationen verwendete PISO, s. Abb. 43, ist auch für transiente Prozesse geeignet (Kim & Benson, 1992, S. 435). Der untersuchte Flaschenentleerungsprozess ist transient, da sich, bedingt durch die begrenzte Füllmenge der Flasche, kein gleichmäßiges Strömungsbild ausbilden kann. Die Methoden, die bei der Simulation beider Prozessarten verwendet werden, sind in vielerlei Hinsicht sehr ähnlich (Barton, 1998, S. 461). Abb. 43 zeigt den Ablauf von PISO, der, obwohl er einen stark iterativen Charakter hat, von einigen, wie z. B. Bressloff (2001, S. 498), als nicht iterativ bezeichnet wird. Die Verfahren haben gemein, dass, ausgehend von einem willkürlichen Startfeld, in einem iterativen Prozess die Lösung gesucht wird. PISO unterscheidet sich hier nur durch eine zusätzliche Korrekturschleife, welche in Abb. 43 grün markiert ist. Die Zahl der Korrekturschleifen kann prozessabhängig festgelegt werden. Für den stationären Fall

erfolgt die Lösung nur für einen Zeitpunkt, beim transienten Prozess für jeden simulierten Zeitpunkt. Aus den simulierten Zeitpunkten wird dann mit der *Daumenkino-Methode* der Gesamtprozess abgebildet. Da im instationären Prozess die Lösung des vorangegangenen Zeitschritts bereits vorliegt und als Ausgangspunkt für die Lösung des neuen Zeitschritts verwendet werden kann, ist die Anzahl der benötigten Iterationen zum Auffinden der Lösung deutlich geringer. PISO ist so um ein Vielfaches schneller für transiente Prozesse als eine rein iterative Methode und bleibt auch bei großen Zeitschritten stabil (Issa et al., 1986, S. 80).

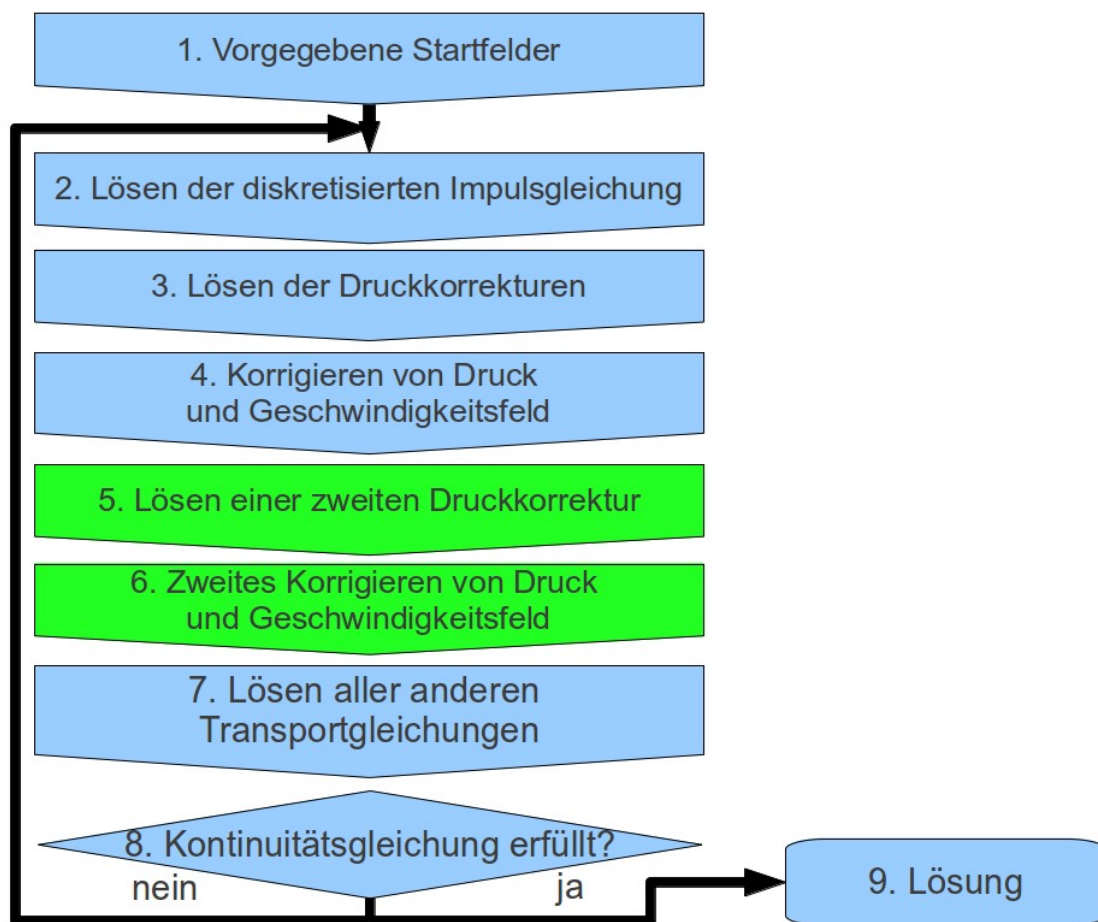


Abbildung 43: Ablauf des PISO- Verfahrens

4.1.5.2 Anfangs- und Randbedingungen

Die verwendeten partiellen Differentialgleichungen können nur unter Verwendung von Randbedingungen gelöst werden (Laurien & Oertel, 2009, S. 49 ff.). Die Randbedingungen beschränken den ursprünglich ungebundenen Lösungsraum der Gleichungen, so dass die Lösung den untersuchten Fall beschreibt (Grote & Kirsch, 2004, S. 3). Zusätzlich zu den Randbedingungen werden bei transienten Prozessen Anfangswerte benötigt, welche den Zustand des gesamten Systems zu Beginn des untersuchten Prozesses beschreiben. Bei stationären Prozessen kann auf Anfangswerte verzichtet werden, da sich die Lösung unabhängig von der Zeit einstellt.

Die Wahl der Randbedingung hängt von den physikalischen Gegebenheiten ab. Das Ziel ist immer, die herrschenden physikalischen Bedingungen möglichst genau mathematisch abzubilden. Sehr häufig verwendete Randbedingungen sind die *Dirichlet-* und *Neumannrandbedingung*; *Dirichletbedingungen* nutzen einen festen Wert zur Beschreibung der Physik, während *Neumannrandbedingungen* den Wert der Normalableitung, den Gradienten, vorgeben. In den entwickelten Modellen werden neben diesen Randbedingungen Mischformen beider und speziell an physikalischen Phänomenen orientierte Wandfunktionen verwendet. Diese werden an der entsprechenden Stelle genauer beschrieben.

In den durchgeführten Simulationen sind Randbedingungen für Geschwindigkeit, Druck, Phasenverteilung (α), turbulente kinetische Energie (k) und isotrope Dissipationsrate nötig (ϵ). Die Flasche besteht aus zwei Randregionen, der Wand und der Mündung. Während das Verhalten an der Wand (Abb. 44 blau) über die gesamte Simulation konstant ist, verändert sich das Verhalten an der Mündung (Abb. 44 rot), je nachdem, ob Wasser ausströmt oder Luft einströmt. Da diese Phänomene zum Teil sehr partiell an der Mündung auftreten, wie z. B. beim gleichzeitigen Einströmen von Luft und Ausströmen von Wasser, s. Abb. 45, muss die Randbedingung an der jeweiligen Stelle an die Strömungssituation angepasst sein. Im Beispiel der aufsteigenden Luftblase (Abb. 45) bedeutet dies, dass am gleichen Randgebiet der Mündung zwei unterschiedliche Randbedingungen gewählt werden müssen. Diesem Umstand wird durch eine adaptive Randbedingung Rechnung getragen. Realisiert wird dies durch das Umschalten der Randbedingung von *Dirichlet-* zu *Neumannrandbedingung* je nach Strömungsrichtung.

Die Anfangs- und Randbedingung für die einzelnen Größen werden wie folgt verwendet:

- **Geschwindigkeit**

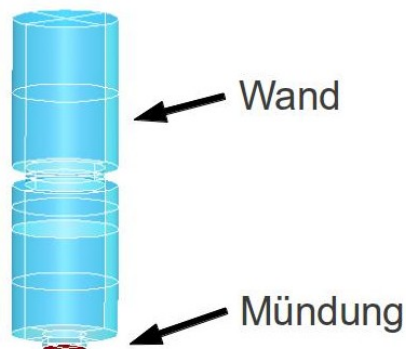


Abbildung 44: Randgebiete

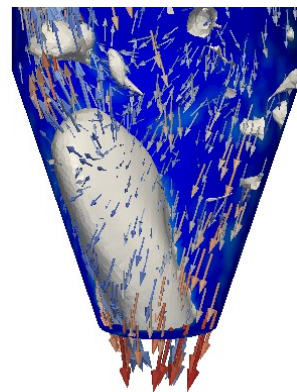


Abbildung 45: Strömung an der Mündung

Die Geschwindigkeitsverteilung im Strömungsgebiet wird durch Vektoren beschrieben. Jedem Gitterpunkt ist ein Vektor zugeordnet, der sich am kartesischen Koordinatensystem orientiert. Zu Beginn wird angenommen, dass das gesamte Feld in Ruhe ist. Für alle Punkte wird der Vektor mit $(0\ 0\ 0)$ vorgegeben. An der Flaschenwand wird eine *Dirichletrandbedingung* verwendet. Diese fixiert die Geschwindigkeit an der Wand auf $(0\ 0\ 0)$ und wird als Haftbedingung bezeichnet (Ferziger & Peric, 2008, S. 235). Für die Mündung wird eine adaptive Randbedingung verwendet, die sich an der Strömungsrichtung orientiert. Die Bedingung setzt die Randbedingung standardmäßig auf einen Gradient von 0 (*Neumannbedingung*), außer wenn die Strömungsrichtung in die Flasche zeigt; dann wird für dieses Teilgebiet der Mündung eine *Dirichletrandbedingung* $(0\ 0\ 0)$ verwendet. Die adaptive Kombination der beiden Randbedingungen erlaubt die Abbildung der physikalischen Gegebenheiten. Der Inhalt der Flasche kann ungehindert ausströmen, da ein Gradient von 0 die Geschwindigkeit gleich hält, während ein einströmendes Fluid ohne zusätzliche Beschleunigung in die Flasche einfließt.

- **Druckfeld**

Zur Messung der physikalischen Größe Druck können verschiedene Referenzpunkte verwendet werden. Wenn der Druckunterschied zum absoluten Vakuum bestimmt wird, wird er als absoluter Druck bezeichnet (Bohl & Elmendorf, 2008, S. 49). Der relative Druck gibt den Druckunterschied zur Umgebung wieder. Der absolute Druck kann also durch Addition des Atmosphärendrucks errechnet werden. Bei strömenden

Fluiden wird zusätzlich zwischen statischem Druck (p_s) und dynamischem Druck (p_d) unterschieden, die zusammen den Gesamtdruck (p_g) bilden (Gl. 67). Der statische Druck wird senkrecht zur Strömungsrichtung bestimmt, während der Gesamtdruck in Strömungsrichtung ermittelt wird. Somit gibt der dynamische Druck den Anteil des Gesamtdrucks wieder, der durch die Bewegung erzeugt wird. Daher wird er auch als Staudruck bezeichnet (Böswirth, 2010, 32 f.).

$p_g = p_s + p_d$	(67)
-------------------	------

In den Simulationen wird üblicherweise der relative Druck verwendet, nicht der absolute Druck (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 270). Der relative Druck genügt, da für die Simulationen ausschließlich Druckunterschiede von Relevanz sind, wenn die physikalischen Eigenschaften der Fluide entsprechend beschrieben sind. Die Dichte und rheologischen Eigenschaften der Fluide müssen für den herrschenden absoluten Druck beschrieben sein. Der Anfangswert für das Druckfeld, welches den Druckwert für jede einzelne Zelle enthält, wird durch $p_d=0$ vorgegeben, da angenommen wird, dass zu Beginn keine Bewegung herrscht. Der statische Druck, p_s , wird für jede Gitterzelle individuell bestimmt. Hierzu werden die Informationen Dichte, Schwerkraft und Lage im Raum benötigt. Die genaue Berechnung ist in Oertel (2008, S. 20 ff.) detailliert dargestellt. An der Flaschenwand wird eine *Neumannrandbedingung* verwendet (Passalacqua & Marmo, 2009, S. 2798). Für die Mündung wird der Druck mit einer Dirichletbedingung bestimmt, welche basierend auf dem vorgegebenen Umgebungsdruck und der herrschenden Geschwindigkeit den Gradienten mit Gl. 68 angeben.

$p_g = p_s + \frac{1}{2}\rho U ^2$ (OpenFOAM, 2011, S. 137)	(68)
---	------

- **Phasenverteilung**

Die Phasenverteilung wird, wie in 4.1.3 dargestellt, durch den α -Wert beschrieben. Die Flasche ist zu Beginn komplett mit Flüssigkeit gefüllt. Somit wird α als Anfangswert für jede Zelle auf 1 gesetzt. An der Flaschenwand erfolgt keine Änderung der Zellfüllung, weshalb eine Neumannrandbedingung mit Gradient 0 verwendet wird. An der Mündung wird die vom Geschwindigkeitsfeld bekannte adaptive Randbedingung eingesetzt, welche sich an der Strömungsrichtung orientiert. Die

Randbedingung ist standardmäßig auf einen Gradienten von 0 eingestellt. Nur wenn die Strömungsrichtung in die Flasche hinein zeigt, wird eine *Dirichletbedingung* mit $\alpha=0$ verwendet. Eine Zelle mit $\alpha=0$ ist komplett mit Luft gefüllt. Die Randbedingung beschreibt somit genau die Physik. Die Flüssigphase läuft aus der Flasche und die Luftphase strömt in die Flasche ein.

- **k- Feld**

k ist die turbulente kinetische Energie, s. 3.2.2, und wird genutzt, um zusammen mit ϵ die Turbulenz im Strömungsraum zu beschreiben. Da für die genaue Auflösung der Turbulenz ein sehr feines Gitter nötig wäre und die Turbulenzmodelle in der Regel nicht fähig sind, die Strömungen am Rand richtig aufzulösen, s. 3.2.2, werden hierfür Wandfunktionen genutzt. Wandfunktionen ermitteln, basierend auf den u^+ und y^+ Werten, 3.2.2, einen entsprechenden k - Wert für jede einzelne Wandzelle. k wird mit Gl. 69 ermittelt. u_τ ist die Geschwindigkeit an der Wand, und C_μ bezeichnet eine Konstante des Turbulenzmodells. Detaillierte Informationen zu Wandfunktionen sind u. a. in Schlichting (1979) und Versteeg & Malalasekera (2007) zu finden. Wandfunktionen geben die Lösung im wandnahen Bereich fest vor. Dazu werden meist logarithmische Funktionen genutzt, die das Strömungsprofil an der Wand beschreiben, s. 3.2.2.

$k = \frac{u_\tau^2}{\sqrt{C_\mu}} \quad (\text{Versteeg \& Malalasekera, 2007, S.77})$	(69)
---	------

An der Mündung wird die vom Geschwindigkeitsfeld bekannte adaptive Randbedingung benutzt, welche, basierend auf der Strömungsrichtung, einen Gradienten von 0 setzt. Zeigt die Strömungsrichtung jedoch in die Flasche, wird mit Gl. 70 ein fester Wert vorgegeben. Die Abschätzung wird exemplarisch in OpenFOAM (2011, S. 42) und Versteeg & Malalasekera (2007, S. 76 ff.) dargestellt. Alternativ können experimentell ermittelte Literaturwerte verwendet werden (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 76 ff.). Der ermittelte Wert für die Mündung wird auch als Startwert für das k -Feld benutzt, da er eine ausreichend genaue Abschätzung der Turbulenz liefert.

$k = \frac{1}{2} \overline{U' \cdot U'} \quad (\text{OpenFOAM, 2011, S. 42})$	(70)
---	------

- **ϵ -Feld**

Die Rand- und Anfangsbedingungen für das ϵ sind denen für k sehr ähnlich. An der Mündung wird für einströmende Fluide die Dissipation mit Gl. 72 abgeschätzt. Sonst wird ein Gradient von 0 vorgegeben. An der Flaschenwand werden Wandfunktionen verwendet, die ϵ mit Gl. 71 abschätzen (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 77 ff.). Der Anfangswert wird mit Gl. 72 bestimmt. C_μ und κ sind Konstanten. u_τ ist die Geschwindigkeit an der Wand. L ist die charakteristische Länge, welche in Rohrleitungen der Durchmesser gegeben ist. In den Flaschenspülsimulationen wird der Mündungsdurchmesser hierzu verwendet. y beschreibt den Abstand zur Wand.

$\epsilon = \frac{u_\tau^3}{\kappa y}$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S.77)	(71)
$\epsilon = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{0.07 L}$ (Versteeg & Malalasekera, 2007, S.77)	(72)

4.1.5.3 Interpolations- und Approximationsschemata

Die Interpolation und Approximation von Funktionswerten und Verläufen ist essentiell, um die mathematischen Modelle in Simulationen verwenden zu können. Die bei der Modellierung der Flaschenleerung auftretenden gekoppelten partiellen Differentialgleichungen sind nicht direkt lösbar. In der Mathematik zählt die Entwicklung von möglichst effizienten und gleichzeitig genauen Approximationen zu den wichtigsten Forschungsfeldern.

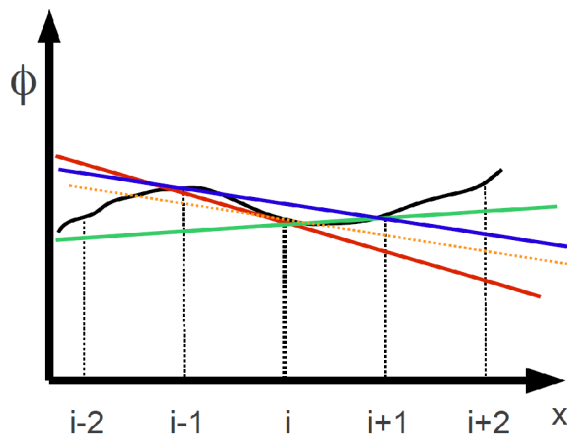


Abbildung 46: Approximation einer Ableitung: (schwarz) Funktionsverlauf und (orange) exakte Lösung; (grün) vorwärts, (rot) rückwärts und (blau) zentrale Differenzenapproximation (Ferziger & Peric, 2008, S. 49)

Abb. 46 zeigt die grundlegenden Techniken zur Approximation der ersten Ableitung am Punkt i der Funktion Φ . Jede kontinuierliche differenzierbare Funktion $\Phi(x)$ kann in der Nähe von x_i durch eine Taylor-Reihe approximiert werden (Ferziger & Peric, 2008, S. 50). Je nachdem, welche Nachbarpunkte verwendet werden, wird dies als vorwärts (Gl. 73), rückwärts (Gl. 74) oder zentrale (Gl. 75) Differenzenapproximation bezeichnet. Vorwärts bedeutet, der Punkt i und $i+1$, rückwärts i und $i-1$ und zentral $i+1$ und $i-1$ werden verwendet.

$$\left(\frac{\delta \phi}{\delta x}\right)_0 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{x_{i+1} - x_i} - \left[\frac{x_{i+1} - x_i}{2} \left(\frac{\delta^3 \phi}{\delta x^3}\right)_i - \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{6} + H \right] \quad (73)$$

(Ferziger & Peric, 2008, S. 51)

$$\left(\frac{\delta \phi}{\delta x}\right)_0 = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} - \left[\frac{x_i - x_{i-1}}{2} \left(\frac{\delta^3 \phi}{\delta x^3}\right)_i - \frac{(x_i - x_{i-1})^2}{6} + H \right] \quad (74)$$

(Ferziger & Peric, 2008, S. 51)

$\left(\frac{\delta \phi}{\delta x}\right)_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} - [\dots + H] \quad (\text{Ferziger \& Peric, 2008, S. 51})$	(75)
---	------

Wie in Abb. 46 zu erkennen ist, muss keines dieser Verfahren die exakte Lösung liefern. Problematisch ist, dass die Terme höherer Ordnung, welche in der eckigen Klammer stehen (Gl. 73, 74 und 75), nicht bekannt sind. Diese Terme sind von ganz geringem Wert und können vernachlässigt werden, wenn der Abstand zwischen i und $i+1$ oder $i-1$ sehr klein wird, da sie in höhere Potenz eingehen; ein sehr kleines i wird in der FVM durch ein sehr feines Rechengitter erreicht (Ferziger & Peric, 2008, 51).

Da ein sehr feines Rechengitter aber sehr hohen Berechnungsaufwand bedeutet, sind eine Vielzahl weiterer Verfahren entwickelt worden, die z. B. weitere Punkte mit in die Rechnung einbeziehen (z. B. $i+2$, $i-3$...etc.). Darüber hinaus werden verschiedenste Polynome zum Abschätzen benutzt. Zur Klassifizierung der verschiedenen Verfahren werden drei Kriterien eingesetzt: (a) *Conservativeness*, (b) *Transportiveness*, (c) *Boundness*. Die genaue Beschreibung der Kriterien und deren Quantifizierung ist in Versteeg & Malalasekera (2007, S. 141 ff.) zu finden. Stark vereinfacht: (a) *Conservativeness* stellt sicher, dass beim Transport eines Stoffs (z. B. Energie oder Masse) von einer in die nächste Zelle weder die Menge des Stoffs vergrößert noch verkleinert wird; b) *Transportiveness* gewährleistet, dass das Verfahren die Strömungsrichtung richtig auflöst, was besonders bei rein vorwärts oder rückwärts gerichteten Schemen ein Problem ist, da sie unterschiedlich auf verschiedene Fließrichtungen reagieren; (c) *Boundness* beschreibt die Beschränkung der Lösung auf physikalisch sinnvolle Werte. Insgesamt müssen die Verfahren eine physikalisch korrekte Lösung sicherstellen und gleichzeitig die höchstmögliche Genauigkeit und Stabilität haben.

In der Regel können nicht alle Ziele gleichzeitig voll erfüllt werden. Da jedes Verfahren Vor- und Nachteile mit sich bringt, muss das verwendete Verfahren problemorientiert gewählt werden. Eine Übersicht und Bewertung der Verfahren ist bei Versteeg & Malalasekera (2007, S. 147 ff.) zu finden. Eines der bekanntesten Probleme ist, dass Verfahren mit höherer Ordnung, welche genauer sind, nicht oszillationsfrei sind (Aubin et al., 2004, S. 433). Oszillationen erzeugen ein komplett unphysikalisches Verhalten und führen meist zum Abbruch des Lösungsprozesses. In Abb. 35 ist ein fehlgeschlagener Lösungsprozess zu sehen. Dies wird als „wiggle“ (engl.) oder „blow-up“ (engl.) bezeichnet (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 140).

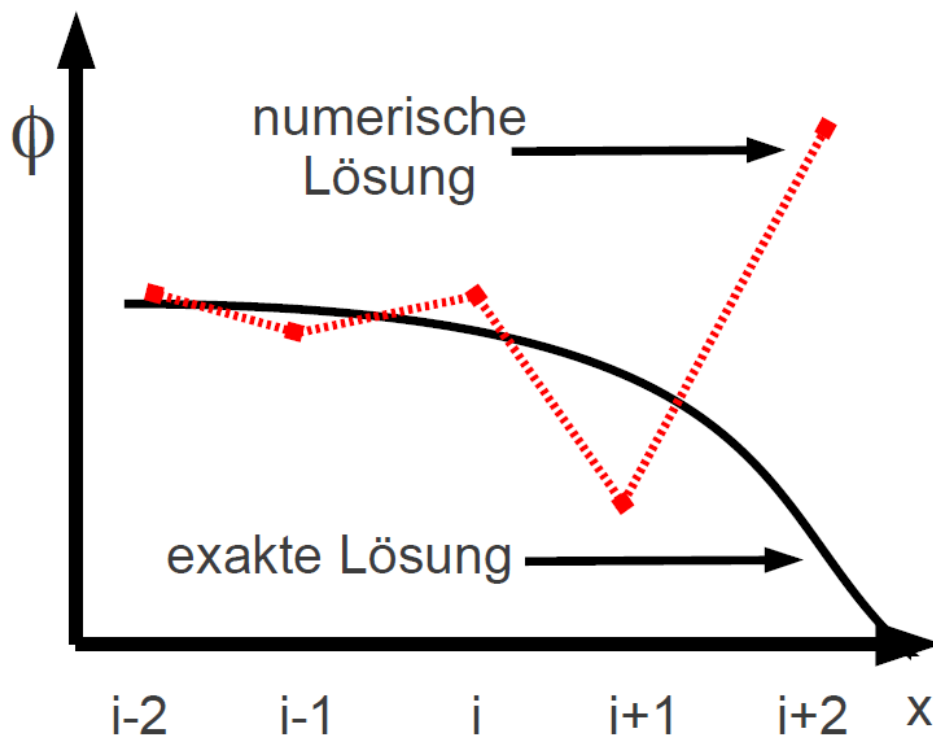


Abbildung 47: Vergleich numerische und analytische Lösung (nach Versteeg & Malalasekera (2007, S. 140))

Arampatzis et al. (1994, S. 313) bestätigen, dass die Verfahren, welche zur Lösung von strömungsmechanischen Problemen entwickelt worden sind, ein „*level of maturity*²“ erreicht haben, der eine akkurate und sichere, im Sinne von stabile, Lösung erlaubt.

Konkret werden in den Simulationen u. a. die Schemen, a) „*linear*“ und (b) „*upwind*“ und die Verfahren (c) „*hybrid*“ und (d) „*limited*“ eingesetzt. (a) „*linear*“ entspricht der zentralen Differenzenapproximation (Gl. 75), ist 2. Ordnung genau und ist das am häufigsten verwendete Verfahren (Ferziger & Peric, 2008, S. 90 f.). Problematisch ist, dass die zentrale Approximation die Flussrichtung nicht beachtet und beide Punkte gleich gewichtet werden (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 146). Dies führt bei stark konvektionsdominierten Strömungen zu unphysikalischen Lösungen. Eine mögliche Lösung dieses Problem stellt die Verwendung des (b) „*upwind*“ Schemas dar. Das Schema, auch „*donor cell*³“- Schema genannt, identifiziert die Flussrichtung, s. Versteeg & Malalasekera (2007, S. 146 ff.), und interpoliert die Lösung ausgehend von der Zelle, die im Strömungsverlauf vor der interpolierten Zelle liegt. Die Lösung ist

² engl. Reifegrad

³ engl. Geberzelle

stets physikalisch realistisch, aber die Fehlerordnung reduziert sich von 2. zu 1. (Baumann et al., 2006, S. 40 f.). Ferziger & Peric (2008, S. 89 f.) klassifizieren diesen Fehler genauer und beschreiben ihn als diffusionsähnlich („falsche oder künstliche Diffusion“); der entstehende Fehler verstärkt sich zudem bei schräger Strömungsrichtung im dreidimensionalen Raum und äußert sich durch das Verschmieren der Lösung.

Zur Kombination der Vorteile und Reduktion der Nachteile wurden (c) *hybrid*-Schemen entwickelt, welche abhängig von der anliegenden Strömung zwischen *linear*- und *upwind*-Approximation hin und her schalten. Die Bestimmung des verwendeten Schemas erfolgt u. a. durch die *Peclet*-Zahl, die das Verhältnis von Konvektion zu Diffusion angibt; mehr hierzu in Versteeg & Malalasekera (2007, S. 151 ff.). Eine andere Idee wird mit (d) „*limited*“ verfolgt. Die Oszillation, s. Abb. 35, die bei Schemen höherer Ordnung entstehen kann, wird durch die adaptive Limitierung des Lösungsraumes reduziert (Baumann et al., 2006, S. 55 ff.). Für die Limitierung stehen verschiedene Verfahren bereit. Die bekanntesten sind TVD (*total variation diminishing*) (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 167 ff.) und NVD (*normalised variable diagram*) (Jasak et al., 1999, S. 143 ff.).

4.1.5.4 Lösung der algebraischen Gleichungssysteme

Nach der Überführung der partiellen Differentialgleichungen durch Diskretisierung in ein algebraisches Gleichungssystem muss dieses gelöst werden. Eine Besonderheit ist, dass die Matrizen meist nur sehr dünn besetzt und bei gut strukturierten Gittern diagonal sind (Ferziger & Peric, 2008, S. 105). Dies beschleunigt und erleichtert die Lösung.

Zur Lösung stehen entweder (a) direkte oder (b) iterative Methoden zu Verfügung. Die bekannteste direkte Methode ist die Gauß- Elimination, welche u. a. in Ferziger & Peric (2008, S. 106 ff.) beschrieben ist. (a) Direkte Verfahren führen nach einer endlichen Zahl von Rechenschritten zur exakten Lösung. Wichtiger für die durchgeführten Methoden sind die (b) iterativen Verfahren, welche wiederholt einen vermeintlichen einfachen Algorithmus ausführen und sich so der Lösung nähern (Versteeg & Malalasekera, 2007, S. 212). Ein ausführlicher Überblick über mögliche Verfahren und deren Vor- und Nachteile ist in Versteeg & Malalasekera (2007, S. 212 ff.) und Ferziger & Peric (2008, S. 105 ff.) zu finden.

In den durchgeführten Simulationen, s. Anhang **B**, kamen im Wesentlichen folgende Verfahren zum Einsatz: (a) PCG, (b) PBiCG und (c) GAMG. (a) PCG (*Preconditioned conjugate gradient*) und (b) PBiCG (*Preconditioned bi-conjugate gradient*) basieren auf den Methoden der konjugierten Gradienten und nähern sich der Lösung durch geschickte Minimierung der Richtungsgradienten an (Ferziger & Peric, 2008, S. 125). Vorteil der Verfahren a) und b) ist, dass der Fehler in jeder Iteration reduziert wird, während der Nachteil ist, dass der Betrag der Fehlerreduktion ungewiss ist (Ferziger & Peric, 2008, S. 125). Dies führt unter Umständen dazu, dass eine Lösung sehr viele Iterationen erfordert. (c) GAMG (*geometric- algebraic multi-grid*) beschleunigt die Lösung durch das Lösen auf verschiedenen Gittergrößen. Das ursprünglich feine Gitter wird im Lösungsprozess vergrößert, womit die Größe des zu lösenden Gleichungssystems reduziert wird. Das gelöste grobe Gitter wird dann wieder als Ausgangspunkt der Lösung für das ursprüngliche feine Gitter genutzt. Dieses Prinzip kann auch nach Bedarf auf verschiedenen Vergrößerungsebenen erweitert und wiederholt werden. Der genaue Ablauf des Verfahrens ist in Versteeg & Malalasekera (2007, S. 229 ff.) erläutert. Die Wahl der richtigen Methode ist entscheidender für die Geschwindigkeit und Stabilität als für die Genauigkeit.

Gleiches gilt für *Preconditioner* und *Smoother*, welche helfen, die zu lösende Matrix umzuformen, damit sie besser lösbar ist. Diese Verfahren sind in Ferziger & Peric (2008, S. 131 ff.) und Versteeg & Malalasekera (2007, S. 213 ff.) beschrieben. Ein weiteres Verfahren, welches bei der Lösung angewendet wird, ist die *Unterrelaxation*. Dieses Verfahren limitiert die Lösungsgeschwindigkeit der Iteration zu Gunsten der Stabilität. Dies ist besonders nützlich für nichtlineare Probleme, um Divergenz zu vermeiden (Baumann et al., 2006, S. 33).

4.2 Verwendete Software

Die allgemeinen Vorteile und Hintergründe von F/OSS sind bereits hinreichend in 3.4 dargelegt. In diesem Abschnitt steht die verwendete Software im Fokus, welche in der Arbeit genutzt wurde. Die gesamte verwendete Software ist als F/OSS- Software lizenziert.

4.2.1 Salome

Die Software SALOME ist eine Plattform für verschiedene ingenieurwissenschaftliche Anwendungen im Bereich von CAD (engl. *Computer Aided Design*), CAE (engl. *Computer Aided Engineering*), FEM (engl. *Finite Element Method*) und FVM (engl. *Finite Volume Method*). Bergeaud & Tajchman (2007, S. 383) bestätigen, dass durch diese Software vielfältige Möglichkeiten gegeben sind, da der modulare Aufbau zahlreiche Kopplungsmöglichkeiten bietet. Ein Beispiel ist die Kopplung verschiedener Simulationsprogramme. Die Software wird von *CEA*, einem staatlichen Forschungszentrum in Frankreich, von *FEA*, einem französischen Atomanlagenbauer, und *OPENCASCADE*, einer Softwarefirma, entwickelt und geprüft. Da bei diesen Branchen ein hohes Sicherheitsbedürfnis besteht, kann die Software als verlässlich eingestuft werden.

In dieser Arbeit werden nur die CAD-Funktionen der Software verwendet, siehe Abb. 48. Diese erlauben, geometrische Daten zu digitalisieren und in entsprechende Formate zu konvertieren.

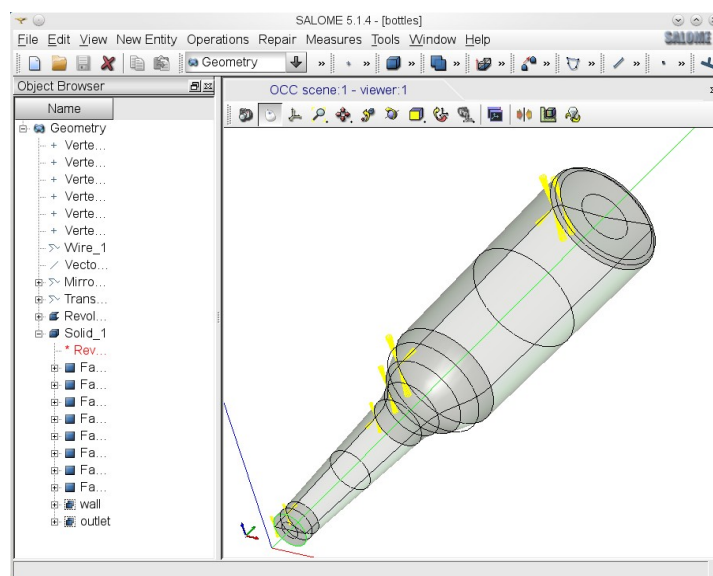


Abbildung 48: Salome CAD-Software

4.2.2 OpenFOAM

OpenFOAM (*Field Operation And Manipulation*) ist eine Sammlung von quelloffenen C++ Programmen aus dem Bereich der CFD (Andersson, 2011, S. 9). Die in OpenFOAM enthaltenen Programme reichen von Gittergenerierung über Löser bis hin zu verschiedenen *Postprocessingtools*. Zusätzlich verfügt das Programm über eine Vielzahl von Schnittstellen und Konvertern, die eine gute Vernetzbarkeit insbesondere zu anderen *open- source-* Programmen erlauben, s. Paraview (4.2.4) oder Salome (4.2.1). Das Programm wurde ursprünglich für UNIX/ Linux Systeme geschrieben, und die Integration in Windows ist bis heute nicht vollständig vollzogen (Andersen & Nielsen, 2008, S. 10). Im Gegensatz zu den meisten anderen Programmen wird OpenFOAM nicht durch einen GUI (graphical user interface), sondern über Scripte und Kommandozeilenbefehle gesteuert (Andersson, 2011, S. 9).

Das Programm wird von der OpenFOAM Foundation angeboten und ist voll unter GPL lizenziert. Die Quelloffenheit und der modulare Aufbau machen OpenFOAM zu einer nachhaltigen Softwarelösung, da Entwickler die Software weltweit nutzen und weiter entwickeln können (Kassem et al., 2011, S. 2).

Die große Beliebtheit und gute Qualität der Software wird bei einem Blick auf einige exemplarische Anwendungsbeispiele von OpenFOAM sehr deutlich: Zweiphasenströmungen (Maiwald & Schwarze, 2011, S. 11), Partikelinteraktion (Silva et al., 2008, S. 2933), Wellenbildung und Küstenerosion (Morgan et al., 2010, S. 1 ff.), Blasenreaktor (Andreas et al., 2009, o.S.), Oberflächenströmungen (Raach et al., 2011, o.S.), Kraftstoffverbrennung (Adorean & Radu, 2010, S. 25 ff.) und Chromatographie (Adelmann et al., 2011, o. S.) lassen sich damit darstellen.

4.2.3 R

Schwartz et al. (2008) beschreiben R als eine ganzheitliche Softwareumgebung zur Datenbearbeitung, zur Berechnung und zur grafischen Darstellung. Der Schwerpunkt von R liegt hierbei in der statistischen Auswertung von Daten. Der Umfang ist praktisch unbegrenzt, da die frei zugängliche Online-Bibliothek (www.r-project.org) ständig wächst und die Anwendungsmöglichkeiten schon lange über die rein statistische Verwendung hinausgehen. Im März 2011 sind über 2800 Pakete auf über 75 Servern in 33 Ländern verfügbar, die die Funktionalität erweitern. Kritisch betrachtet ist R im Kern nur eine Programmiersprache. Dies ist jedoch kein Nachteil, sondern unterstützt dessen ubiquitäre Einsatzmöglichkeit, da der Nutzer weitgehende Einstellungsmöglichkeiten hat. Eine Vielzahl von Büchern, wie z.B. von Ligges (2008), Velten (2009), Dalgaard (2008), Maindonald & Braun (2007) oder Crawley (2007) erlauben den Einstieg in diese Software und dokumentieren zudem ihre weite Verbreitung in fast allen Bereichen der Wissenschaft.

R wird in dieser Arbeit häufig eingesetzt. Die gesamte Versuchsplanung, die Versuchsauswertung und das Erstellen der Diagramme beruht auf dieser Software. Zusätzlich zum Grundpaket wurden folgende Erweiterungspakete verwendet: „AlgDesign“, „ScatterPlot3d“, „rsm“ und „DOE-Pluggin für RCMDR“.

4.2.4 ParaView

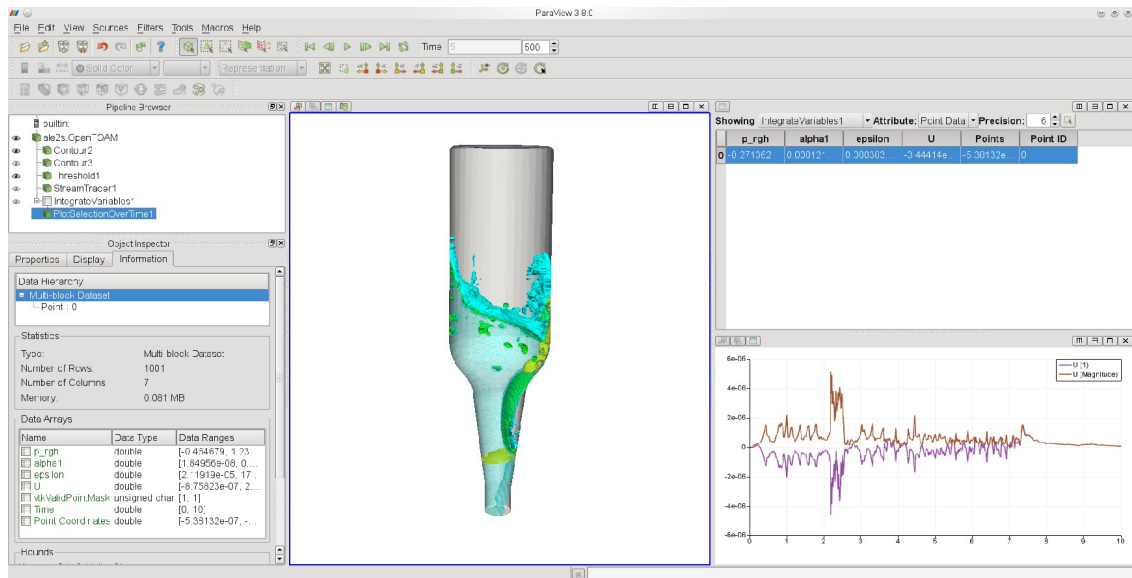


Abbildung 49: ParaView

ParaView wird von der Entwicklergemeinschaft selbst als *multi-platform* Datenauswertungs- und Visualisierungsanwendung bezeichnet. Schroeder et al. (1996, o. S.) stellen besonders die Systemunabhängigkeit der Software heraus. Diese ist von großer Bedeutung, da sie bei Programmen mit grafischer Oberfläche leicht zu Komplikationen führen kann. Das Programm wird unter anderem von *ARL - United States Army Research Laboratory*, *Los Alamos National Laboratory*, *Sandia National Laboratories* und *Kitware* entwickelt und unterstützt. Auch in diesem Fall kann die intensive Beteiligung sowohl privater Unternehmen als auch staatlicher Forschungsinstitute als Garant für die Qualität der Software herangezogen werden.

In dieser Arbeit wird das Programm in erster Linie zur Visualisierung der Simulationsergebnisse benötigt, da die Simulationssoftware selbst über keine grafische Ausgabe verfügt, siehe Abb. 49.

4.3 Experimente

Zur Sicherstellung und zur Überprüfung der Kongruenz des realen Prozesses mit der Simulation sind entsprechende Validierungsexperimente ein wichtiger Schritt (Stern et al., 1999, S. 6). Im Rahmen dieser Arbeit sind hierzu verschiedene reale Experimente ausgeführt worden, die die verschiedenen Aspekte, welche für den Prozess wichtig sind, überprüfen. Im Einzelnen werden die Auslaufzeit einer komplett gefüllten Flasche, welche in verschiedenen Positionen steht, und der herrschende Druck in der Flasche während des Auslaufprozesses näher betrachtet.

Name	E-1	E-2	E-3	E-4	E-5
Flasche	Schlegel (Wiegand, 2009a)	Schlegel (Wiegand, 2009a)	Ale (Wiegand, 2009b)	Ale (Wiegand, 2009b)	Schlegel (Wiegand, 2009a)
Neigung (relativ zur aufrechten Position)	180°	135°	180°	135°	180°
Fluid 1	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser
Fluid 2	Luft	Luft	Luft	Luft	Luft
Oberflächen- spannung	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m

Tabelle 4: Übersicht Experimente

4.3.1 Auslaufzeit

Die Erfassung der Auslaufzeit erfolgt durch die komplette Entleerung der verschiedenen Flaschen. Hierbei werden zwei verschiedene Flaschentypen beprobt, die häufig verwendet werden: die 0,33 L „ALE“ Flasche, die oft für Bier genutzt wird, und die 1 L „SCHLEGEL“ Flasche, in die in der Regel Saft gefüllt wird, vgl. Abb. 50. In den Experimenten werden farblose Flaschen verwendet. Die Zeit wird jeweils für die Positionen „Mündung gerade nach unten“ und „gekippt in einem Winkel von 45°“ ermittelt, vgl. Abb. 51. Der gesamte Prozess wird jeweils mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (Panasonic mit 200 fps) aufgezeichnet, um den Zeitraum möglichst genau ermitteln zu können. Ein ähnlicher Aufbau wird auch von Mouza et al. (2002), welche ähnliche Experimente für eine Rohrleitung durchführen, vorgeschlagen.



Abbildung 50: verwendete Flaschen (Schlegel 1 L und Ale 0,333 L)

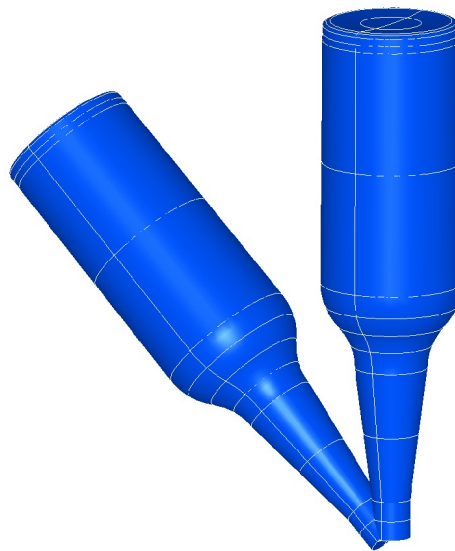


Abbildung 51: Anstellwinkel der Flaschen (180° und 135°)



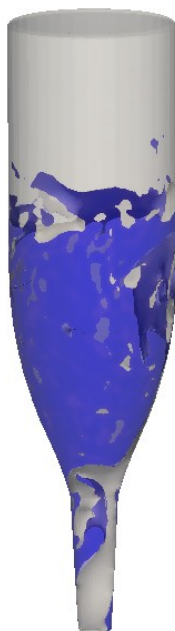
Abbildung 52: Bild der auslaufenden Flasche

Die Anzahl der Wiederholungen wird durch einen einseitigen T-Test ermittelt, der mit R (4.2.3) durchgeführt wird und näher in Velten (2009, S. 108) beschrieben ist (verwendeter Wert: gefordertes Signifikanzlevel 0,1, geforderte *Power* 0.95, geschätzte Standardabweichung 1 sek., unterscheidbare Mittelwerte 1 sek.).

Bezeichnung der Flasche	“SCHLEGEL” (Wiegand, 2009a)	“ALE” (Wiegand, 2009b)
Gesamtvolumen (inkl. Kopfraum)	1,033 L $\pm$ 3,5 mL	0,345 L $\pm$ 2,2 mL
Durchmesser der Mündung	16 mm	15,1 mm
Höhe der Flasche	302 mm	237 mm
mittlerer Durchmesser	84 mm	65 mm
Wiederholung der Versuche	18	18
verwendete Flüssigkeit	Wasser	Wasser
Temperatur	20°C	20°C
Druck	Atmosphärendruck	Atmosphärendruck

Tabelle 5: Kennzahlen der realen Experimente mit Ale und Schlegelflasche

auslaufende Flasche



Hochgeschwindigkeits-
kamera

Abbildung 53: Versuchsaufbau der Experimente

4.3.2 Druck

Eine weitere Kennzahl, um die simulierten Daten zu validieren, ist der Druck in der Flasche. Zur Messung desselben werden an den Boden der Schlegelflasche, welche aufgrund ihres größeren Mündungsdurchmessers besser dazu geeignet ist, Sensoren angebracht. Zur Messung werden MSR 145 W Sensoren in der Flasche installiert, vgl. Abb. 54 Und 55. Der verwendete Sensor der Firma MSR Electronics GmbH aus Henggart misst mit einer Genauigkeit von $\pm 2,5$ mbar im Bereich von 0 bis 2500 mbar.

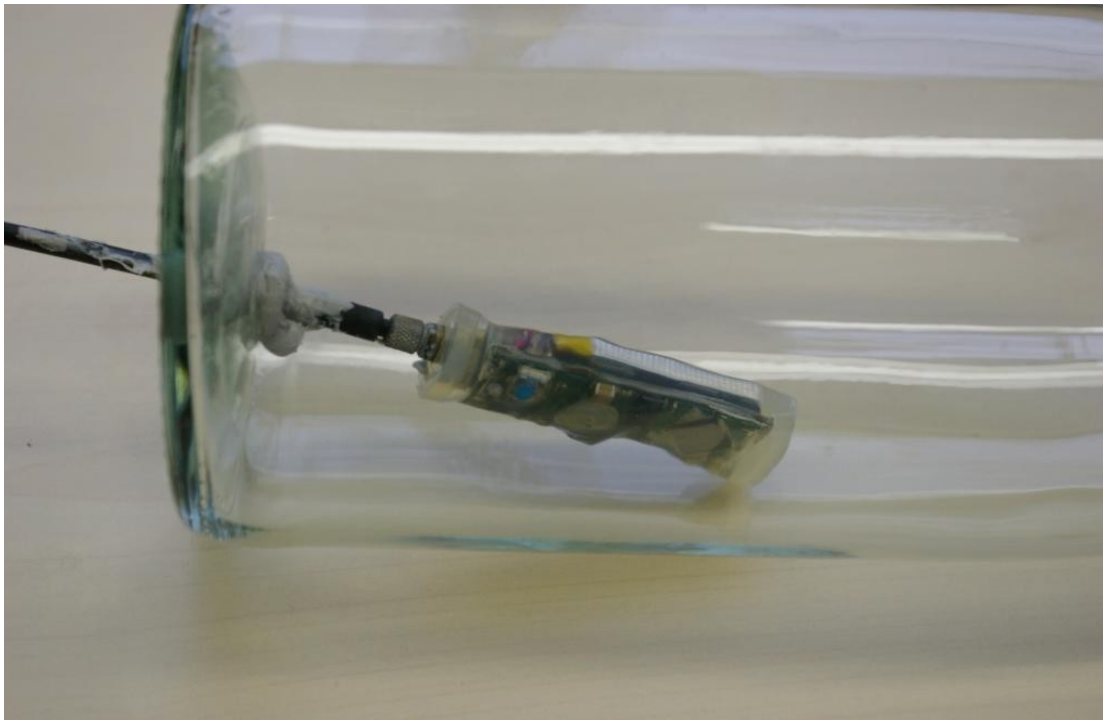


Abbildung 54: MSR 145 W Sensor

Das Experiment (E-5) entspricht dem experimentellen Aufbau von E-1 (Abb. 53.) mit der Ausnahme, dass in E5 der Messsensor integriert ist. Die Flasche steht in 180°-Position (Kopf nach unten) und läuft leer. Bei der Durchführung der Versuche hat sich gezeigt, dass nur die Messung in der senkrechten Flasche mit der Mündung nach unten sinnvoll ist, da Wassertropfen, die gegen den Sensor schlagen, zu Fehlmessungen führen. Die Wassertropfen entstehen, wenn eine Luftblase die Wasseroberfläche durchbricht. Aufgrund dieses Effektes wird in dieser Arbeit nur das Messintervall genutzt, in welchem der Sensor komplett aus dem Wasser ragt. Des Weiteren wird der arithmetische Mittelwert aus den Messungen gebildet.

Da sich zusätzlich bei der Durchführung der Experimente zeigte, dass der Vergleich der einzelnen Messung mit der Simulation problematisch ist, wird zusätzlich die *Sliding- Average- Methode* (engl. gleitender Durchschnitt) bei den Simulationsdaten genutzt. Diese Methode ermittelt aus einem Zeitintervall den dazugehörigen Mittelwert für einen Zeitpunkt. Das Zeitintervall verschiebt sich entsprechend, so dass für jeden Zeitpunkt ein entsprechender Wert gebildet werden kann. Die Mittelwertbildung ist nötig, da die Simulation die Ergebnisse viel genauer auflösen kann als der Sensor. Für die Druckdaten der Simulation wird die Länge des Intervalls auf eine Sekunde, 0,5 s vor und 0,5 s nach dem Messpunkt, festgesetzt. Die Simulation sieht eine gezählte Auflösung von 100 Messpunkten für 1 s vor, so dass jeder Wert aus 100 Messpunkten gebildet wird.

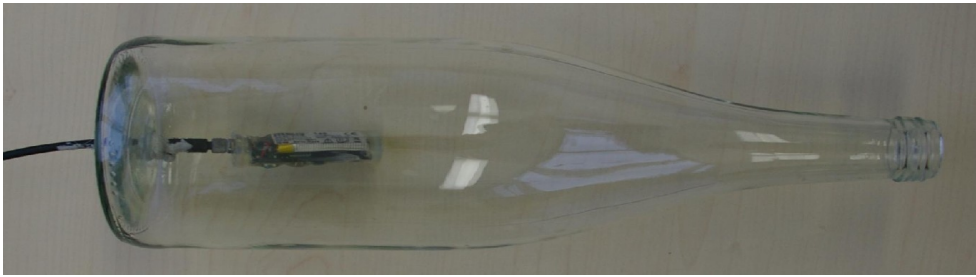


Abbildung 55: Flasche mit MSR 145 W Sensor

Wie in Abb. 55 zu erkennen ist, ist das Volumen des Sensors nicht unerheblich. Zwar dürfte er aufgrund seiner Position keinen großen Einfluss auf das Strömungsbild haben, aber er verändert das Volumen der Flasche. Daher wird für diese Simulation eine eigene Rechengeometrie verwendet, in der der Sensor berücksichtigt ist.

4.4 Simulationen

Im Zuge der Arbeit werden verschiedene Simulationsreihen durchgeführt, um die Fragestellungen zu klären. Die Ziele und Einflussgrößen sind im Einzelnen sehr verschieden und im Folgenden dargestellt.

4.4.1 Validierung und Benchmarking des CFD-Modells

Das Ziel der ersten Studie ist sicherzustellen, dass das verwendete CFD- Modell für derartige Simulationen geeignet ist. Hierzu werden die Messdaten der realen Experimente aus 4.3 genutzt. Neben dem in 4.1 vorgestellten CFD- Modell werden die empirischen Modelle aus 3.3.1.1 eingesetzt, um ein geeignetes Modell zu identifizieren und zu überprüfen, ob die Approximation durch ein Modell möglich ist. Die Genauigkeit soll für ein Setup überprüft werden, das dem realen Ablauf möglichst nahe kommt.

Im Einzelnen werden mit dem CFD- Modell fünf Fälle berechnet, die den Experimenten aus 4.3.1 und 4.3.2 entsprechen. Die Geometrie und die Einstellung der weiteren Parameter wie Oberflächenspannung, Art der Fluide und Kippwinkel der Flasche werden beschrieben in Tab. 6 und 7. Die Flaschen werden als leer definiert, wenn das enthaltene Wasservolumen unter 0,01 % des Anfangswerts gefallen ist. Dieser Wert entspricht bei einer 1 Liter Flasche $0,1 \text{ cm}^3$.

Material und Methoden

Name	V-S-1	V-S-2	V-S-3	V-S-4	V-S-5
Flasche	Schlegel	Schlegel	Ale	Ale	Schlegel
Neigung (relativ zur aufrechten Position)	180°	135°	180°	135°	180°
Fluid 1	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser
Fluid 2	Luft	Luft	Luft	Luft	Luft
Kinematische Viskosität Fluid 1	$1,0 * 10^{-6} \frac{m}{s^2}$	$1,0 * 10^{-6} \frac{m}{s^2}$	$1,0 * 10^{-6} \frac{m}{s^2}$	$1,0 * 10^{-6} \frac{m}{s^2}$	$1,0 * 10^{-6} \frac{m}{s^2}$
Kinematische Viskosität Fluid 2	$1,53 * 10^{-5} \frac{m}{s^2}$	$1,53 * 10^{-5} \frac{m}{s^2}$	$1,53 * 10^{-5} \frac{m}{s^2}$	$1,53 * 10^{-5} \frac{m}{s^2}$	$1,53 * 10^{-5} \frac{m}{s^2}$
Oberflächen- spannung	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m

Tabelle 6: CFD- Simulationen zur Validierung

Da, wie in 3.3.1.1 dargestellt, in den empirischen Modellen nur wenige Parameter berücksichtigt sind, können diese nur sinnvoll für vier Setups genutzt werden.

Name	V-E-1	V-E-2	V-E-3	V-E-4
Flasche	Schlegel	Schlegel	Ale	Ale
Neigung (relativ zur aufrechten Position)	180°	180°	180°	180°
Fluid 1	Wasser	Wasser	Wasser	Wasser
Fluid 2	Luft	Luft	Luft	Luft
Oberflächenspannung	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m	0.07 N/ m
Modell	Wha	CSe	Wha	CSe

Tabelle 7: Simulation mit den empirischen Modellen

4.4.2 Studie 1

Nach der Validierung des verwendeten CFD- Modells wird dieses für die Untersuchung der verschiedenen Parameter genutzt. Die erste Studie untersucht die Effekte von Oberflächenspannung, Kippwinkel und Durchmesser auf die Entleerungszeit. Die Parameter werden jeweils auf drei Stufen analysiert, wobei ein Box- Behnken- Versuchsdesign (3.3.2.1) verwendet wird. Der Kippwinkel wird hierbei für eine Neigung von 180° , 165° und 150° relativ zum aufrechten Stand der Flaschen betrachtet.

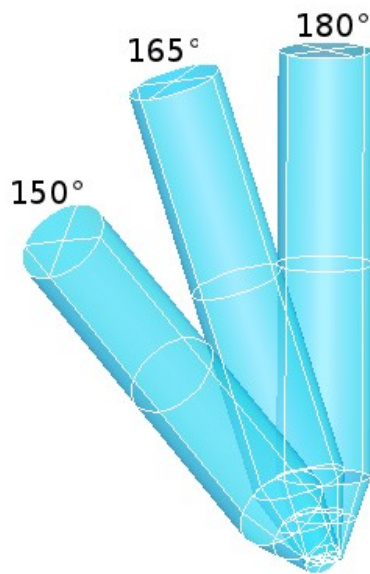


Abbildung 56: Kippwinkel der Flasche

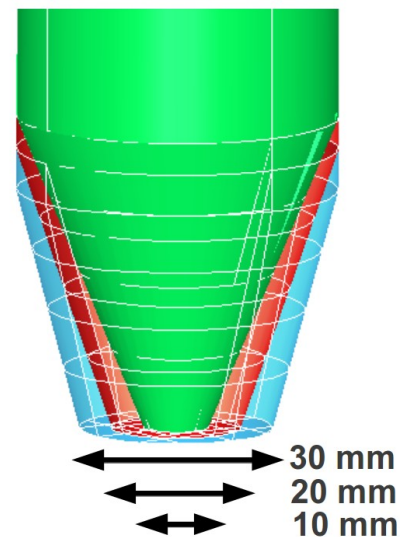


Abbildung 57: Durchmesser der Mündung

Die Oberflächenspannung wird für 0,02, 0,07 und 0,12 N/ m untersucht. Der Innendurchmesser der Mündung (Abb. 57) wird für die Werte 10, 20 und 30 mm untersucht. Das Volumen der Flasche wird auf 0,5 L fixiert. Die Geometrie ist einfach, um weitere Einflussfaktoren so gering wie möglich zu halten. Die Geometrie (Abb. 56) besteht aus einem Zylinder mit Durchmesser 50 mm und einem aufgesetzten Kegelstumpf, der je nach untersuchtem Durchmesser variiert. Für die Simulation sind insgesamt drei leicht verschiedene Geometrien nötig. Der Kippwinkel bzw. die Ausrichtung der Schwerkraft wird, wie in 4.1.5.2 beschrieben, über den Richtungsvektor verändert. Für die Untersuchung sind insgesamt 13 Simulation nötig. Die Flaschen werden als leer definiert, wenn diese bis auf 0,01 % des Volumens nur noch Luft enthalten.

	kodiert				dekodiert		
					Mündungs-		Oberflächen-
	x_1	x_2	x_3		durchmesser	Neigung	spannung
S1-1	-1	-1	0		10 mm	150°	0.07 N/m
S1-2	1	-1	0		30 mm	150°	0.07 N/m
S1-3	-1	1	0		10 mm	180°	0.07 N/m
S1-4	1	1	0		30 mm	180°	0.07 N/m
S1-5	-1	0	-1		10 mm	165°	0.02 N/m
S1-6	1	0	-1		30 mm	165°	0.02 N/m
S1-7	-1	0	1		10 mm	165°	0.12 N/m
S1-8	1	0	1		30 mm	165°	0.12 N/m
S1-9	0	-1	-1		20 mm	150°	0.02 N/m
S1-10	0	1	-1		20 mm	180°	0.02 N/m
S1-11	0	-1	1		20 mm	150°	0.12 N/m
S1-12	0	1	1		20 mm	180°	0.12 N/m
S1-13	0	0	0		20 mm	165°	0.07 N/m

Tabelle 8: Versuchsplan Studie 1

	kodiert				dekodiert		
	x_1	x_2	x_3		Mündungs-		Tiefe der
					durchmesser	Halsform	Einbuchtung
S2-1	-1	-1	0		15 mm	ohne Hals	25%
S2-2	1	-1	0		25 mm	ohne Hals	25%
S2-3	-1	1	0		15 mm	Rohr	25%
S2-4	1	1	0		25 mm	Rohr	25%
S2-5	-1	0	-1		15 mm	Kegelstumpf	0%
S2-6	1	0	-1		25 mm	Kegelstumpf	0%
S2-7	-1	0	1		15 mm	Kegelstumpf	50%
S2-8	1	0	1		25 mm	Kegelstumpf	50%
S2-9	0	-1	-1		20 mm	ohne Hals	0%
S2-10	0	1	-1		20 mm	Rohr	0%
S2-11	0	-1	1		20 mm	ohne Hals	50%
S2-12	0	1	1		20 mm	Kegelstumpf	50%
S2-13	0	0	0		20 mm	Kegelstumpf	25%

Tabelle 9: Versuchsplan Studie 2

4.4.3 Studie 2

Aufgrund der großen Bedeutung der Geometrie, beschäftigt sich die zweite Studie ausschließlich mit der Geometrie und deren Effekt auf die Auslaufzeit. Das Volumen der Flasche ist konstant 0,5 L. In dieser Studie wird von einer konstanten Oberflächenspannung des Wassers von 0.07 N/m ausgegangen. Der Kippwinkel wird in der Position „Mündung unten“ fixiert. Ein Box- Behnken Design mit 13 Versuchen wird auch in dieser Studie genutzt.

Die Geometrie wird in Bezug auf die Form des Halses, den Durchmesser der Mündung und die Tiefe einer Einbuchtung analysiert. Die Form des Halses wird in drei Versionen untersucht, die einem Kegelstumpf, einem Rohr und einem Loch ähneln. Alle Formen sind zusätzlich mit einem kleinen Zylinder direkt an der Mündung versehen. Dieser Zylinder ist nötig, um die Gegebenheiten einer Getränkeflasche zu simulieren, die mit einem regulären Schraubverschluss verschlossen wird. Der Mündungsinwenddurchmesser variiert von 15 auf 20 und 25 mm. Die Einbuchtung ist bei allen Flaschen in der Mitte der Flasche positioniert. Die Einbuchtungstiefe wird abhängig vom Radius variiert: $\frac{1}{2}$ Radius, $\frac{1}{4}$ Radius und ohne Einbuchtung. Durch die Variation der Parameter entstehen 13 verschiedene Geometrien. Wie in Tab. 10 deutlich zu erkennen ist, weisen die untersuchten Flaschen zum Teil im Hals- und Einbuchtungsbereich waagrechte Flächen auf. Diese Flächen bereiten Probleme, da sich auf diesen waagrechten Flächen Wasser sammeln kann, das nur sehr langsam abfließt.

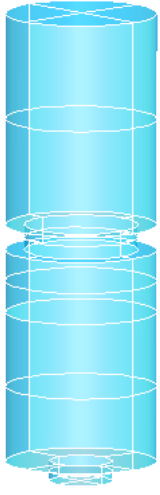
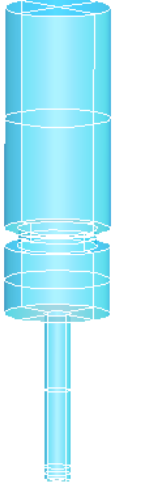
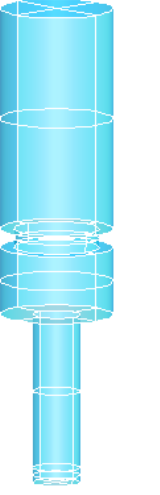
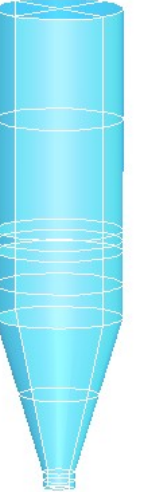
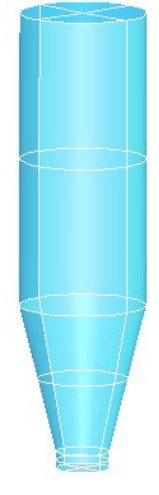
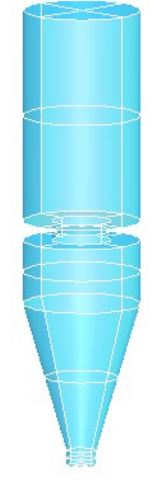
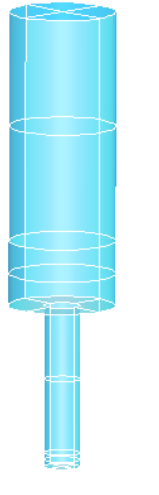
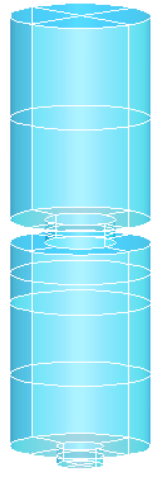
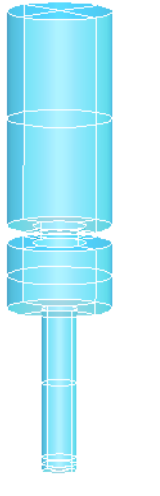
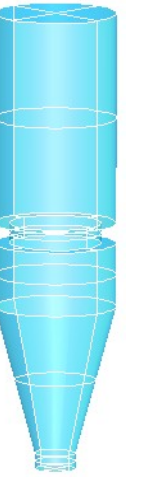
				
S2-1	S2-2	S2-3	S2-4	S2-5
				
S2-6	S2-7	S2-8	S2-9	S2-10
				
	S2-11	S2-12	S2-13	

Tabelle 10: Flaschen der Studie 2 mit Bezeichnung der einzelnen Versuche

4.4.4 Überprüfung der Modelle: Verifikation und Validierung

Die Überprüfung eines Modells anhand von Testwerten ist ein wichtiger Schritt bei der Modellierung (Velten, 2009, S. 33). Hierbei wird zwischen Verifikation und Validierung unterschieden. Aufgrund der höheren Komplexität werden die Unterschiede in den einzelnen Schritten exemplarisch für eine CFD- Simulation angewendet, auch wenn sie allgemein für die Bildung aller Modelle gelten. Eine gute Übersicht über die Feinheiten ist von Stern et al. (1999, S. 2) zusammengetragen worden. Vier Phasen werden unterschieden, vgl. Abb. 58.

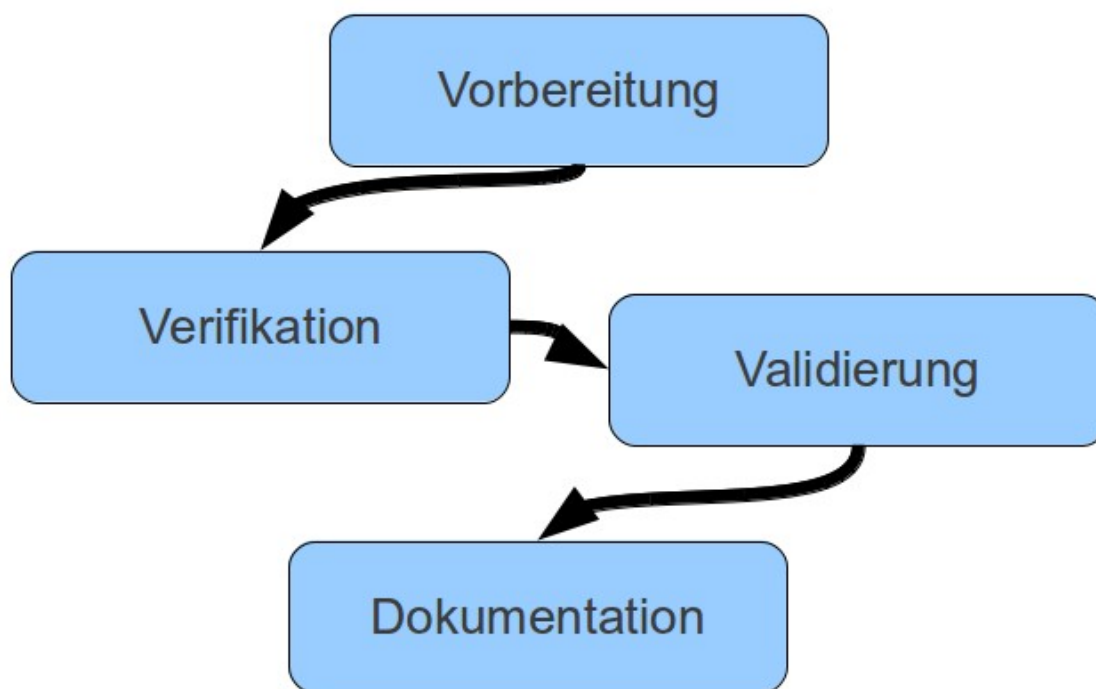


Abbildung 58: Stufen bei der Überprüfung eines Modells

Die Vorbereitung beinhaltet die eigentliche Modellbildung, die das Bestimmen des Simulationsziels, das Definieren der Geometrie und das Auswählen der Methode beinhaltet. Die Verifikation überprüft den numerischen Code und ermittelt im Besonderen die Größen des numerischen Fehlers, während der Vergleich der Simulationsergebnisse mit realen Experimenten als Validierung bezeichnet wird, um dadurch die Größe der Abweichung bestimmen zu können (Stern et al., 1999, S. 12 f.). Der Dokumentationsschritt stellt die Ergebnisse und die Annahmen der vorangegangenen Arbeitsschritte dar, um die Ergebnisse jederzeit nachvollziehen und wiederholen zu können. Probleme bereitet häufig die Unterscheidung zwischen Verifikation und Validierung.

In den meisten CFD- Codes sind die größten numerischen Fehler und Ungenauigkeiten auf die Verwendung iterativer Methoden und die falsche Auswahl von Einflussparametern zurückzuführen (Stern et al., 1999, S. 4 f.). Diese können z.B. durch eine schlechte räumliche oder zeitliche Diskretisierung bedingt sein. In Abs. 4.1 werden die wesentlichen Punkte erörtert, die von Bedeutung sind. In dieser Arbeit ist dies weniger kritisch, wenn auch nicht weniger wichtig, da keine neuen CFD-Techniken entwickelt werden, sondern nur verifizierte Methoden auf ihre Verwendbarkeit getestet werden. Zusätzlich wurde das entwickelte und verwendete Modell anhand des in 4.4.1 dargestellten Testszenarios überprüft. In diesem Experiment werden verschiedene Daten für verschiedene Flaschen erfasst. Die gewonnenen Daten wiederum sind die Basis für eine adäquate Validierung.

5 Ergebnisse

5.1 Validierung des CFD- Modells

Der Vergleich des verwendeten CFD- Modells mit Messdaten stellt sicher, dass das Modell geeignet ist, den angestrebten Zweck zu erreichen. Dieser besteht darin, eine Untersuchungsmethode zu entwickeln, die die Simulation des Leerlaufens verschiedener Flaschen erlaubt. Zusätzlich zu dem CFD- Modell wird auch das Potential bekannter empirischer Modelle (CSe und Wha) geprüft, indem sie im Rahmen des Vergleichs berücksichtigt werden. Dies ist sinnvoll, um festzustellen, ob der Mehraufwand, der bei der Berechnung eines CFD- Modells vorliegt, gerechtfertigt ist. Der Mehraufwand ergibt sich aus der hohen Komplexität des CFD- Modells, welche durch die gekoppelten partiellen Differenzialgleichungen entsteht.

5.1.1 Entleerungsdauer

Der erste Schritt der Validierung besteht darin, die Gesamtentleerungszeit der verschiedenen Modelle mit realen Messdaten zu vergleichen. Da nur einzelne Werte verglichen werden, gestaltet sich die Auswertung nicht übermäßig kompliziert. Insgesamt werden vier Testszenarien verwendet. Die Ale- und Schlegelflasche sind jeweils komplett gefüllt und laufen alleine durch die Schwerkraft leer. Dieser Versuchsaufbau wird in der Kopfüberposition (180°) und der Gekipptposition (135°) durchgeführt. Die 0° -Position würde dem normalen Stand der Flasche entsprechen. Die Details des Versuchsaufbaus sind in 4.3 und 4.4.1 zu finden.

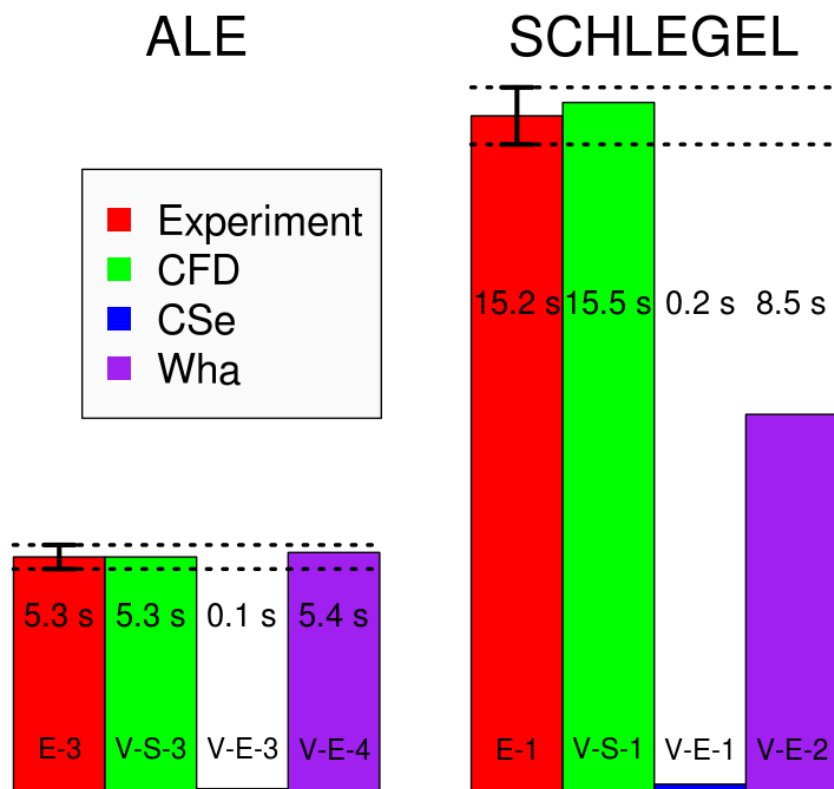


Abbildung 59: Vergleich der Entleerungszeit der Flaschen in aufrechter Position

Abb. 59 zeigt die Ergebnisse für die Ale- und die Schlegelflasche in Kopfüberposition (180°). Die gestrichelten Linien markieren das 95%-Konfidenzintervall der Experimente. In dieser Arbeit wird dieses Intervall genutzt, um zu entscheiden, ob ein Modell geeignet ist, den Prozess zu simulieren. Die Modelle, deren Ergebnis innerhalb des Intervalls liegt, werden akzeptiert. In den Balken ist zusätzlich die genaue Entleerungszeit und die Versuchs- oder Simulationscodierung zu finden.

Ergebnisse

Die Ergebnisse der Modelle sind sehr unterschiedlich, wie in Abb. 59 zu sehen. Die Entleerungszeit für die Aleflasche lässt sich sowohl mit dem CFD- Modell (V-S-3), als auch mit dem Wha- Modell (V-E-4) prognostizieren. Beide, CFD und Wha, liegen innerhalb des 95%-Konfidenzintervalls. Die Abweichung des Wha- Modells beträgt nur 0,1 s (2 %). Die Diskrepanz zwischen dem CSe-Modell (V-E-3) und den experimentell ermittelten Werten ist so groß, dass es für diese Flasche nicht geeignet ist. Werden alleine das empirische Wha- Modell und das CFD- Modell betrachtet, die beide zu guten Ergebnissen führen, schneidet das CFD- Modell besser ab, da die Abweichung vom Mittelwert geringer ist.

Der Vergleich der Ergebnisse für die Schlegelflasche in Abb. 59 ergibt ein ähnliches Bild. Das CFD- Modell (V-S-1) liefert das beste Ergebnis, das im 95%-Konfidenzintervall liegt und eine Abweichung von 0,3 s (2 %) aufweist. Das CSe-Modell (V-E-1) scheitert wieder, da das Ergebnis viel zu weit vom wahren Wert abweicht. Der einzige Unterschied zeigt sich bei der Performance des Wha- Modells (V-E-2), welches die Entleerungszeit diesmal falsch prognostiziert. Die Abweichung desselben beträgt 6,9 s (45 %). Somit scheitern beide empirische Modelle und nur das CFD- Modell ist fähig, beide Flaschen korrekt zu prognostizieren.

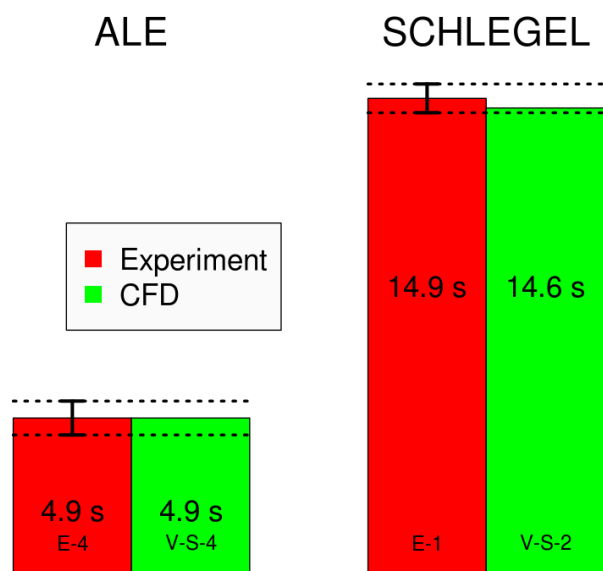


Abbildung 60: Vergleich der Entleerungszeit der Flaschen in gekippter Position

Im zweiten Versuch (Abb. 60) werden die Ale- und Schlegelflasche um 135° geneigt. Da die empirischen Modelle, CSe und Wha (3.3.1.1), keine Neigung der Flasche berücksichtigen können, kann in diesem Setup nur das Ergebnis der CFD- Simulation mit dem realen Experiment verglichen werden. Abb. 60 zeigt, dass eine Simulation der Entleerung sowohl für die Ale als auch die Schlegelflasche mit dem CFD- Modell erfolgreich ist. Die Abweichung beträgt bei der Aleflasche weniger als die Untersuchungsgenauigkeit und kann somit nicht quantifiziert werden. Für die Schlegelflasche liegt sie bei 0,3 s (2 %). Beide Werte befinden sich im 95%- Konfidenzintervall und zeichnen sich somit durch eine hohe Übereinstimmung mit den realen Werten aus.

5.1.2 Druck in der Flasche während der Entleerung

Eine weitere Größe, die für die Validierung des CFD- Modells herangezogen werden soll, ist der Druck. Stimmen die Werte des CFD- Modells mit denen der Experimente überein, ist dies ein weiteres Indiz für die Qualität des Modells. Der Druck eignet sich zur Validierung, da er gut messtechnisch bestimmt werden kann. Der Druck wird hierbei an einer bestimmte Stelle am Boden der Flasche, die sich in Kopfüberposition (180°) befindet, ermittelt und mit den Ergebnissen der Simulation für diesen Punkt verglichen. Zu Beginn des Versuchs ist die Flasche wieder komplett mit Wasser gefüllt und befindet sich in Ruhe. Das Experiment wird durch die Öffnung des Verschlusses gestartet, wodurch die Gravitation das Wasser ausfließen und die Umgebungsluft in die Flasche strömen lässt (Versuchsaufbau: 4.3.2).

Das Ergebnis, Abb. 61, des Vergleichs zeigt eine akzeptable Übereinstimmung. Die Ergebnisse der Simulation liegen fast durchgängig im 95%-Konfidenzintervall. Die Abweichungen am Anfang, 0 bis 5 s, lassen sich durch Fehlmessungen des Sensors erklären. Zu diesen Fehlern kommt es dadurch, dass Wasser, welches durch aufsteigende Luftblasen nach oben gerissen wird, auf den Sensor aufschlägt, worauf dieser reagiert.

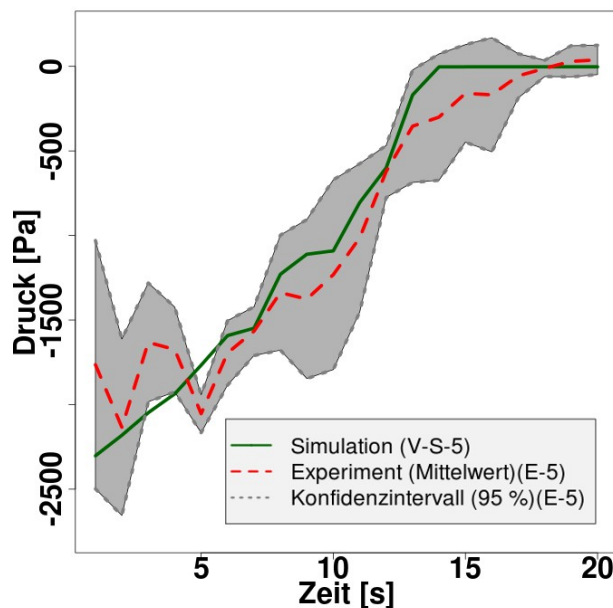


Abbildung 61: Vergleich des Drucks (relativ zum Atmosphärendruck) am Boden der Flasche während der Entleerung

Abb. 61 zeigt deutlich, dass das ausströmende Wasser relativ zum Atmosphärendruck einen Unterdruck erzeugt. Dieser wird mit sinkender Höhe des Wasserspiegels immer geringer, bis kein Wasser mehr in der Flasche ist und der Druck dem Umgebungsdruck entspricht. Der Druckverlauf ist mit Ausnahme eines Zeitpunktes bei 5 s durchgängig im 95%-Konfidenzintervall.

5.2 Ergebnisse der Parameterstudien

Die zwei durchgeführten Versuchsreihen, Studie 1 und Studie 2, zeigen beispielhaft, wie das entwickelte Modell für Untersuchungen des Flaschenleerungsprozesses genutzt werden kann. Neben dem CFD-Modell werden Methoden zur Reduzierung des Versuchsumfangs und zur effektiveren Verwertung der Simulationen verwendet, da CFD sehr viel Rechenkapazität benötigt. Das eingesetzte Box- Behnken-Design (3.3.2.1.1) erfordert 13 Simulationen zur Untersuchung des gesamten Versuchsraums, der aus drei Faktoren auf drei Stufen besteht. Zur Auswertung wird nicht nur auf die klassischen Punkt- und Balkendiagramme, sondern auch auf die Methoden der Regression (3.3.2.3.1) und der *Response Surface* (3.3.2.3.3) zurückgegriffen. Diese zusätzlichen Werkzeuge helfen, das optimale Setup zu finden und das Verhalten für den ganzen Raum abzubilden, ohne dass für jede Stelle eine vollständige CFD- Simulation durchgeführt werden muss, da Ergebnisse, die zwischen den Punkten im Versuchsraum, an denen CFD- Simulationen durchgeführt werden können, interpoliert werden.

5.2.1 Studie 1

In der Studie 1 wird der Einfluss des Mündungsdurchmessers, des Neigungswinkels und der Oberflächenspannung auf die Entleerungsdauer untersucht. Hierzu wird eine idealisierte Flasche verwendet, wie sie in Abb. 62 zu sehen ist. Diese Flasche hat eine einfache Geometrie. Sie besteht aus einem röhrenförmigen Körper und einem kegelförmigen Hals. Der Kegel wird entsprechend dem Mündungsdurchmesser geändert, so dass die Flasche immer das gleiche Volumen von 0,5 L hat. Die Übersicht der Simulationsergebnisse ist in der Abb. 63 zu finden. In den folgenden Abschnitten wird der Einfluss der Parameter und deren Interaktion im einzelnen näher beleuchtet.

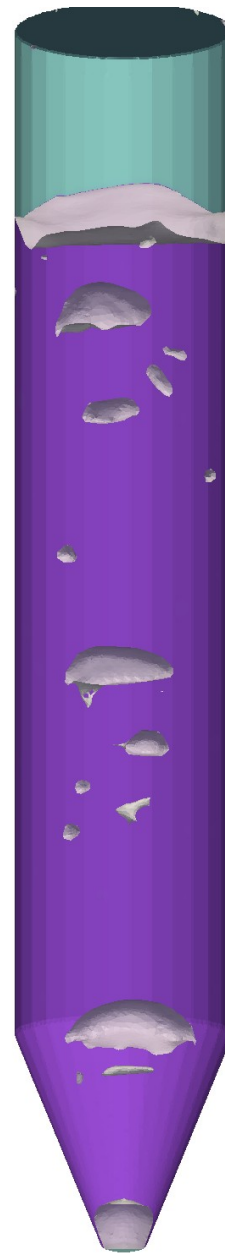


Abbildung 62: Musterflasche der Studie 1 (S1- 1)

In Abb. 63 lässt sich erkennen, dass es bei der Entleerungszeit der Flaschen große Unterschiede gibt. In der besten Konfiguration S1-4, 30 mm Mündungsdurchmesser, 180°-Position und 0,07 N/m Oberflächenspannung, ist die Flasche bereits nach 1,3 s leer, während die Konfiguration S1-7 mit 10 mm Mündungsdurchmesser, 165°-Position und 0,12 N/m Oberflächenspannung 252,7 s benötigt. Dieser große Unterschied, der ca. einem Verhältnis von 1:200 entspricht, tritt bei gleichem Flaschenvolumen von 0,5 L auf. Worin die Ursachen hierfür liegen, wird in den folgenden Abschnitten weiter untersucht.

	Mündungsdurchmesser	Neigungswinkel	Oberflächenspannung	Dauer der Entleerung
S1- 1	10 mm	150 °	0.07 N/m	92.5 s
S1- 2	30 mm	150 °	0.07 N/m	2.5 s
S1- 3	10 mm	180 °	0.07 N/m	97.1 s
S1- 4	30 mm	180 °	0.07 N/m	1.3 s
S1- 5	10 mm	165 °	0.02 N/m	121.6 s
S1- 6	30 mm	165 °	0.02 N/m	2.4 s
S1- 7	10 mm	165 °	0.12 N/m	252.7 s
S1- 8	30 mm	165 °	0.12 N/m	3 s
S1- 9	20 mm	150 °	0.02 N/m	6.7 s
S1- 10	20 mm	180 °	0.02 N/m	12.3 s
S1- 11	20 mm	150 °	0.12 N/m	9.9 s
S1- 12	20 mm	180 °	0.12 N/m	11.5 s
S1- 13	20 mm	165 °	0.07 N/m	11.4 s

Abbildung 63: Ergebnisse der Simulationen (Balken logarithmisch skaliert)

Ergebnisse

Zum besseren Verständnis werden die Daten auch mit mathematischen Methoden analysiert. So ergibt die Regression (3.3.2.3.1) der Ergebnisse aus Abb. 63 die Gl. 76 und Gl. 77, welche den Einfluss der Faktoren auf die Entleerungszeit durch ein Polynom beschreibbar machen. Mit den Polynomen lässt sich aus dem Durchmesser der Mündung (x_1), der Neigung der Flasche (x_2) und der Oberflächenspannung (x_3) die Auslaufzeit (y) errechnen. Diese Gleichungen helfen, Abhängigkeiten besser zu verstehen.

$y = 1,5 \cdot 10^2 - 6,9 \cdot x_1 + 8,0 \cdot 10^{-2} \cdot x_2 + 3,4 \cdot 10^2 \cdot x_3$	(76)
$y = -2,6 \cdot 10^3 - 2,5 \cdot 10^1 \cdot x_1 + 3,5 \cdot 10^1 \cdot x_2 + 5,9 \cdot 10^2 \cdot x_3 - 9,7 \cdot 10^{-3} \cdot x_1 x_2 - 6,5 \cdot 10^1 \cdot x_1 x_3 - 1,3 \cdot x_3 x_1 + 6,1 \cdot 10^{-1} \cdot x_1^2 - 1,1 \cdot 10^{-1} \cdot x_2^2 + 9,1 \cdot 10^4 \cdot x_3^2$	(77)

Die Gleichungen 76 (Polynom 1. Ordnung) und 77 (Polynom 2. Ordnung) verwenden unterschiedliche Polynome (3.3.2.3.2) zur Regression. Der Vorteil des Polynoms 2. Ordnung ist, dass quadratische Effekte und Interaktionen zwischen zwei Parametern abgebildet werden können. $x_1 x_2$ beschreibt z. B. die Interaktion von Mündung und Neigung der Flasche im Hinblick auf die Auslaufzeit.

Die statistische Analyse der Regression, welche im Detail in Anhang **A** der Arbeit zu finden ist, ergibt, dass nur in Gl. 76 ein signifikanter Zusammenhang zwischen Auslaufzeit und Mündungsdurchmesser besteht. Für die anderen Parameter kann kein Zusammenhang nachgewiesen werden, der statistisch durch Signifikanz gesichert ist. Der Determinationskoeffizient (R^2), welche als Kennzahl dafür dient wie gut das Modell die Zielvariable beschreibt, ist für die Gl. 2. Ordnung deutlich besser. R^2 für Gl. 76 ist 0,60 und für Gl. 77 0,91 (*adjusted R²*: Gl. 76 0,47 und Gl. 77 0,63).

Obwohl das Fitting der Regressionsmodelle nicht perfekt ist, was sich durch das Fehlen der Signifikanz zeigt, kann insbesondere das Modell 2. Ordnung (Gl. 77) hilfreiche Informationen über mögliche Extrempunkte liefern. Hinzu kommt, dass die verwendeten Methoden der Regression Störgrößen in einem Maße berücksichtigen, wie sie bei virtuellen Experimenten nicht auftreten, da alle Rahmenparameter sehr gut kontrolliert werden können. So treten z. B. keine Temperaturschwankungen auf (mehr hierzu in 3.3.2.2).

Problematisch bei der Darstellung des *Response Surface Diagram (engl.)* (RSD) ist, dass drei Faktoren und eine Zielgröße gleichzeitig dargestellt werden müssen. Diese vier Größen lassen sich nur schlecht in einer Grafik ausdrücken, ohne dass die

Übersichtlichkeit verloren geht. Daher werden die Ergebnisse immer in mehreren Grafiken aufgeteilt dargestellt, wie in Abb. 64 zu sehen ist. Zwei Einflussgrößen werden auf die X- und Y-Achse aufgetragen. Die Zielgröße wird farblich und mit Höhenlinien dargestellt. Die fehlende Einflussgröße wird auf einen Wert festgesetzt, der in der Grafikbeschreibung zu finden ist. In Abb. 64 ist die fehlende Größe jeweils durch die mittlere Untersuchungsstufe festgesetzt.

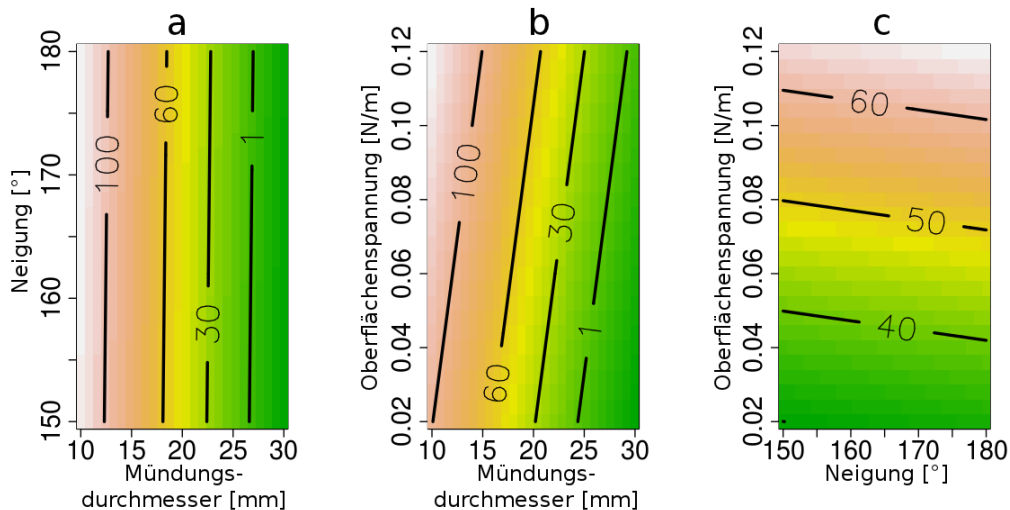


Abbildung 64: RSDs, die die Auslaufzeit [s] für verschiedene Konfigurationen wiedergeben, basierend auf Gl. 76. In den einzelnen Diagrammen sind die Größen, wie folgt, fixiert: a) Oberflächenspannung 0,07 N/m, b) Neigung 165°, c) Mündungsdurchmesser 20 mm

Die *Response Surface* für das Modell 1. Ordnung (Gl. 76) zeigt, welche Komponenten in welchem Bereich den größten Einfluss haben. Verdeutlicht wird dies durch den Vergleich von Abb. 64a zu 64b. In Abb. 64a wird die Leerungszeit ausschließlich durch den Mündungsdurchmesser bestimmt, während in Abb. 64b beide Parameter, sowohl der Mündungsdurchmesser als auch die Oberflächenspannung, relevant sind. Dies wird durch den schrägen Verlauf der Höhenlinien deutlich.

Noch detailliertere Information liefert ein RSD, welches aus der Gleichung 2. Ordnung erstellt worden ist. Dieses berücksichtigt neben den linearen sowohl quadratische als auch kombinierte Effekte. Dies führt dazu, dass sich die Anzahl der Gleichungskomponenten exponentiell erhöht, wie in Abb. 65 zu sehen ist.

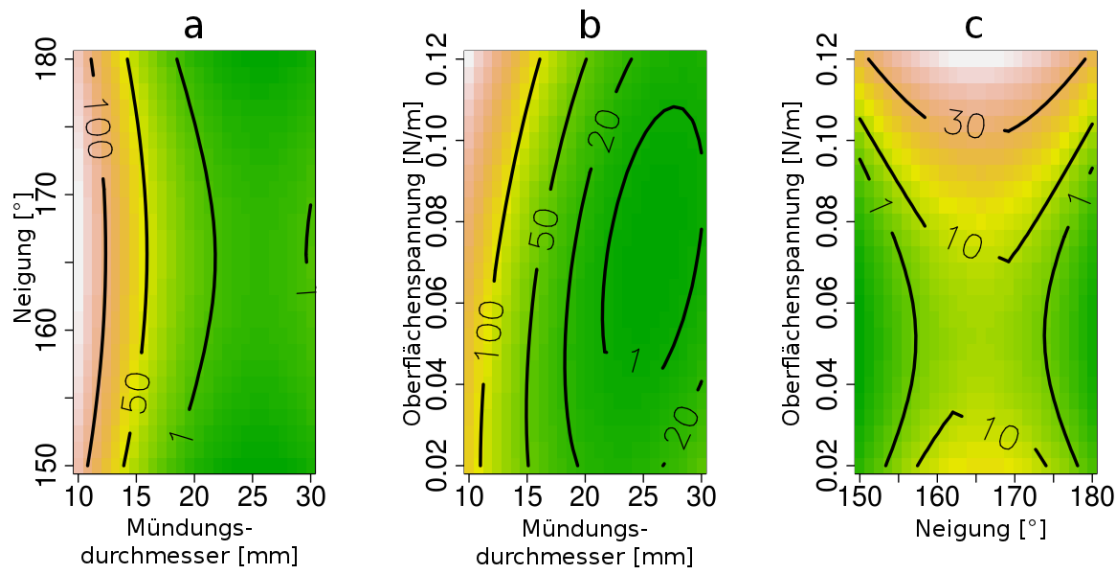


Abbildung 65: Response-Surface für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 2. Ordnung (Gl. 76); a) Oberflächenspannung 0,07 N/m, b) Neigung 165°, c) Mündungsdurchmesser 20 mm

Im direkten Vergleich von 64b zu 65b wird deutlich, welche Bedeutung die zusätzlichen Informationen haben. Bei Abb. 65b kann die Lage des Extrempunkts besser eingegrenzt werden und die Effekte, welche auf Gl. 77 (Polynom 2. Ordnung) beruhen, zeigen sich ebenfalls. Damit ist das Polynom 2. Ordnung besser geeignet, die Informationen zu veranschaulichen.

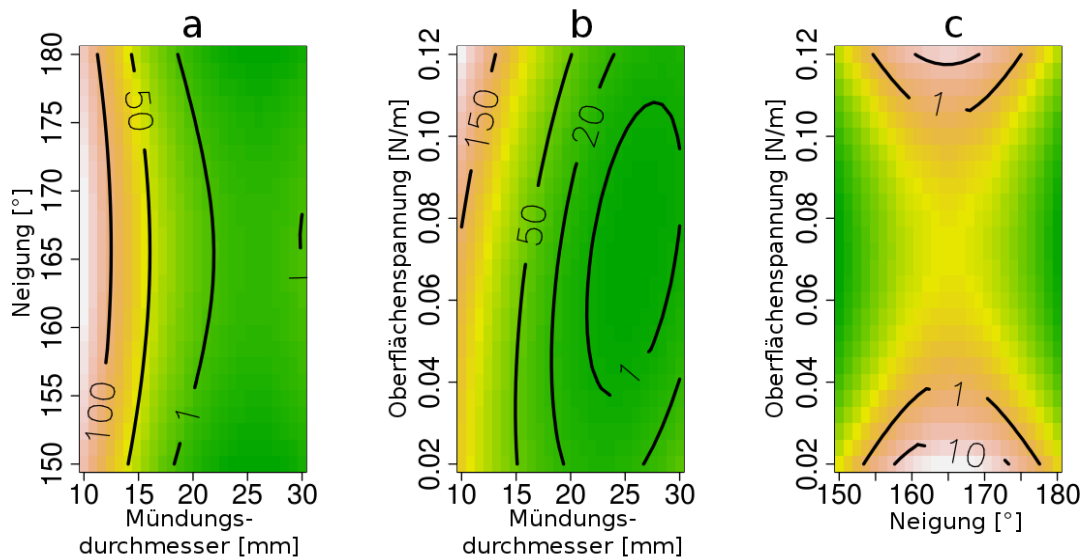


Abbildung 66: Response-Surface für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 1. Ordnung (Gl. 76); a) Oberflächenspannung 0,072 N/m, b) Neigung 165,1°, c) Mündungsdurchmesser 25,8 mm

Zudem ist es möglich, mit dem Polynom 2. Ordnung Extrempunkte zu finden. Diese Punkte können je nachdem ein lokales oder globales Maximum oder Minimum beschreiben. Der Stagnationspunkt der Gl. 77 liegt bei einem Mündungsdurchmesser

25,8 mm, einer Neigung der Flasche von 165° und einer Oberflächenspannung von 0,72 N/m. Die RSDs durch diesen Punkt (Abb. 66) erlauben, festzustellen, um welche Art von Punkt es sich handelt. In diesem Fall unterscheiden sich die Darstellungen kaum, da der Stagnationspunkt mit Ausnahme des Mündungsdurchmessers mit den Werten aus Abb. 65 fast übereinstimmt. Die Analyse der Höhenlinien in Abb. 66 verdeutlicht, dass der Punkt nur ein Sattelpunkt ist und kein globales Minimum, welches eine optimale Konfiguration des Systems erlauben würde. Sattelpunkte haben kein klares umrandetes Minimum in RSDs. Am deutlichsten wird dies in 66c; die Auslaufzeit ist bei 150° und 180° geringer als bei 168° , so dass es nicht möglich ist, ein einziges globales Minimum zu finden.

5.2.1.1 Durchmesser der Mündung

Der Effekt eines veränderten Mündungsdurchmessers für die untersuchten Flaschen ist klar erkennbar. In Abb. 67 wird deutlich, dass ein größerer Mündungsdurchmesser zu einer Verkürzung der Auslaufzeit führt und umgekehrt. Es bilden sich drei Stufen aus, welche dem Mündungsdurchmesser entsprechen. Für einen Mündungsdurchmesser von 10 mm dauert der Vorgang 80- 250 s, für 20 mm 6- 15 s und für 30 mm 1- 3 s.

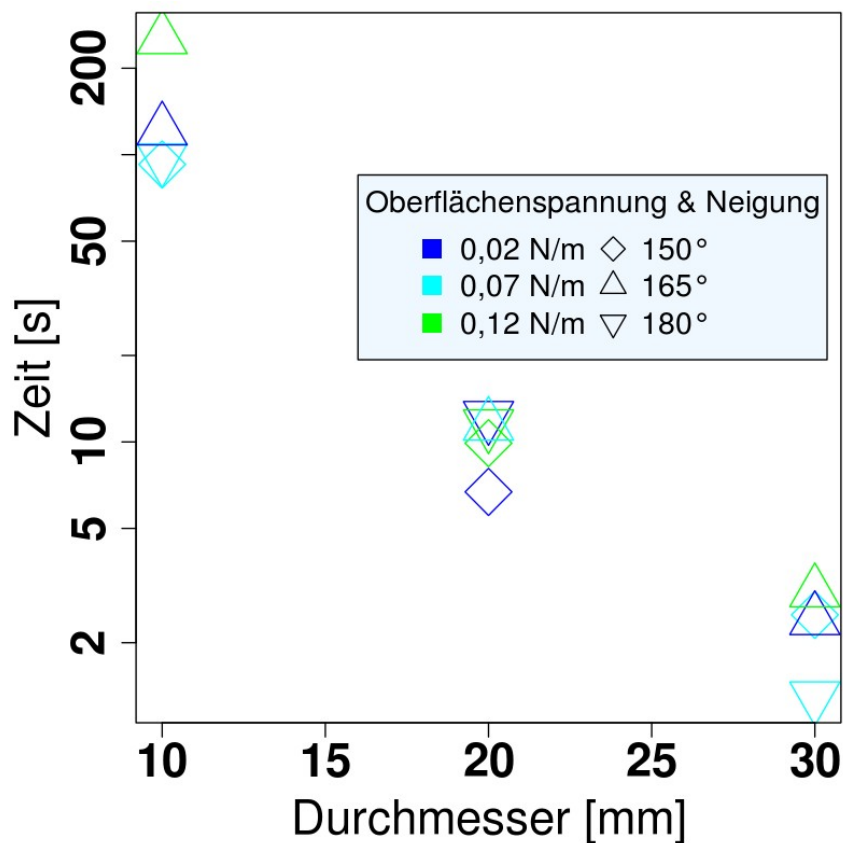


Abbildung 67: Effekt der Mündung (logarithmisch Zeitskala)

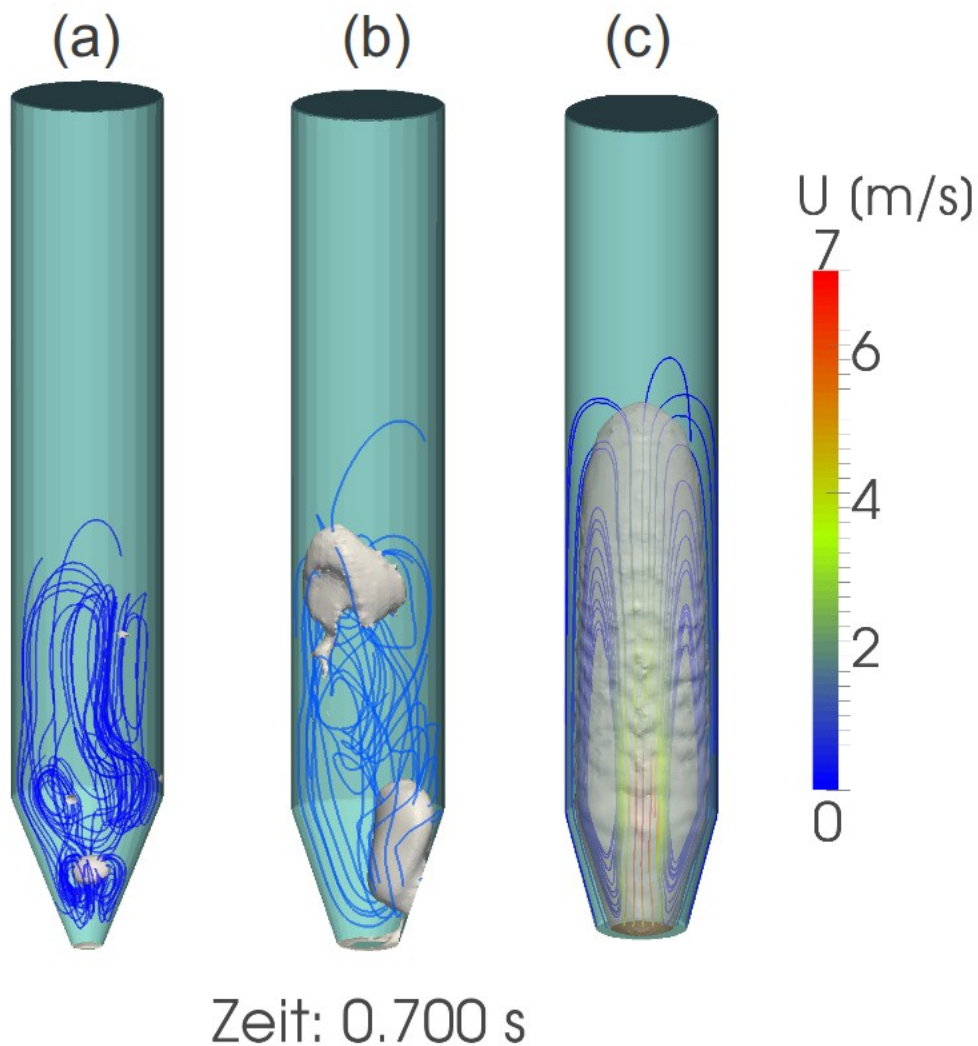


Abbildung 68: Auslaufende Flasche mit verschiedenen Mündungsdurchmessern: a) 10 mm (S1-3), b) 20 mm (S1-10) und c) 30 mm (S1-4)

Die Verkürzung der Auslaufzeit beruht allerdings nicht nur auf einer Vergrößerung der Fläche der Mündung, sondern auch auf einem veränderten Strömungsbild. Abb. 68 zeigt, wie sich das Strömungsbild in der Flasche für ein festen Zeitpunkt (0,7 s) bei unterschiedlichen Mündungsdurchmessern verhält. In Abb. 68a sind nur kleine Luftblasen zu sehen und die Strömungsgeschwindigkeit tendiert gegen 0. In Abb. 68b hingegen sind die aufsteigenden Luftblasen schon deutlich größer und die Geschwindigkeit der Strömung ist leicht erhöht. In Abb. 68c ist ein völlig anderes Strömungsbild zu erkennen. Abb. 68c zeigt eine einzelne aufsteigende Blase, die an den Rändern von Flüssigkeit umströmt wird. Streng genommen kann in Abb. 68c nicht von einer Blase gesprochen werden, da kein Abschluss zur Umgebung erfolgt. Die Geschwindigkeiten, insbesondere in der Mitte der einströmenden Luft, erreichen deutlich höhere Werte als in den Szenarien mit geringerem Mündungsdurchmesser.

Ergebnisse

Das veränderte Strömungsbild lässt sich nicht nur visuell belegen, sondern führt auch zu anderen Druckverhältnissen in der Flasche. Abb. 69 zeigt den Druckverlauf für drei auslaufende Flaschen in der senkrechten Position bei verschiedenen Mündungsdurchmessern. Bei dem größten Mündungsdurchmesser von 30 mm fällt der Druck am Anfang stark ab und normalisiert sich dann wieder auf das Niveau der Umgebung

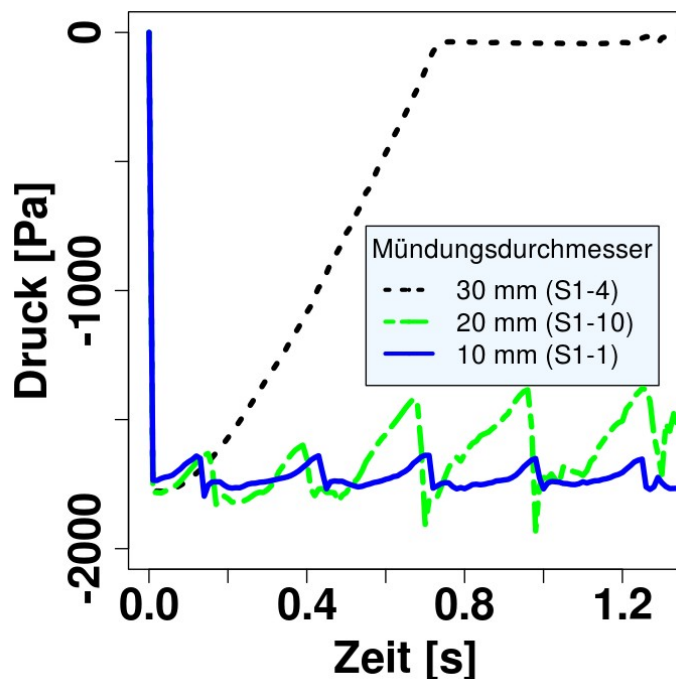


Abbildung 69: Druck am Boden der Flasche, während des Auslaufens (logarithmisch Druckskala)

lange bevor der Prozess beendet ist. Dies ist möglich, da sich in der großen Öffnung eine gegengerichtete Strömung ausbildet. Die Luft strömt ein, während das Wasser ausströmt. Beide Phasen können ungehindert aneinander vorbei fließen. Im Gegensatz dazu bildet sich bei einem Mündungsdurchmesser von 10 und 20 mm nach dem Druckabfall am Anfang, der die gleiche Größenordnung hat wie bei einem 30 mm weiten Durchmesser, ein oszillierendes Strömungsbild aus. Hierbei korreliert der Umfang der Amplitude mit der Größe der Mündung. Dies ist in der Größe der aufsteigenden Blasen begründet. Bei einem größeren Durchmesser steigen größere Blasen auf als bei kleinerem Durchmesser, welche zu stärkeren Druckschwankungen führen.

5.2.1.2 Neigung der Flasche

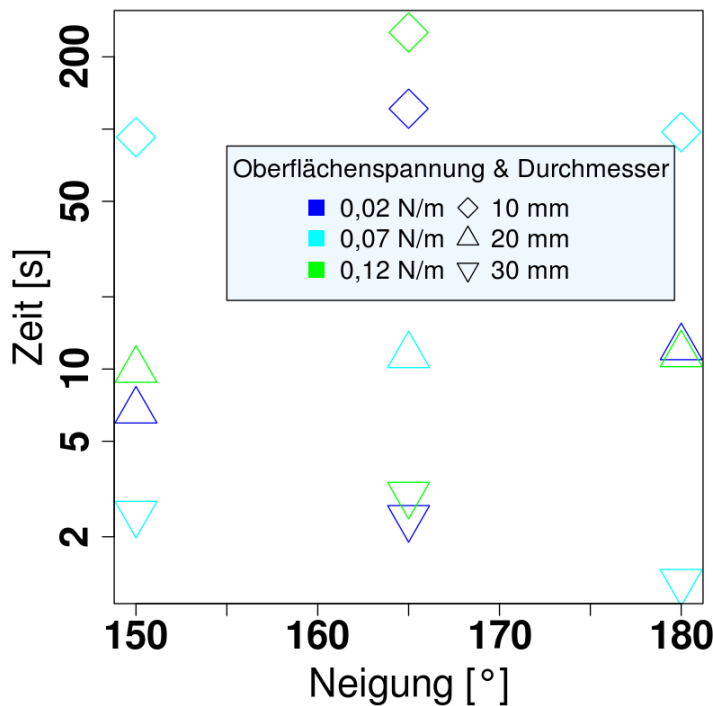


Abbildung 70: Effekte der Neigung (logarithmisch Zeitskala)

Abb. 70, welche die Ergebnisse aller Simulationen der Studie 1 zusammenfasst, setzt die Neigung in Bezug zur Entleerungsdauer. Die Simulationen lassen in dieser Abbildung keine direkte Korrelation zwischen der Entleerungsdauer und der Neigung erkennen. Daher werden in Abb. 71 drei Simulationspaare verglichen, welche bis auf die Neigung identisch sind.

Der Vergleich in Abb. 71 macht deutlich, dass ein Einfluss durch die Neigung besteht, welcher die Auslaufzeit je nach Rahmenparameter verlängert oder verkürzt. Im folgenden werden zwei Szenarien betrachtet, bei denen die Neigung unterschiedliche Effekte hat. Die genaue Analyse dieses Phänomens, die auf die Wechselwirkungen zwischen mehreren Parametern zurückzuführen sind, erfolgen in 5.2.1.4.

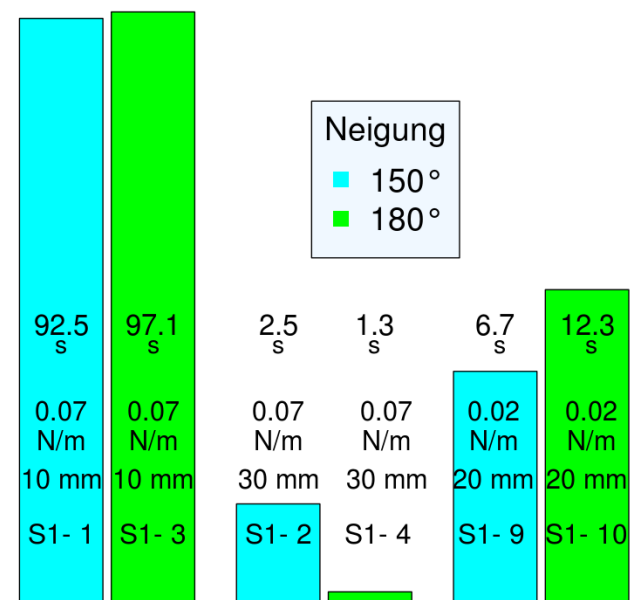


Abbildung 71: Vergleich von Simulationen mit verschiedenen Neigungswinkeln

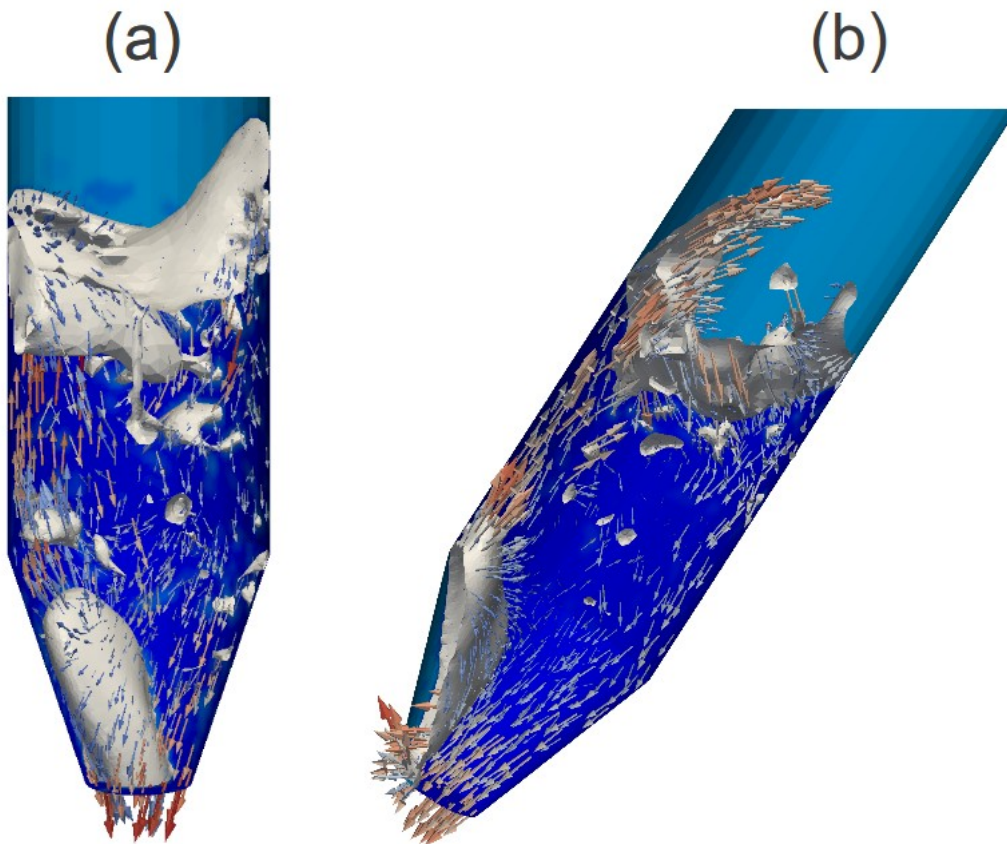


Abbildung 72: auslaufende Flasche: a) 180°-Position (S1-10) und b) 150°-Position (S1-9)

Bei der Betrachtung von Abb. 72 lässt sich erkennen, dass die Neigung das Strömungsbild in der Flasche deutlich verändert. Die Flasche läuft gekippt schneller leer. Die abgebildeten Simulationen zeigen den Vergleich von S1-9 und S1-10, der auch in Abb. 71 dargestellt ist. Beide Simulationen sind bis auf die Neigung identisch. In der geneigten Flasche in Abb. 72b bilden sich durch den Dichteunterschied der beiden Stoffe, Wasser und Luft, verschiedene Strömungen aus. An der linken Flaschenwand in der Abb. 72b steigen die Blasen auf, während das Wasser im unteren rechten Bereich ungehindert abfließen kann. Im Gegensatz dazu ist das Strömungsbild in der senkrechten Flasche, Abb. 72a, deutlich chaotischer, da die Luftblasen nicht immer an der gleichen Stelle nach oben steigen. In der Abb. 72a ist zu erkennen, dass sich keine eindeutigen Zonen bilden, wie bei der gekippten Flasche. Die gleichmäßige Strömung in der geneigten Flasche führt in diesem Fall zu einer um 45 % reduzierten Auslaufzeit. Allerdings ist diese Reduktion der Auslaufzeit nicht bei allen Simulationen zu beobachten und hängt maßgeblich von anderen Faktoren ab, wie das folgende Beispiel belegt.

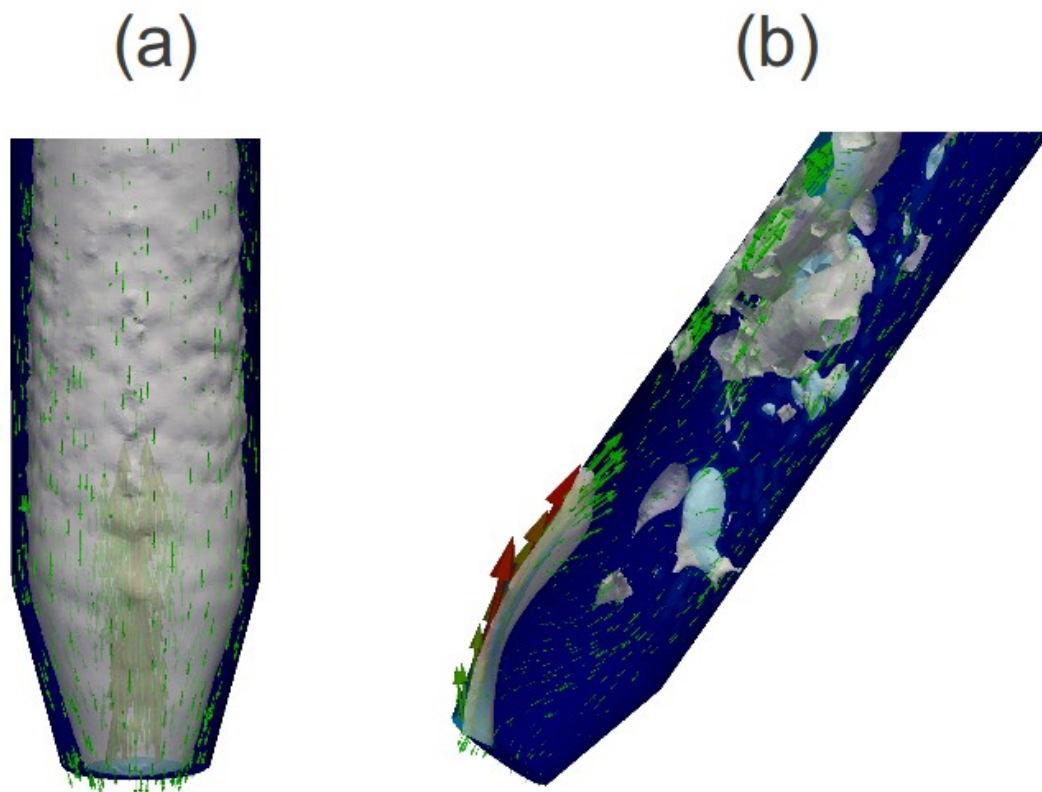


Abbildung 73: auslaufende Flasche: a) 180°-Position (S1-4) und b) 150°-Position (S1-2)

Abb. 73 zeigt ähnliche Szenarien wie die vorherige Abb. 72. Eine Flasche in 180°-Position wird mit der gleichen Flasche in 150°-Position verglichen. Der einzige Unterschied ist, dass die Flasche einen erweiterten Mündungsdurchmesser von 30 mm hat. Das Strömungsbild in Abb. 73b stimmt weitestgehend mit Abb. 72b überein; die Luftblasen steigen am linken Rand der Flasche auf, während das Wasser die Flasche zum größten Teil am tiefer gelegenen Rand der Mündung verlässt. Das Strömungsbild in Abb. 73a unterscheidet sich jedoch deutlich von dem in 72b, obwohl beide Grafiken die Flasche in aufrechter Position zeigen. Der große Mündungsdurchmesser führt dazu, dass die Luft kontinuierlich einströmt, wobei das Wasser gleichmäßig am Rand der Flasche entlang ausfließt, wie bereits in 5.2.1.1 beschrieben. Dieser kontinuierliche Fluss kann aber in der gekippten Variante nicht aufrecht erhalten werden. Eine oszillierendes Strömungsbild entsteht, wie es eigentlich für kleinere Mündung typisch ist. Vermutlich ist die zur Beschleunigungsrichtung ausgerichtete Fläche, welche durch die Neigung kleiner wird, die Ursache. Durch die Neigung der Flasche verlängert sich die Leerungszeit um 92 %.

5.2.1.3 Oberflächenspannung

Abb. 74 gibt einen Überblick der Auslaufzeit in Bezug zur Oberflächenspannung für alle 13 Simulationen. Der Durchmesser ist durch Farben gekennzeichnet, während die Neigung mittels geometrischer Symbole verdeutlicht wird. Abb. 74 lässt aber kaum erkennen, welche Auswirkung die Oberflächenspannung tatsächlich hat. Daher wird in Abb. 75 wie bei der Neigung ein Vergleich von drei Simulationspaaren durchgeführt, die jeweils bis auf die Oberflächenspannung identisch sind.

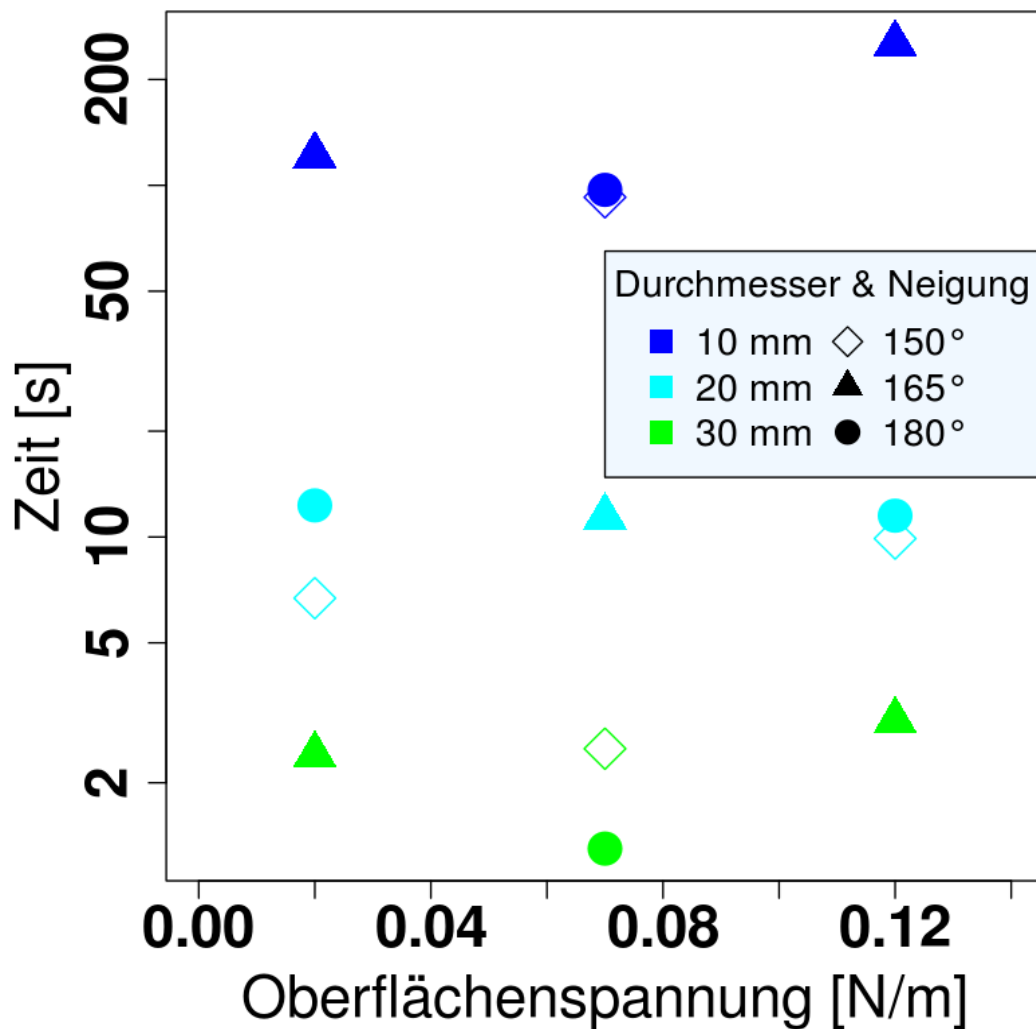


Abbildung 74: Effekt der Oberflächenspannung auf die Auslaufzeit (logarithmisch Zeitskala)

Durch Abb. 75 wird deutlich, dass die Oberflächenspannung zwischen zwei Stoffen einen erheblichen Einfluss auf die Dauer der Entleerung haben kann, wobei jedoch keine klare Tendenz zu erkennen ist, ob sie verlängern oder verkürzen wirkt. Der Vergleich von Simulation S1-5 und S1-7 in Abb. 75, beide mit Neigung 165° und mit Mündungsdurchmesser 10 mm, belegt im Besonderen, dass die von $0,02 \text{ N/m}$ auf $0,12 \text{ N/m}$ gestiegene Oberflächenspannung die Dauer des Prozesses mehr als

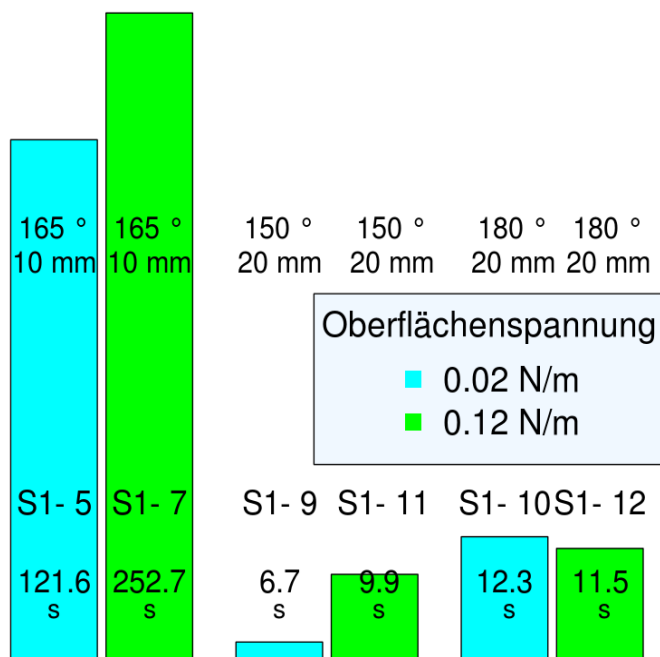


Abbildung 75: direkter Vergleich einzelner Simulationen bei verschiedenen Oberflächenspannungen (logarithmisch Skala)

verdoppelt. Der Vergleich von S1-9 zu S1-11, beide in 150° -Position und mit Mündungsdurchmesser 20 mm, zeigt einen Anstieg um etwa 30 % durch die höhere Oberflächenspannung. Im Gegensatz dazu belegt der Vergleich von S1-10 zu S1-12, dass eine höhere Oberflächenspannung auch zu einer geringeren Prozesszeit führen kann.

Die Oberflächenspannung ist die Kraft, die an der Phasengrenze zwischen zwei Stoffen anliegt und den

Oberflächenverlauf beeinflusst. Eine höhere Oberflächenspannung [N/m] hat so zur Folge, dass mehr Kraft nötig ist, um die Fläche zwischen den zwei Stoffen, hier Luft und Wasser, zu vergrößern. Diese Tatsache lässt vermuten, dass sich bei einer höheren Oberflächenspannung die Größe der aufsteigenden Luftblasen ändert, da eine stärkere Kraft bei der Blasenbildung entgegenwirkt. Diese Vermutung war ebenso wenig beweisbar, wie die Vermutung, dass sich die Blasenform verändert.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass aus Abb. 75 keine klare Tendenz bzgl. der Oberflächenspannung zu erkennen ist, da sich die geänderte Oberflächenspannung sowohl verlängern als auch verkürzen kann. Der Effekt hängt ganz entscheidend von der Interaktion mit anderen Parametern ab. Deshalb wird er im folgenden Abschnitt (5.2.1.4) genauer betrachtet.

5.2.1.4 Interaktion der Parameter

Die Untersuchung der einzelnen Einflussgrößen zeigte bereits, dass die Parameter Oberflächenspannung und Neigung einen erheblichen Einfluss haben. Wie hoch der Einfluss tatsächlich ist, konnte jedoch nicht genau bestimmt werden, da er stark von der Interaktion mit den anderen Parametern abhängt. Zur Visualisierung der Wechselwirkung werden *Response-Surface Diagrams* (engl.) verwendet. Diese beruhen auf Gl. 77 (2. Ordnung). Allerdings ist zu berücksichtigen, dass die verwendeten Grafiken nur Tendenzen aufzeigen können, da die zugrunde liegende Gl. 77 nicht statistisch abgesichert ist. Die prognostizierten Werte sollten dementsprechend nicht überbewertet werden. So ist z. B. fraglich, ob Auslaufzeiten von unter 1 s realisierbar sind, da in keiner Simulation geringere Werte als 1,3 s erreicht werden konnten. Die errechneten Minimalwerte sind aber ein guter Indikator, in welchem Bereich das Minimum zu finden ist, auch wenn es knapp über 1 s liegt.

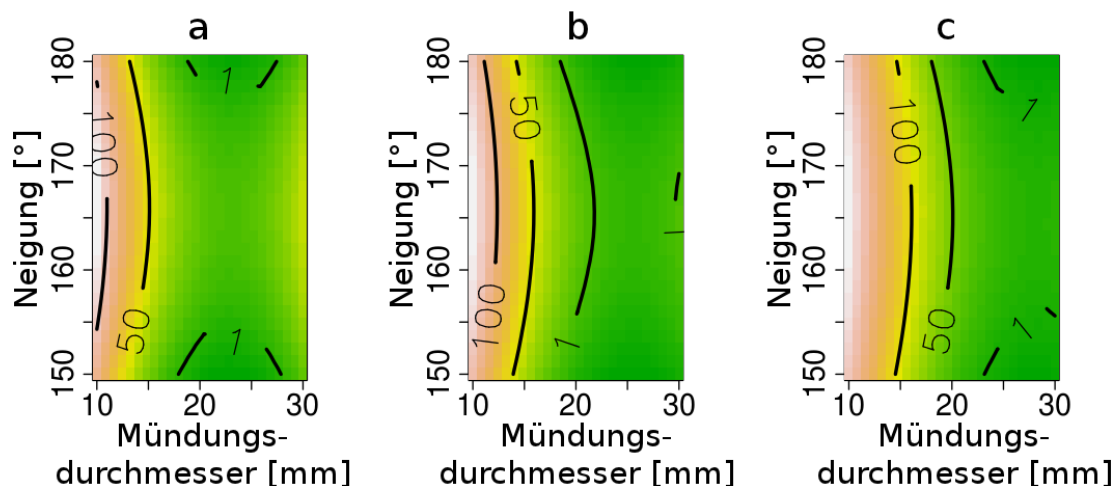


Abbildung 76: Einfluss von Neigung und Mündungsdurchmesser auf die Auslaufzeit [s] (Höhenlinien). Oberflächenspannung in den Diagrammen a) 0,02, b) 0,07 und c) 0,12 N/m

Abb. 76 zeigt die prognostizierte Auslaufzeit [s] für die Kombination aus Mündungsdurchmesser und Neigung bei drei verschiedenen Oberflächenspannungen (a) 0,02, b) 0,07 und c) 0,12 N/m. Bei der Betrachtung von Abb. 76a, 76b und 76c wird deutlich, dass alle drei Faktoren interagieren.

Abb. 76a- 76c bestätigen, dass der Mündungsdurchmesser einen erheblichen Einfluss auf die Dauer des Auslaufprozesses hat. Insbesondere bei einem Mündungsdurchmesser unterhalb von 20 mm ist ein starker Anstieg der Prozesszeit zu erkennen. Dieser Anstieg vergrößert sich bei höherer Oberflächenspannung. In Abb. 76a mit Oberflächenspannung 0,02 N/m liegt die 50 s Höhenlinie bei etwa

15 mm, während die 50 s Höhenlinie in Abb. 76c erst bei einem Mündungsdurchmesser von 20 mm erreicht ist. Der Einfluss der Neigung ist für alle in Abb. 76 betrachteten Fälle ähnlich. Eine Neigung von etwa 165° verlängert den Prozess, wohingegen sowohl eine Steigerung als auch eine Reduktion der Neigung die Prozesszeit verkürzen.

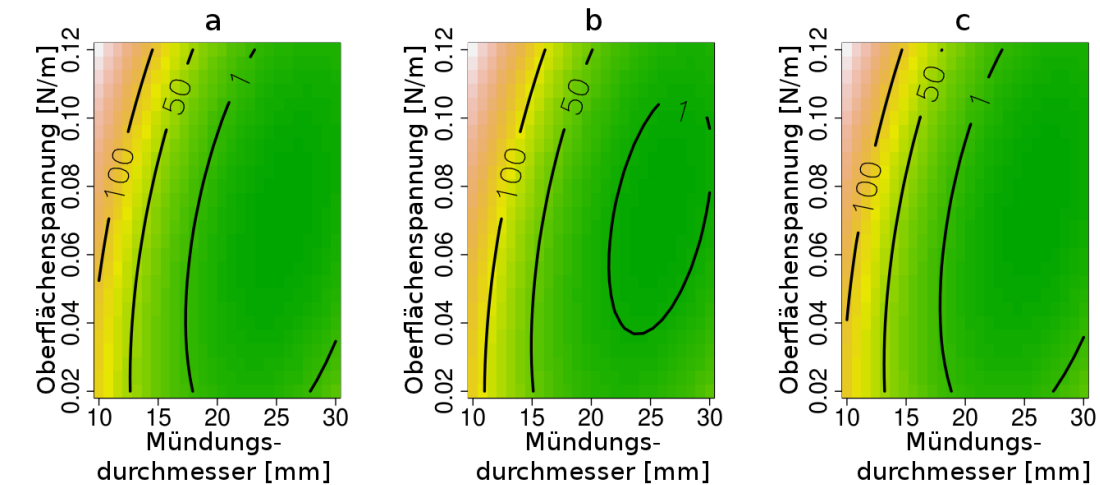


Abbildung 77: RSD für Mündungsdurchmesser und Oberflächenspannung auf die Auslaufzeit [s] für Neigung a) 150° , b) 165° und c) 180°

Abb. 77 zeigt die RSDs für Mündungsdurchmesser und Oberflächenspannung, wenn die Flasche a) 150° , b) 165° und c) 180° geneigt ist. Diese RSDs bestätigen zum einen den starken Einfluss des Mündungsdurchmessers. Zum anderen zeigt sich noch einmal, dass die Auslaufzeiten bei einer Neigung von 180° und 150° fast gleich lang sind, wie bereits in Abb. 76 erkannt werden konnte. Grafiken 77a und 77c stimmen fast genau überein. Abb. 77b weicht hingegen etwas von diesen beiden Grafiken ab. Während die kürzeste Auslaufzeit (prognostizierte Dauer von unter einer Sekunde) bei Neigungswinkeln von 150° (77a) und 180° (77c) fast unabhängig von der Oberflächenspannung ist, ist die Oberflächenspannung bei 165° (77b) entscheidend. In Abb. 77b kann eine Auslaufzeit von unter einer Sekunde nur bei einer Oberflächenspannung zwischen 0,04 N/m und 0,10 N/m erreicht werden. Insgesamt weisen die Abb. 77a - 77c viele Gemeinsamkeiten auf. Die maximale Leerungszeit ist immer am rechten oberen Rand zu finden, während die minimale Leerungszeit immer um den Punkt von 25 mm Mündungsdurchmesser und 0,07 N/m Oberflächenspannung angesiedelt ist. Diese Gemeinsamkeiten legen die Vermutung nahe, dass der Einfluss der Oberflächenspannung als gering einzustufen ist.

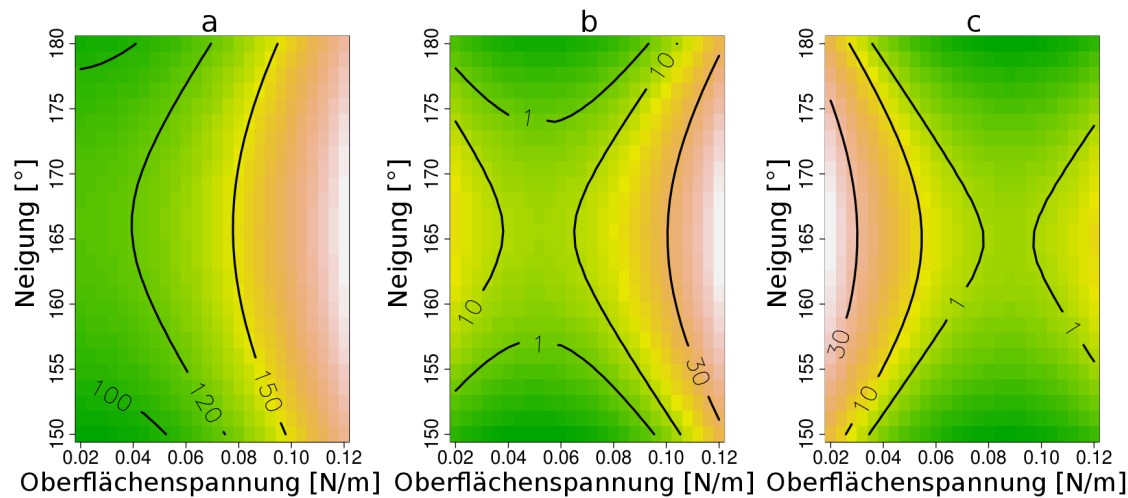


Abbildung 78: Response-Surface Diagramme der Wechselwirkung von Neigung-Oberflächenspannung auf die Auslaufzeit [s] für Mündungsdurchmesser a) 10, b) 20 und c) 30 mm

Abb. 78 zeigt die Wechselwirkungen von Oberflächenspannung und Neigung für einen Mündungsdurchmesser von a) 10, b) 20 oder c) 30 mm. Hierbei wird deutlich, dass sich die Interaktion einzelner Parameter stark verändern kann. In Abb. 78a, Mündungsdurchmesser 10 mm, wird die kürzeste Auslaufzeit bei der geringsten Oberflächenspannung erreicht. In Abb. 78c, Mündungsdurchmesser 30, würde die geringste Oberflächenspannung hingegen zu der längsten Auslaufzeit führen. Die Ursache hierfür konnte in den Studien nicht gefunden werden. Bei dem Vergleich der Grafiken 78a- 78c werden zudem die Unterschiede bzgl. des Optimums klar. Die untersuchte Flasche mit einem Mündungsdurchmesser von 10 mm (78a) kann im besten Fall in 100 Sekunden leer sein, während sie mit einem Mündungsdurchmesser von 20 mm oder mehr (78b und 78c) in unter einer Sekunde leer ist.

Die Untersuchung der Interaktion der Parameter zeigt auf, wie komplex das System einer auslaufenden Flasche ist. Die auftretenden Effekte können zwar durch die RSDs nicht geklärt werden, aber eine Quantifizierung des Einflusses der Faktoren ist möglich. Besonders durch die RSD lässt sich beschreiben, wie z. B. eine geänderte Oberflächenspannung die Auslaufzeit verändert. Die reine Quantifizierung ist aus wissenschaftlicher Sicht zwar unbefriedigend, da auf die Frage, was die Unterschiede auslöst, zum Teil keine Antwort gegeben werden kann. Da die beeinflussenden Faktoren sichtbar werden kann das Ziel, Flaschenformen zu optimieren, auf diese Weise jedoch erreicht werden.

5.2.2 Studie 2

Bei der 2. Studie steht die Untersuchung geometrischer Parameter der Flasche im Fokus. Die Parameter Mündungsdurchmesser, Tiefe der Einbuchtung und Halsform werden auf ihren Effekt bezüglich der Auslaufzeit der Flasche untersucht. Der Aufbau der gesamten Studie ist in 4.4.3 dargestellt und Abb. 79 zeigt die Zusammenfassung der Simulationsergebnisse. Eine genaue Betrachtung der Effekte der einzelnen Parameter und deren Wechselwirkungen ist in den folgenden Abschnitten dargestellt.

	Mündungs- durchmesser	Einbuchtung	Halsform	Dauer der Entleerung
S2- 1	15 mm	25 %	1	32.5 s
S2- 2	25 mm	25 %	1	9.62 s
S2- 3	15 mm	25 %	3	35.63 s
S2- 4	25 mm	25 %	3	7.93 s
S2- 5	15 mm	0 %	2	25.03 s
S2- 6	25 mm	0 %	2	4.2 s
S2- 7	15 mm	50 %	2	16.91 s
S2- 8	25 mm	50 %	2	5.1 s
S2- 9	20 mm	0 %	1	9.66 s
S2- 10	20 mm	0 %	3	13.84 s
S2- 11	20 mm	50 %	1	9.9 s
S2- 12	20 mm	50 %	3	13.54 s
S2- 13	20 mm	25 %	2	7.16 s

Abbildung 79: Ergebnisse der Simulationen S2 (Halsform: (1) ohne Hals, (2) Kegelstumpf und (3) Rohr)

Abb. 80 zeigt die (a) schnellst (S2- 6) und (b) langsamst (S2- 3) zu leerende Flaschen der Studie 2. Die Flaschen unterscheiden sich in fast allen Parametern. Flasche S2- 6 (Abb. 80a) hat einen Mündungsdurchmesser von 25 mm, keine Einbuchtung, und einen kegelstumpfförmigen Hals, während sich S2- 3 (Abb. 80b) durch einen Mündungsdurchmesser von 15 mm, eine 25 % Einbuchtung, und einen röhrenförmigen Hals auszeichnet.

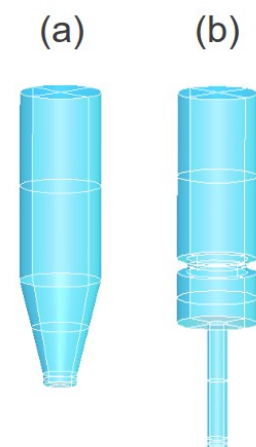


Abbildung 80: Flasche
a) S2- 6 und b) S2- 3

Ergebnisse

Um die einzelnen Parameter und deren Interaktionen besser untersuchen zu können, werden wieder die aus Studie 1 bekannten Metamodelle, welche aus der Regression resultieren, erstellt und verwendet. Aus den in den Simulationen gewonnenen Auslaufzeiten lässt sich ein Metamodell auf Basis eines Polynoms 1. und 2. Ordnung bilden. In den Modellen entspricht die unabhängige Variable x_4 dem Mündungsdurchmesser, x_5 der Halsform und x_6 der Einbuchtung. Das Modell 1. Ordnung ist in Gl. 78 dargestellt. Gl. 78 (Regression Anhang A 2.1) ist auch die Basis des *Response-Surface* in Abb. 81. Der Determinationskoeffizient (R^2) für Gl. 78 ist 0,70 und für Gl. 79 0,96 (*adjusted* R^2 Gl. 78 0,61 und für Gl. 79 0,83).

$y = 5,5 \cdot 10^1 - 2,1 \cdot x_4 + 1,2 \cdot x_5 - 3,6 \cdot x_6$	(78)
$y = 1,9 \cdot 10^2 - 1,4 \cdot 10^1 \cdot x_4 - 2,0 \cdot 10^1 \cdot x_5 - 2,3 \cdot 10^1 \cdot x_6 - 2,4 \cdot 10^{-1} \cdot x_4 x_5 + 1,8 \cdot x_4 x_6 - 5,4 \cdot 10^{-1} \cdot x_5 x_6 + 3,1 \cdot 10^{-1} \cdot x_4^2 + 6,6 \cdot x_5^2 - 3,2 \cdot 10^1 \cdot x_6^2$	(79)

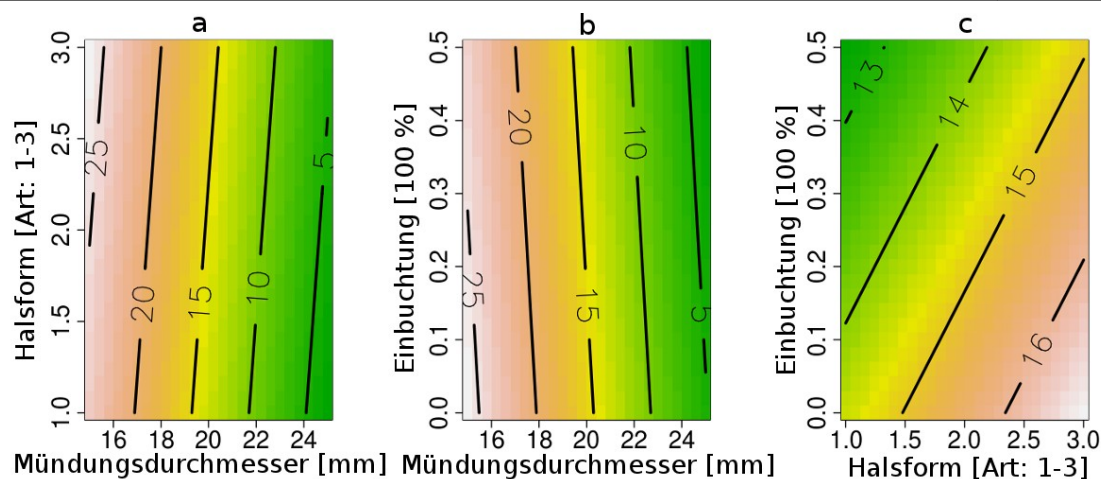


Abbildung 81: *Response-Surface* für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 1. Ordnung (Gl. 78); a) Einbuchtung 25 %, b) Halsform 2, c) Mündungsdurchmesser 20 mm

Der fast senkrechte Verlauf der Höhenlinien in Abb. 81a und 81b zeigt deutlich, dass bei der ausschließlichen Berücksichtigung der direkten Effekte der Mündungsdurchmesser, wie bereits in der Studie 1 (5.2.1), sehr dominant ist. Die direkten Effekte alleine geben aber die Zusammenhänge nur unzureichend wieder, da sie wichtige Aspekte vernachlässigen. Dies wird deutlich beim Vergleich mit Abb. 82. Die Diagramme in Abb. 82 basieren auf Gl. 79 (Regression Anhang A 2.2), einem Polynom 2. Ordnung, in dem auch die Wechselwirkungen und quadratischen Effekte berücksichtigt sind. Der direkte Vergleich von 81a und 82a zeigt, dass die Halsform über Wechselwirkungen Einfluss auf die Auslaufzeit hat.

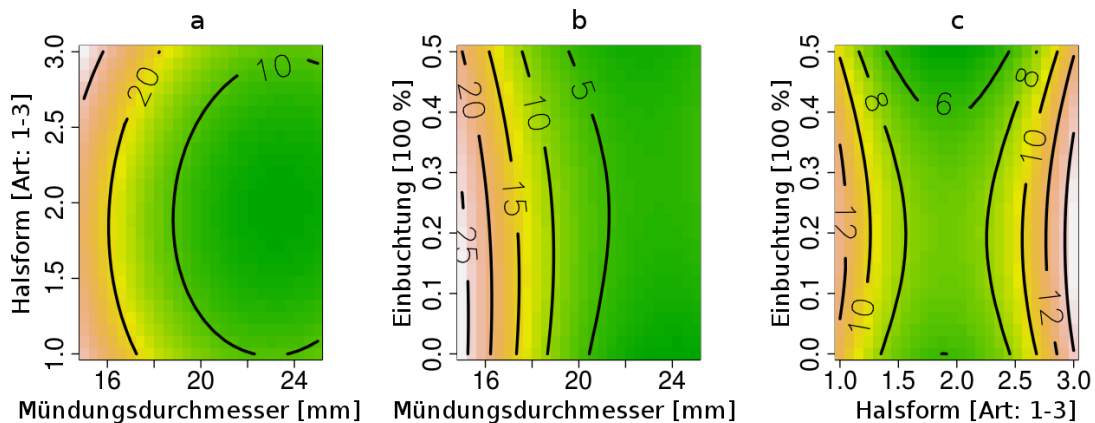


Abbildung 82: Response-Surface für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 2. Ordnung (Gl. 82); a) Einbuchtung 25 %, b) Halsform 2, c) Mündungsdurchmesser 20 mm

Der Unterschied zwischen Abb. 82 und Abb. 83, welche fast gleich sind, ist die Positionierung der Schnittebenen; Abb. 82 schneidet jeweils durch die Mitte des untersuchten Raums {a) Einbuchtung 25 %, b) Halsform 2, c) Mündungsdurchmesser 20 mm}, während Abb. 83 durch den Stagnationspunkt {a) Einbuchtung 23 %, b) Halsform 2, c) Mündungsdurchmesser 28 mm} festgelegt ist. Beide Grafiken zusammen geben einen guten Überblick über den Ergebnisraum. Dadurch wird die Bestimmung der optimalen Konfiguration möglich. Abb. 83a-c zeigen, dass die kürzesten Auslaufzeiten bei Flaschen ohne Einbuchtung, mit kegelstumpf-förmigem Hals und großem Mündungsdurchmesser vorliegen.

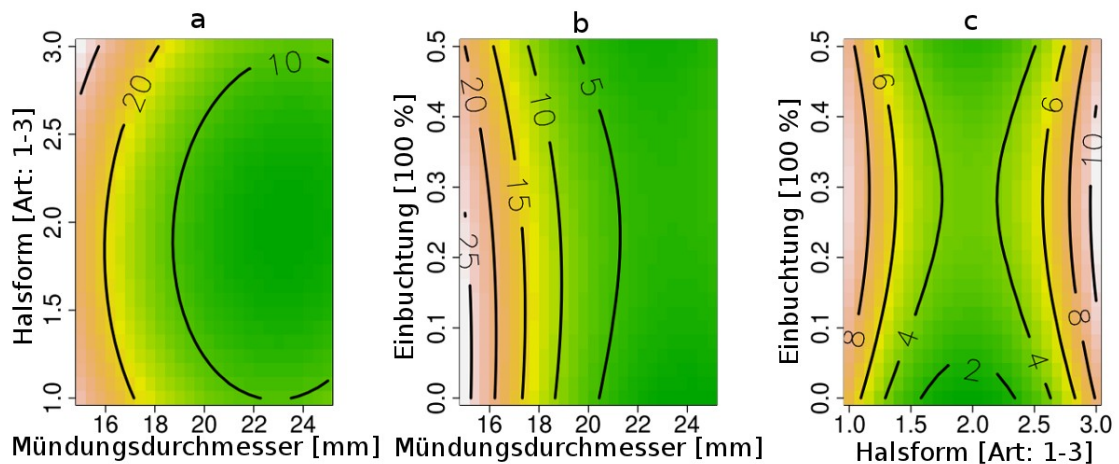


Abbildung 83: Response-Surface für die Auslaufzeit [s] mit Polynom 2. Ordnung (Gl. 82); a) Einbuchtung 23 %, b) Halsform 2, c) Mündungsdurchmesser 28 mm

5.2.2.1 Durchmesser der Mündung

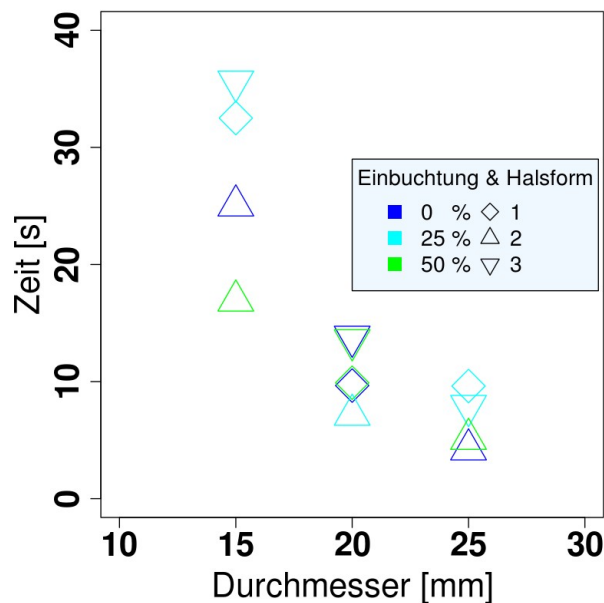


Abbildung 84: Effekt der Mündung auf die Auslaufzeit

Abb. 84 zeigt, dass der Mündungsdurchmesser von entscheidender Bedeutung für die Dauer des Auslaufprozesses ist. Eine Vergrößerung des Mündungsdurchmessers führt direkt zu einer Verkürzung des Auslaufprozesses. Die Ergebnisse stehen somit im Einklang mit den Ergebnissen der Studie 1 (5.2.2.1). Allerdings lassen sich die Unterschiede bei der Auslaufzeit nicht ganz so einfach ablesen wie in Studie 1. Dies ist zum einen darauf zurückzuführen, dass die

Unterschiede zwischen den einzelnen Untersuchungslevels nicht so groß sind. In Studie 2 wird der Mündungsdurchmesser für 15, 20, 25 mm untersucht und nicht für 10, 20 und 30 mm wie in Studie 1, da die meisten verwendeten Flaschen einen derartigen Halsdurchmesser haben. Zum anderen scheinen die übrigen untersuchten Parameter, Halsform und Einbuchtung, einen stärkeren Einfluss zu haben als die Oberflächenspannung und Neigung, welche in Studie 1 untersucht wurden.

Abb. 84 zeigt, dass Flaschen mit einem geringeren Mündungsdurchmesser von nur 20 mm zum Teil schneller leer laufen, als Flaschen mit 25 mm Mündungsdurchmesser, obwohl die Fläche, über die die Flüssigkeit ablaufen kann, um 56,25 % größer ist. Dies erscheint im Hinblick auf die Optimierung des Entleerungsprozesses besonders interessant. In Abb. 84 wird auch deutlich, dass die Reduzierung der Auslaufzeit durch eine Erhöhung des Durchmessers von 15 auf 20 mm wirksamer ist, als die Erhöhung von 20 auf 25 mm, obwohl sich die Fläche im zweiten Fall deutlich vergrößert.

Der Effekt eines weiten Mündungsdurchmessers bleibt trotzdem eindeutig; die Auslaufzeit wird verkürzt. Diese These wird durch den direkten Vergleich von verschiedenen Simulationspaaren in Abb. 85 gestützt. Dort sind alle Parameter bis auf den Mündungsdurchmesser identisch.

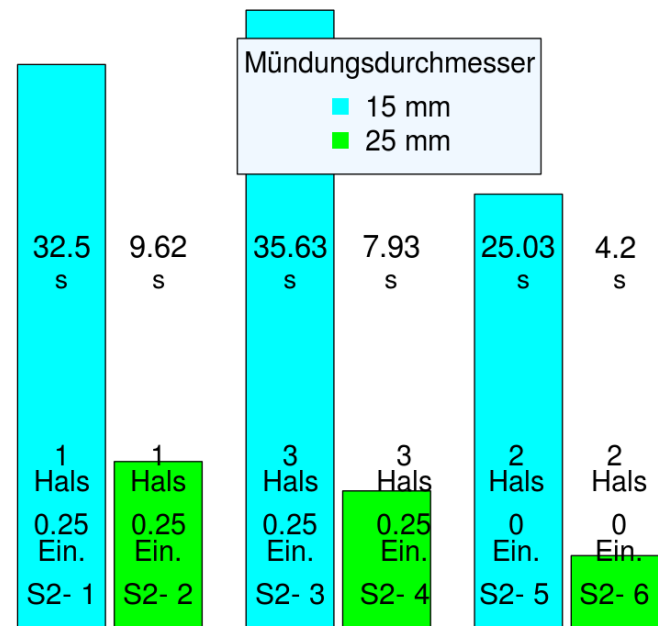


Abbildung 85: Vergleich einer Simulation mit verschiedenen Mündungsdurchmessern

Zudem zeigt Abb. 85, dass weite Mündungsdurchmesser im Vergleich zu engeren eine erhebliche Verkürzung der Entleerungszeit nach sich ziehen. Die genauere Betrachtung der ersten beiden Balkenpaare in Abb. 85 verdeutlicht aber auch, dass der Effekt nicht immer gleich stark ist. Diese Tatsache ist ein Indiz für die vorhandene Interaktion mit anderen Parametern, die in 5.2.2.4 ausführlich erörtert wird.

5.2.2.2 Halsform

In Studie 2 werden drei unterschiedliche Halsformen auf ihre Wirkung bezüglich der Auslaufzeit untersucht: „ohne Hals“ (1), „Kegelstumpf“ (2) und „Rohr“ (3). Abb. 86 gibt einen Überblick über alle Ergebnisse in Bezug zur Halsform und legt nahe, dass vor allem der kegelstumpfförmige Hals (2) ein schnelles Auslaufen der Flasche begünstigt.

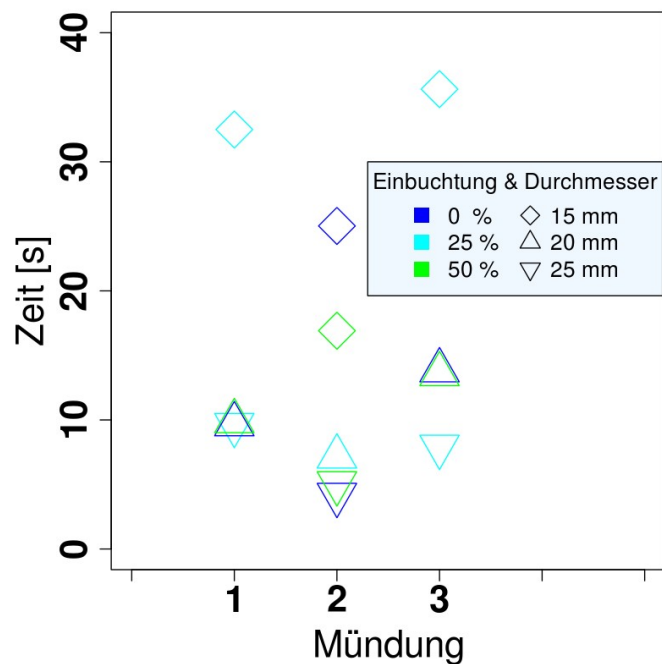


Abbildung 86: Übersicht über alle Simulation mit verschiedenen Halsformen [1) „ohne Hals“, 2) „Kegelstumpf“ und 3) „Rohr“] der Studie 2

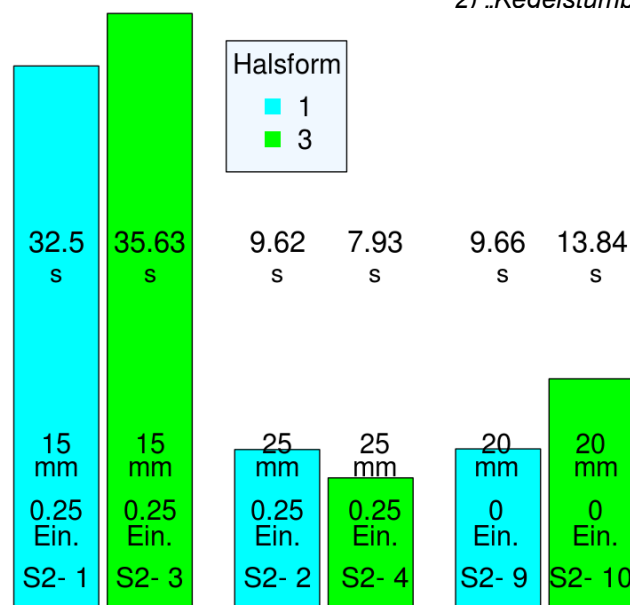


Abbildung 87: Vergleich einer Simulation mit verschiedenen Halsformen

Der direkte Vergleich in Abb. 87 der Flaschen, die sich bis auf die Halsform gleichen, ist nur mit den Halsformen 1 und 3 möglich. Da bedingt durch das Versuchsdesign, ein direkter Vergleich des kegelförmigen Halses (Halsform 2) mit anderen Halsformen nicht durchführbar ist, weil ein Versuch, der sich nur in der Halsform unterscheidet, fehlt. Aus der Abb. 87 lässt sich kein eindeutiger Effekt der Halsform, der sich verkürzend oder verlängernd auf die

Auslaufzeit wirkt, erkennen. Halsform 1 führt bei einem Mündungsdurchmesser von 15 mm und 20 mm zu einer kürzeren Auslaufzeit. Bei 25 mm Durchmesser läuft die Flasche mit Halsform 3 hingegen schneller leer.

Abb. 88 zeigt den Vergleich von verschiedenen Flaschen mit gleichem Mündungsdurchmesser von 25 mm, die unterschiedliche Halsformen aufweisen. Die Stromlinien, welche den Verlauf der Strömung beschreiben, lassen keinen Rückschluss zu, welche Flaschenhalsform besser geeignet ist. Weder sind Bereiche identifizierbar, in denen besonders hohe Geschwindigkeiten in Auslaufrichtung auftreten noch existieren andere Indikatoren dafür, welche Halsform besser ist. Daher bleibt diese Frage vorerst unbeantwortet und wird weiter mit RSDs im folgenden Abschnitt untersucht.

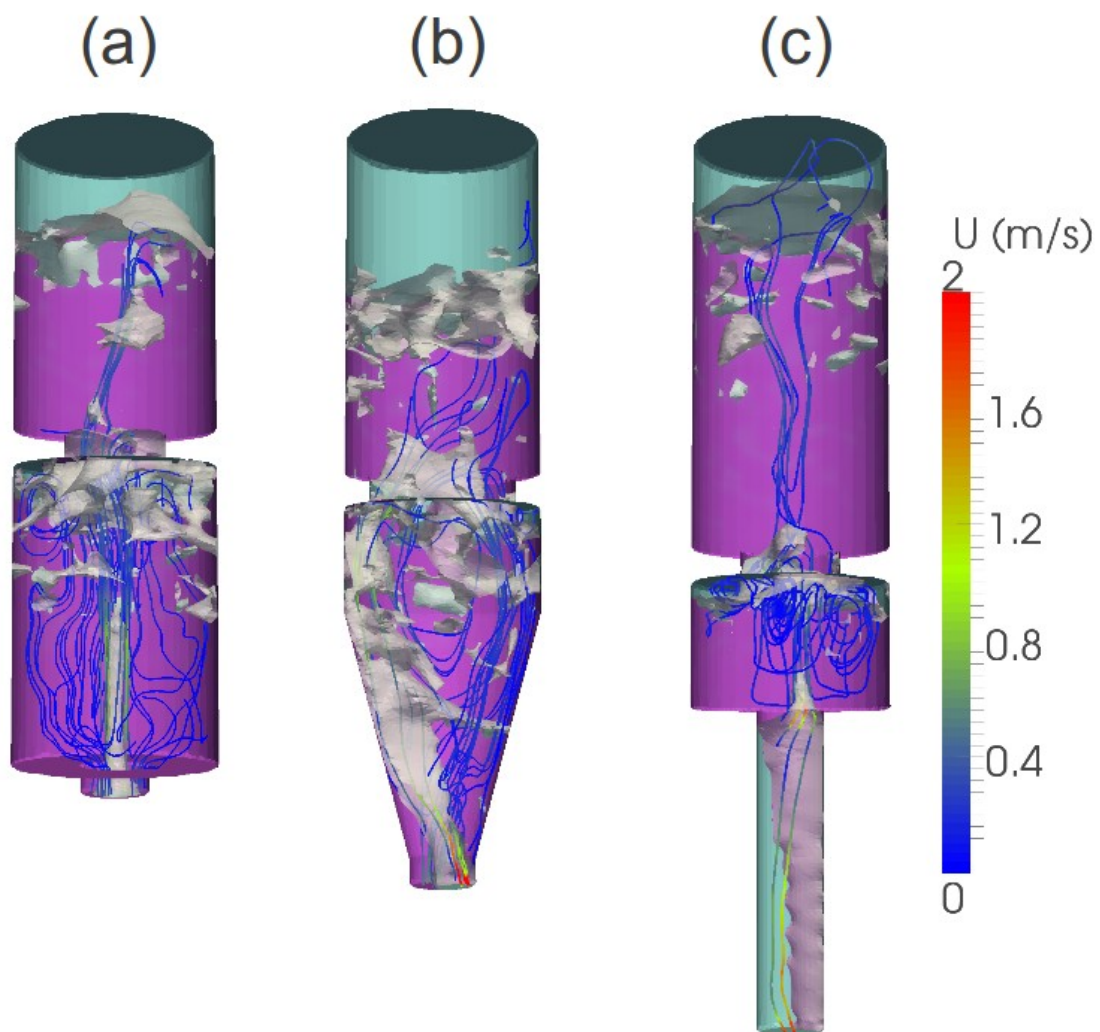


Abbildung 88: Vergleich von verschiedenen Flaschen mit unterschiedlichen Halsform: a) S2-11, b) S2-13 und c) S2-12

5.2.2.3 Einbuchtung der Flasche

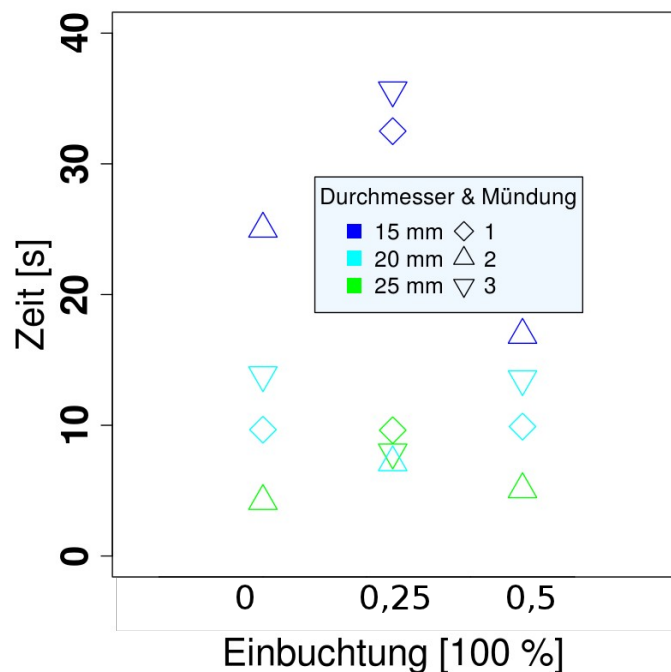


Abbildung 89: Übersicht über alle Simulationen mit verschiedenen Einbuchtungstiefen der Studie 2

keinen eindeutigen Einfluss der Einbuchtung auf die Auslaufzeit erkennen. Daher werden in Abb. 90 wieder Flaschenformen miteinander verglichen, die bis auf die Einbuchtung identisch sind.

Abb. 90 zeigt, dass die Einbuchtung großen Einfluss auf die Auslaufzeit nehmen kann. Im Vergleich von S2-5 mit S2-7 wird deutlich, dass eine geänderte Einbuchtung bei gleicher Halsform und gleichem Mündungsdurchmesser die Auslaufzeit deutlich reduziert. Allerdings tritt diese Verkürzung nur unter bestimmten Voraussetzungen (im folgenden genauer diskutiert) auf, wie der Vergleich von S2-9 mit S2-11 zeigt. Dort hat die veränderte Einbuchtung

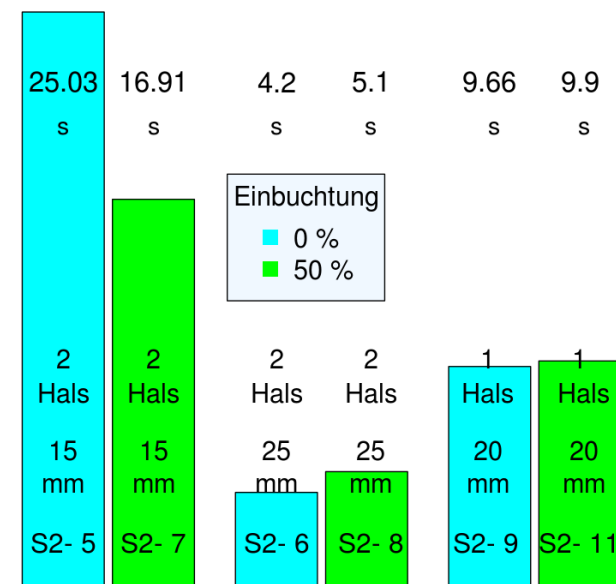


Abbildung 90: Vergleich von Simulationen mit verschiedenen Einbuchtungen

fast keinen Effekt. Das war allerdings zu erwarten, da die Mündung einen deutlich

geringeren Durchmesser als die durch die Einbuchtung entstehende Engstelle aufweist.

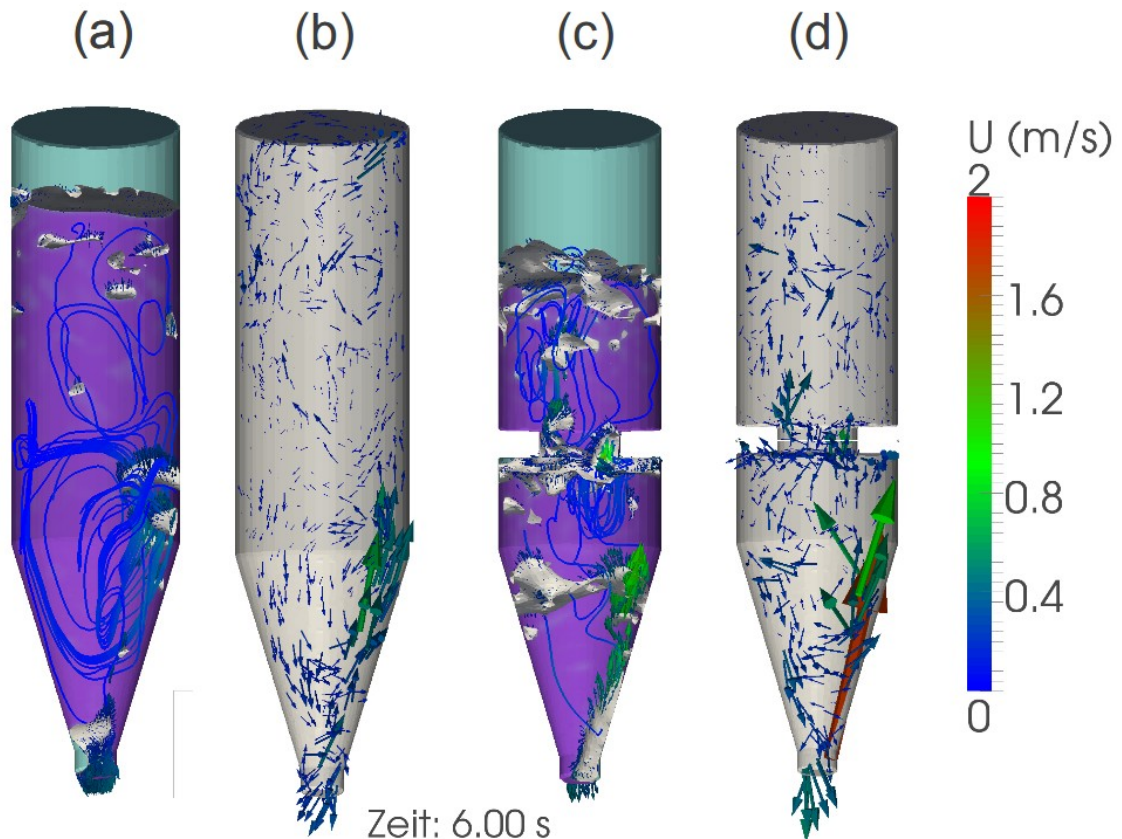


Abbildung 91: Vergleich von zwei verschiedenen Einbuchtungstiefen (0 % (a und b) und 50 % (c und d)): a) Phasenverteilung und Stromlinien (S2- 5), b) Geschwindigkeitspfeile (S2- 5) c) Phasenverteilung und Stromlinien (S2- 7) und d) Geschwindigkeitspfeile (S2-7)

Die genauere Untersuchung von S2-5 und S2-7 in Abb. 91 gibt kaum Hinweise auf die Ursache, warum die Flasche mit der tiefen Einbuchtung (Abb. 91c) schneller leer läuft, als die Flasche ohne Einbuchtung (Abb. 91a), da die Strömungen mit Ausnahme der Engstelle sehr ähnlich aussehen. Einzig aus Abb. 91b und Abb. 91d ist eine mögliche Tendenz zu erkennen. Die Geschwindigkeitspfeile, welche mit der Strömungsstärke und -richtung an der jeweiligen Stelle korrespondieren, lassen vermuten, dass die Geschwindigkeit durch die Engstelle in der Mitte der Flasche gesteigert wird, was aufgrund des trichterförmigen Halses zu einer schnelleren Entleerung der Flasche führt. Dieser Effekt scheint aber nur bei einem geringen Mündungsdurchmesser von 15 mm aufzutreten, s. Abb. 90. Der Abb. 90 lassen sich auch die Ergebnisse der Simulationen S2- 6 und S2- 8 entnehmen. Die dort verwendeten Flaschen ähneln denen in Abb. 91 sehr, nur dass erstere eine breitere Mündung von 25 mm Durchmesser haben. In diesen Szenarien läuft die Flasche schneller leer.

Ergebnisse

Die in dieser Studie verwendete tiefe Variante der Einbuchtung von 50 % des Durchmessers zieht jedoch ein Problem nach sich, welches in der praktischen Umsetzung bei der Reinigung viel größere Schwierigkeiten bereitet als die reine Auslaufzeit. Da die Einbuchtung eine waagerechte Flächen bildet, wie in Abb. 92 zu sehen ist, kann die Flasche nicht gut, im Einzelfall überhaupt nicht, leer laufen. In diesen Studien wurde die Flasche als leer definiert, wenn bis auf 0,01 % des Volumens nur noch Luft in der Flasche enthalten ist. Für eine genauere Untersuchung der Restwassermenge fehlt die entsprechende Validierung des Modells, so dass fraglich ist, ob die im Modell verwendeten Wandfunktionen, welche das Verhalten an der Wand bestimmen, fähig sind, dieses korrekt abzubilden.

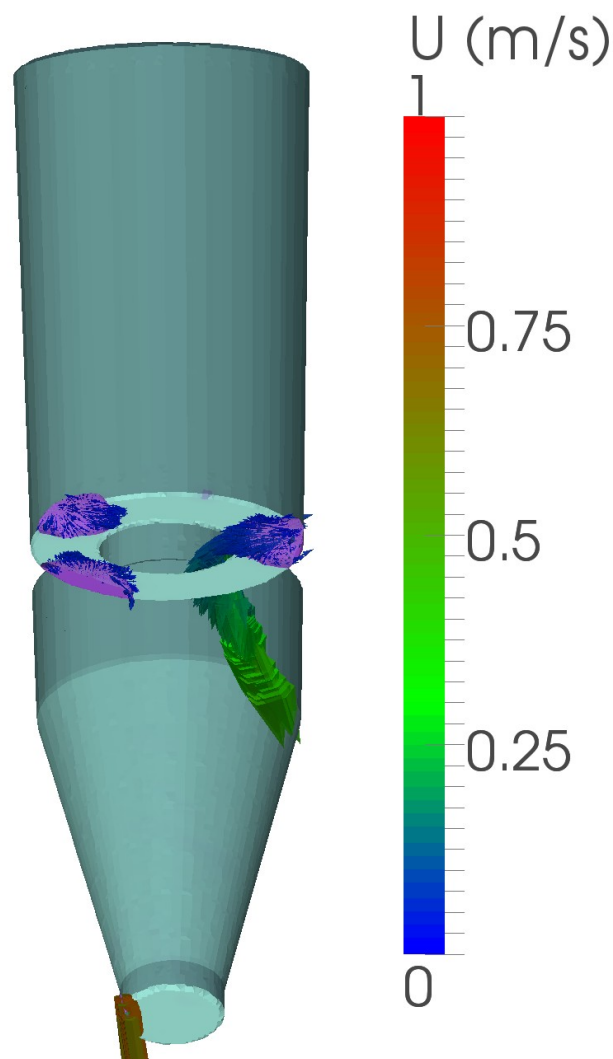


Abbildung 92: Restwasser in einer Flasche mit ungünstiger Geometrie (S2-8)

5.2.2.4 Interaktion der Parameter

Zur Untersuchung der Interaktionen zwischen den Parametern Einbuchtung, Halsform und Mündungsdurchmesser werden RSDs genutzt, die erlauben, diese Interaktion bezüglich der Auslaufzeit zu visualisieren. Die Grafiken basieren alle auf Gl. 79 (Polynom 2. Ordnung).

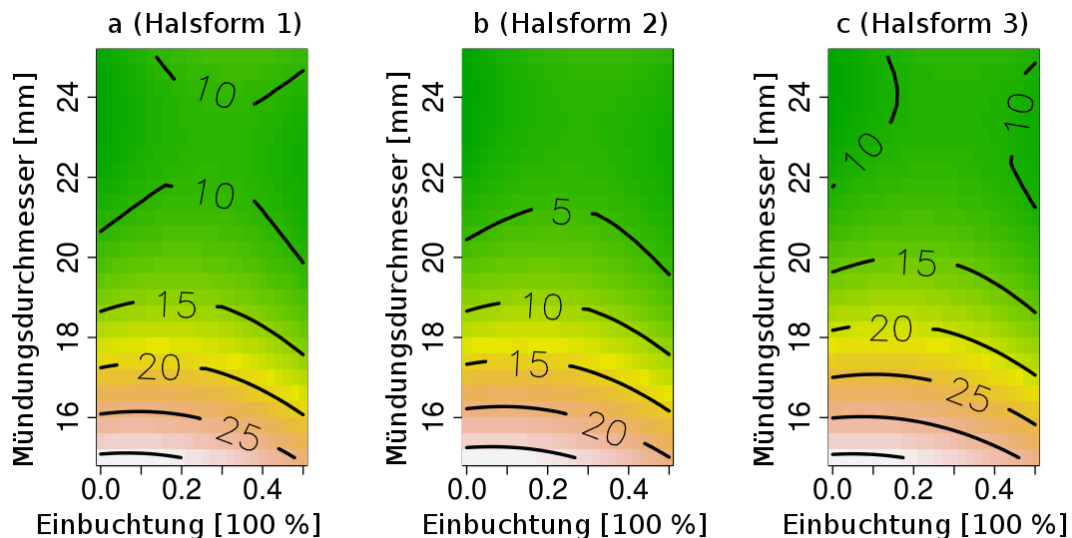


Abbildung 93: RSD der Wechselwirkung von Mündungsdurchmesser und Einbuchtung

Abb. 93 zeigt die Interaktionen von Mündungsdurchmesser und Einbuchtung für die unterschiedlichen, hier untersuchten Halsformen. In den Grafiken wird deutlich, dass kaum Interaktion zwischen den Parametern Mündungsdurchmesser und Einbuchtung besteht, da die Höhenlinien, welche die Auslaufzeit beschreiben, sehr gerade und stark vom Effekt der Mündungsdurchmesser bestimmt sind. Die Tiefe der Einbuchtung verändert das Verhalten bzgl. der Auslaufdauer nur gering. Bei steigender Einbuchtung scheint die Flasche geringfügig schneller leer zu laufen.

Der direkte Vergleich der RSDs in Abb. 93 erlaubt zudem eine Rangliste der Halsformen zu erstellen, was ohne die RSDs noch nicht möglich war. Halsform 2 („Kegelstumpf“) hat die kürzesten Auslaufzeiten, gefolgt von Halsform 1 („ohne Hals“), da sowohl die Minimalwerte als auch die Maximalwerte der Auslaufzeit um 5 s kürzer ausfallen als bei den beiden anderen Halsformen.

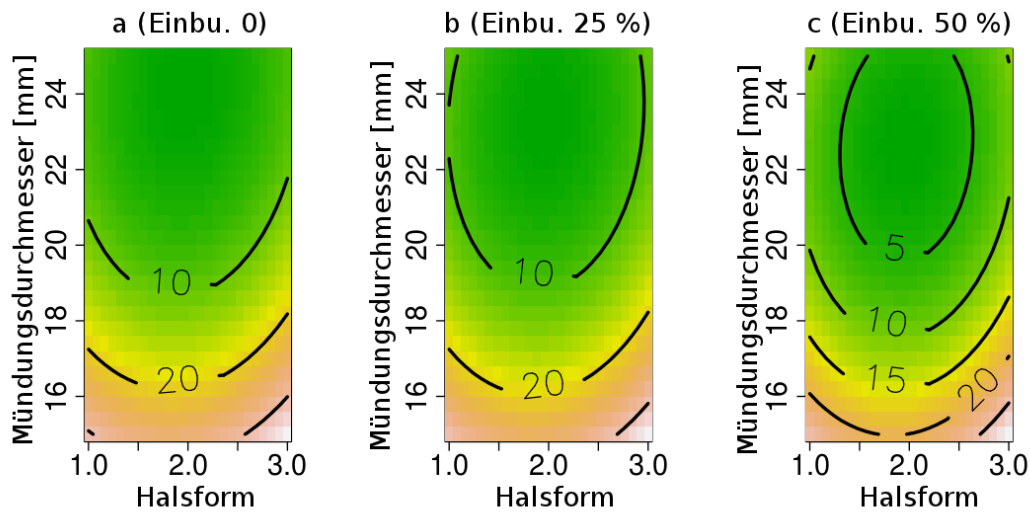


Abbildung 94: RSD der Wechselwirkung von Mündungsdurchmesser und Halsform

Abb. 94 beschreibt eine Interaktion zwischen Halsform und Mündungsdurchmesser für alle untersuchten Einbuchtungstiefen. In Abb. 94 wird klar, dass bei Wahl einer bestimmten Halsform, trotz eines geringeren Mündungsdurchmessers gleiche, zum Teil kürzere Auslaufzeiten erreicht werden. Der in 5.2.2.3 beschriebene Effekt, dass besonders bei großer Einbuchtung die Halsform entscheidenden Einfluss auf die Auslaufzeit nimmt, wird durch den Vergleich von Abb. 94c mit Abb. 94a oder Abb. 94b bestätigt. Während diese Auswirkung bei keiner (Abb. 94a) und geringer (Abb. 94b) Einbuchtung im Bereich des Optimums, welches bei der Halsform Kegelstumpf (2) und Mündungsdurchmesser > 20 mm liegt, noch zu vernachlässigen ist, kann bei tiefer Einbuchtung (50 %) der Flasche durch eine geschickte Wahl der Halsform -kegelstumpfförmiger Hals- die Leerungszeit um bis zu 50 % reduziert werden.

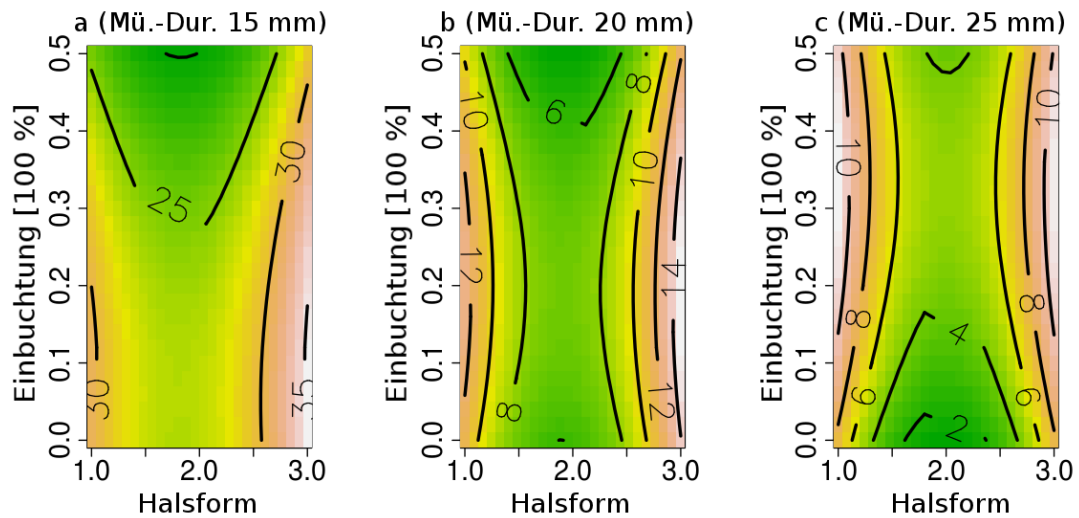


Abbildung 95: RSD der Wechselwirkung von Halsform und Einbuchtung

Die Gegenüberstellung der Parameter Einbuchtung und Halsform in Abb. 95 bringt einen neuen Aspekt zum Vorschein. In Abb. 95a bis c wird deutlich, dass die Halsform wichtiger für die Auslaufzeit ist als der Einfluss der Einbuchtung. Diese Aussage ist möglich, da kaum ein Effekt durch die Veränderung der Einbuchtung erzielt wird.

5.3 Mathematische Methoden

Das physikalische Phänomen von Strömungen in der Flasche wurde in die Welt der Mathematik überführt und mit verschiedenen Werkzeugen untersucht. Zu diesen Werkzeugen zählt ein entwickeltes CFD- Modell und die Entwicklung eines geeigneten Workflows für die Untersuchung von verschiedenen Parametern. Das CFD- Modell (4.1) basiert auf RANS- Gleichungen, nutzt das k- ϵ - RNG- Modell zur Abbildung der Turbulenz und die VOF- Methode zur Ermittlung der Phasengrenze zwischen Luft und Wasser. Der entwickelte Workflow zur Planung der Simulationen verwendet ein Box- Behnken-Design zur Planung der Simulationen und RSM zusammen mit Regression zur Auswertung der Ergebnisse. Die eingesetzten und entwickelten Methoden zeigten hierbei, dass mit ihnen weitreichende Erkenntnisse möglich sind. Neben der detaillierten Analyse eines Prozesses wie in 5.1 und 5.2 vorgestellt, bieten die CFD und die DoE Möglichkeiten, den Prozess der Flaschenleerung auf eine Art und Weise zu untersuchen, die so bisher nicht bekannt war oder nicht durchgeführt wurde.

So standen bei den meisten vor dieser Arbeit durchgeführten Studien vor allem quantitative Aspekte im Vordergrund. Die CFD bietet aber besonders durch die Visualisierung entscheidende Vorteile gegenüber den rein empirischen Verfahren, die in früheren Studien verwendet wurden, wie im folgenden verdeutlicht werden soll. Die Abb. 96, 98 und 97 zeigen alle den gleichen Zeitpunkt bei einer Flaschenleerung, liefern aber viele verschiedene Informationen.

Abb. 96 bildet die Phasenverteilung beim Auslaufen einer Flasche ab, wie sie auch mit dem menschlichen Auge zu beobachten ist. Alleine diese scheinbar einfache Darstellung ist eine Information, welche mit den empirischen Modellen nicht gegeben werden kann. Dies ist jedoch erst der Einstieg in die CFD- Analyse des Leerungsprozesses.

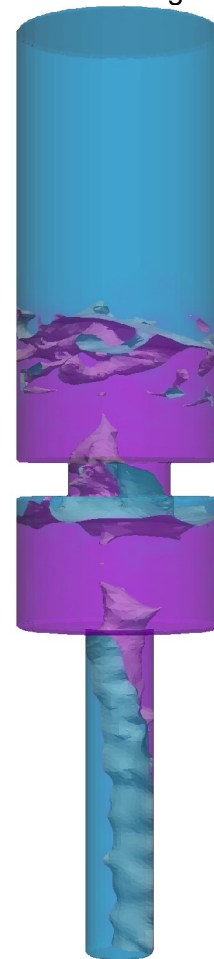


Abbildung 96:
Phasenverteilung
während des
Leerungsprozesses

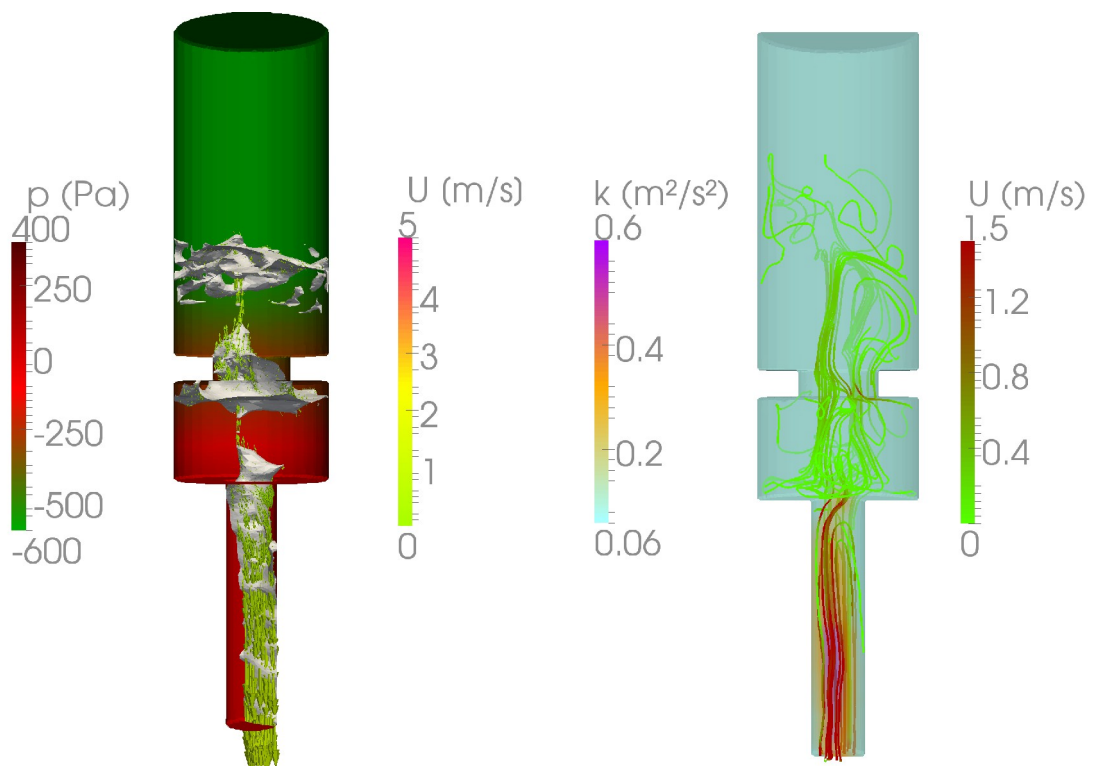


Abbildung 97: Geschwindigkeits- und Druckverteilung

Abbildung 98: Strömungslinien und Verteilung der turbulenten kinetischen Energie

Abb. 97 zeigt die exakte Geschwindigkeitsverteilung an der Phasengrenze und die Druckverteilung. Die Verteilung der Geschwindigkeit ist zum einen wichtig, um den Verlauf des Prozesses zu untersuchen, zum anderen, um Reinigungseffekte an der Wand beschreiben zu können. Die Verteilung des Drucks erfolgt relativ zum Atmosphärendruck. Ein Wert von 0 entspricht somit dem Atmosphärendruck. Der negative Wert in Abb. 97 visualisiert, dass in Teilen der Flasche ein Unterdruck entsteht. Dieser könnte Verformungen der Flasche auslösen, welche aber im Modell nicht berücksichtigt werden. Abb. 98 bildet den Verlauf der Strömungslinien und die Verteilung der turbulenten kinetischen Energie in der Flasche ab. Wie zu erwarten steigt die Geschwindigkeit an den Engstellen, insbesondere im Halsbereich, deutlich an. Zusätzlich können weitere Größen untersucht werden, welche bisher nicht bestimmbar waren, wie die turbulente kinetische Energie. Diese tritt, wie in Abb. 98 zu erkennen ist, ebenfalls vor allem im Halsbereich auf. Diese könnte zum Bsp. für eine vermehrte Bildung von Schaum verantwortlich sein.

Neben der exakten Prognose der Auslaufzeit liefert die entwickelte CFD- Methode eine Vielzahl von Erkenntnissen und Untersuchungsmöglichkeiten über den Flaschenleerungsprozess, die so noch nicht bekannt waren. Durch die Methoden lassen sich genaue Strömungskarten erstellen, in denen Geschwindigkeit und Richtung an jedem Punkt ablesbar sind. Dies ist z. B. eine Information, die bisher nicht zugänglich war.

Die CFD- Simulation kann aber nicht in jeder Hinsicht positiv bewertet werden, da der Berechnungsaufwand sehr hoch ist. Die durchgeführten Simulationen, welche auf dem in 4.1 detailliert dargestellten Modell beruhen, benötigten auf einem handelsüblichen Rechner (CPU: Intel Core Quad (2.66 GHz)) Berechnungszeiten von bis zu einer Woche. Eine genauere Ermittlung war nicht möglich, da schon eine veränderte Raumtemperatur erheblichen Einfluss auf die Geschwindigkeit hatte. Im Gegensatz zu den CFD- Simulationen können die Simulationen mit den empirischen Modellen in wenigen Sekunden erfolgen.

6 Diskussion

6.1 Auslaufen der Flasche

Nur wenige der bisher veröffentlichten CFD- Studien beschäftigen sich mit dem Auslaufen von Flaschen. Chihara et al. (2009) und Chihara & Yamazaki (2012) untersuchen in Teilen ihrer Studien zur Verbesserung der Flasche für den Direktverzehr von Getränken den Volumenstrom und wie dieser sich durch eine veränderte Neigung mit CFD besser regulieren lässt, ohne jedoch konkrete Informationen über die Strömung in der Flasche zu geben. Die wenigen anderen Studien, die sich mit der Untersuchung von Strömungen in Flaschen befassen (3.1.1), beschrieben den Prozess mit einem empirischen Modell, welches allein auf die Auslaufdauer als Zielgröße reduziert ist. Somit liegen nur wenige Ergebnisse in diesem Bereich vor, die für diese Arbeit von Relevanz sind und bei der Erstellung der Studie berücksichtigt werden konnten. Wichtige Erkenntnisse stammen besonders von Kohira et al. (2007, 2009, 2012), die v. a. die Kopplung von zwei Flaschen näher betrachteten und eine Kategorisierung verschiedener Strömungsbilder (Abb. 1) beim Auslaufen der Flasche vorstellten. Bei der folgenden Untersuchung soll das Augenmerk auch darauf gelegt werden, inwieweit die in diesen Studien gefundenen Aussagen aufrecht erhalten werden können oder zu verwerfen sind. Die Ergebnisse anderer Studien wie von Skakauskas et al. (2006) oder von Koukouvaos & Kubie (2001), welche für die vorgenommene Untersuchung von untergeordneter Relevanz sind, werden in 3.1.1 näher beleuchtet.

Die durchgeführten Studien ergaben insbesondere, dass das Auslaufen der Flasche von einer Vielzahl von verschiedenen Einflussfaktoren und deren Interaktion bestimmt wird. In den numerischen Untersuchungen wurden einige wichtige Einflussfaktoren, wie z.B die Neigung der Flasche und die Oberflächenspannung der Fluide genauer untersucht. Bei der Diskussion werden die Ergebnisse beider Studien zusammengefasst und unter folgenden Aspekten diskutiert: (a) Einfluss der Form (6.1.1) und (b) Einfluss der Neigung und Oberflächenspannung (6.1.2).

Die Ergebnisse aus 5.2 und 5.3 zeigen das große Potenzial auf, welches durch die Optimierung der Flaschen für die gesamte Verarbeitung erreicht werden kann. In Studie 1 (4.4.2) wird dies besonders deutlich. Die Auslaufzeit der optimalen und der am wenigsten geeigneten Flasche unterscheiden sich um fast 251,4 s, was die Dauer

des Prozesses angeht. Dies bedeutet, dass die Prozesszeit bei der ungeeigneten Flasche 200-mal länger ist. Die Leistung einer Fülllinie, welche für die optimale Flasche ausgelegt ist und für eine ungeeignete Flasche verwendet wird, würde von 60 000 Flaschen auf 300 Flaschen in der Stunde sinken. Dieses überspitzte Rechenbeispiel zeigt, dass eine eingehende Untersuchung der Strömung in der Flasche eine deutliche Prozessverbesserung ermöglichen kann.

6.1.1 Einfluss der Form

Wenn vom Einfluss der Form einer Flasche gesprochen wird, sind in diesen Studien der Einfluss des Mündungsdurchmessers, der Halsform und der Tiefe der Einbuchtung gemeint. Die Untersuchung dieser Faktoren zeigte, dass der Mündungsdurchmesser bzgl. der Leerungszeit der bedeutendste Parameter ist. Zusätzlich konnte bestätigt werden, dass bei unterschiedlichem Mündungsdurchmesser die in Kohira et al. (2007, S. 9) beschriebenen Strömungsphänomene auftreten, s. Abb 99. Besonders der Druckverlauf in der Flasche, wie in 5.1.2 beschrieben, erwies sich zur Untersuchung dieses Teilaspekts geeignet. Allerdings ist die vorgestellte Klassifizierung nur in der senkrechten Position gültig. Der Übergang von oszillierenden Strömungen, bei der sich Wasserausfluss und Lufteinfluss abwechseln, zu gegenläufiger Strömung, bei der Wasser und Luft die Mündung gleichzeitig in entgegengesetzte Richtungen passieren, ist allerdings erst ab einem größeren Mündungsdurchmesser von 20 mm und mehr zu beobachten. Ist die Flasche geeignet, muss für den jeweilig anliegenden Neigungswinkel eine eigene Klassifizierung entwickelt werden, da die Ergebnisse dieser Untersuchung zeigen, dass selbst Flaschen mit Mündungsdurchmesser 30 mm in geneigter Position nicht mehr kontinuierlich leer laufen.

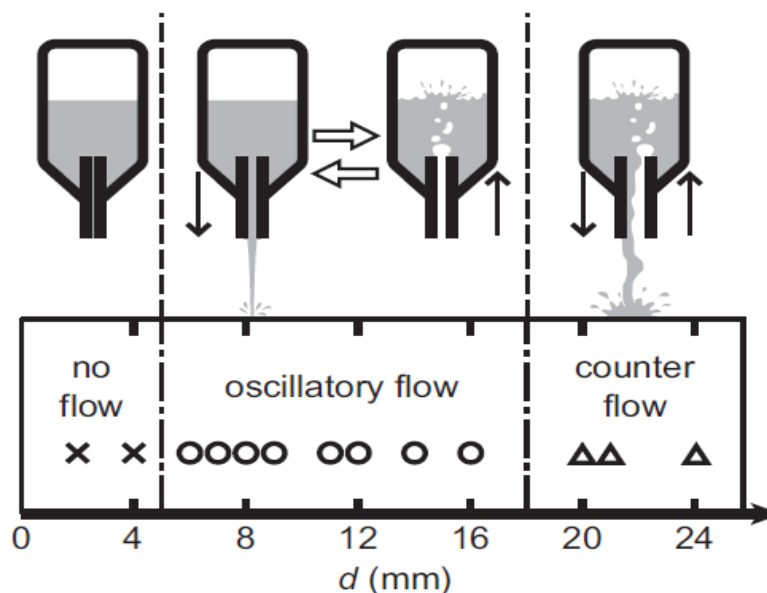


Abbildung 99: Strömungsphänomene beim Leeren einer Flasche (Quelle: Kohira et al. (2007, S. 9))

Direkte Effekte der Halsform und der Einbuchtung auf die Auslaufzeit der Flasche dahingehend, dass sie verlängernd oder verkürzend wirken, sind kaum messbar. Allerdings scheint der kegelstumpfförmige Hals in Verbindung mit einer tiefen Einbuchtung vorteilhaft zu sein. So führte eine tiefe Einbuchtung von 50 % des Radius in Kombination mit einem kegelstumpfförmigen Hals zu starken Reduzierungen der Auslaufzeit. Die gesamte Untersuchung zeigt, dass die in der Flasche auftretenden Phänomene sehr komplex sind und zwischen den einzelnen Flaschenformen große Unterschiede bestehen. Bestimmte Flaschen sind deutlich einfacher zu leeren als andere. Zusätzlich verdeutlicht die Studie, dass viele Interaktionseffekte nur unter bestimmten Voraussetzungen auftreten und eine Verallgemeinerung auf andere Flaschenformen meist nicht möglich ist. So muss eine bestimmte Halsform die Leerungszeit nicht zwingend verlängern. Unter bestimmten Bedingungen ist dies aber sehr wohl möglich. Die Untersuchung und Optimierung der Geometrie einer Flasche muss somit für jede Flaschenform individuell erfolgen. Die reine Untersuchung mit empirischen Daten liefert hierfür keine befriedigenden Ergebnisse. Insbesondere der Vergleich von Experimenten, empirischen Simulationen und CFD- Simulationen (5.1.1) zeigte die eingeschränkte Verwendbarkeit derartiger Modelle deutlich auf, da keines der empirischen Modelle (CSe und Wha) fähig war, die Auslaufzeit für die Testszenarien korrekt zu prognostizieren. Durch den Einsatz von CFD für die Untersuchungen konnten jedoch überzeugende Ergebnisse erzielt werden, die sich unter Verwendung geeigneter statistischer Methoden auch in empirische Modelle überführen lassen, welche zur effektiveren Optimierung der Form genutzt werden könnten. Zusammengefasst lässt sich nur die besondere Bedeutung des Mündungsdurchmessers für die Auslaufzeit auf alle Flaschentypen verallgemeinern. Ein großer Durchmesser bedeutet fast immer eine schnellere Entleerbarkeit.

6.1.2 Einfluss von Neigung und Oberflächenspannung

Die Ergebnisse zeigen, dass kein direkter Zusammenhang zwischen der Auslaufzeit, der Neigung und der Oberflächenspannung besteht. Sowohl die Änderung der Neigung als auch die Veränderung der Oberflächenspannung haben keinen eindeutig messbaren Effekt, welcher die Auslaufzeit entweder verlängert oder verkürzt. Die Untersuchung des Effekts der Oberflächenspannung stützen somit die Vermutung von Tehrani et al. (1994, o. S.), dass die Viskosität Fluide einen stärkeren Einfluss hat als die Oberflächenspannung. Da keine genaue Untersuchungen zum Einfluss der Viskosität durchgeführt wurden, kann diese Aussage nicht bewiesen werden. Die Annahme von Tehrani et al. (1994, o. S.), dass eine geringere Oberflächenspannung zu einem langsameren Auslaufen führt, kann allerdings nicht bestätigt werden. Die Ergebnisse dieser Arbeit deuten vielmehr daraufhin, dass eine reduzierte Oberflächenspannung gerade bei engem Halsdurchmesser die Dauer des Auslaufens reduziert. Des Weiteren muss die Erkenntnis von Hewitt (1982, o. S.), dass Flaschen, die um 30°-45° zur senkrechten Kopfüberposition gekippt sind, schneller leer laufen, relativiert werden. Die Ergebnisse dieser Arbeit belegen, dass dies nur für Flaschen mit einem oszillierenden Auslaufverhalten gilt, welche einen Mündungsdurchmesser zwischen 6 und ca. 25 mm aufweisen. Bei größerem Halsdurchmesser verlängert die Neigung den Prozess.

Erst bei der Auswertung der Ergebnisse mit den RSDs wurde der Einfluss der Parameter Neigung und Oberflächenspannung ersichtlich, ohne dass diese Effekte zuvor erkennbar waren. Die Konfiguration der anderen Parameter, wie bspw. des Durchmessers der Mündung bei einer bestimmten Neigung oder Oberflächenspannung, verlängert die Auslaufzeit oder verkürzt sie. Hierbei sind Tendenzen von Interaktionen wie z. B. Halsform und Tiefe der Einbuchtung zu erkennen, die allerdings im Einzelnen genauer untersucht werden müssten. Der Faktor der Oberflächenspannung wurde bisher in vielen CFD- Studien, wie z. B. von Chihara et al. (2009), vernachlässigt, da ihm keine besondere Bedeutung beigemessen wurde. Tatsächlich kann er gravierende Auswirkungen auf das Auslaufverhalten haben, wie in dieser Studie belegt wurde. Deshalb muss er zukünftig berücksichtigt werden.

In den untersuchten Flaschen aus Studie 1 ist zudem zu erkennen, dass eine Korrelation zwischen Oberflächenspannung und Mündungsdurchmesser besteht. Je größer die Mündung ist, umso größer sollte die Oberflächenspannung sein und

umgekehrt (gültig für Oberflächenspannungen bis $0,12 \text{ N/m}$), damit eine kurze Auslaufzeit sichergestellt ist. Bei hoher Oberflächenspannung und enger Mündung erfüllt sich die Erwartung und die Flüssigkeit hält sich mit den Kapillarkräften gegen die Schwerkraft in der Flasche. Bei Umkehrung der Konstellation, also geringer Oberflächenspannung und großem Mündungsdurchmesser, konnten die Ursachen für die längere Dauer nicht sicher erkannt werden, da dieses Phänomen für Flaschen bis jetzt nicht in der Literatur beschrieben wurde und die Anzahl der Untersuchungen in dieser Studie zu gering ist, um exakte Aussagen hierzu zu treffen. Der Umfang der durchgeführten Studien reicht bei weitem nicht aus, um diesen Effekt vollständig aufzuklären. Es wird aber deutlich, dass bei einer breiten Öffnung eine höhere Oberflächenspannung (bis $0,12 \text{ N/m}$) vorteilhaft ist. Dies ist ein Ergebnis, das in dieser Deutlichkeit bis jetzt nicht bekannt war. Bezüglich der Neigung zeigte sich, dass der mittlere Winkel von 165° meistens nachteilig ist, da sowohl bei 180° also auch bei 150° kürzere Auslaufzeiten auftreten.

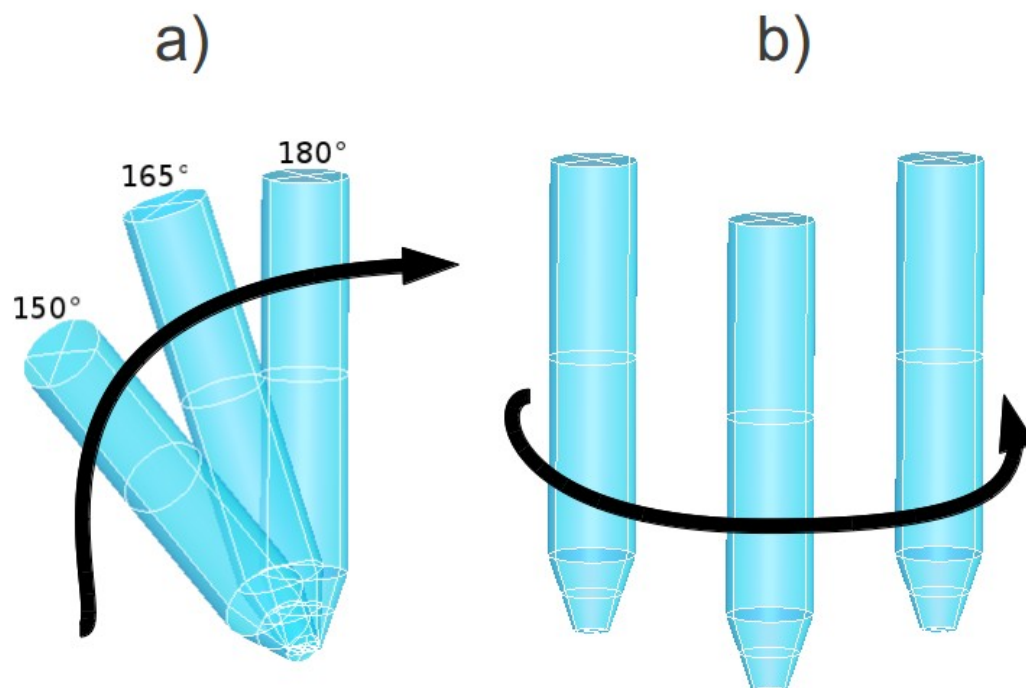


Abbildung 100: Beschleunigung der Flasche bei verschiedenen Prozessen

Besonders interessant wäre zu erfahren, welche Bedeutung Bewegung für den Vorgang hat. Eine Untersuchung dieses Parameters ist aber in der derzeitigen Ausbaustufe des Modells noch nicht möglich. Hain et al. (2009, S. 5), die das Füllen einer Flasche mit Fokus auf das Füllventil in einer CFD- Studie genauer untersuchen, schreiben den Beschleunigungskräften, die durch die rotierende Bewegung der Anlage

entstehen, nur geringe Bedeutung zu. Eine Übertragung der Ergebnisse von Hain et al. (2009, S. 5) auf den Leerungsprozess ist schwierig, da sich die Querschleunigung (Abb. 100b), wie sie bei einer Rundläufer-Füllmaschine auftritt, deutlich von der Längschleunigung (Abb. 100a) mit Änderung des Neigungswinkels, wie sie in einer Flaschenwaschmaschine gegeben ist, unterscheidet.

6.2 Vergleich der empirischen Modelle und des CFD- Modells

Die CFD- Technik erwies sich nicht nur beim direkten Vergleich mit den Messdaten als gut geeignet, sondern konnte auch im Vergleich mit den empirischen Modellen ein deutlich genaueres Ergebnis liefern, s. 5.1. Die Aussage, dass sich empirische Modelle grundsätzlich nicht dazu eignen, den Flaschenleerungsprozess zu beschreiben, liegt nahe. Die Ergebnisse, zu denen die beiden hier verwendeten Modelle, Wha (3.3.1.1.1) und CSe (3.3.1.1.2), führten, erwiesen sich als nicht aussagekräftig. Andere Modelle als diese beiden empirischen, die für die hier vorzunehmende Untersuchung in Betracht gekommen wären, konnten in der Literatur nicht gefunden werden. Die empirischen Modelle erreichten für einzelne Flaschen in bestimmten Positionen allerdings hinreichend genaue Prognosen bzgl. der Leerungszeit der Flaschen, so dass eine Verwerfung der empirischen Modelle nicht gerechtfertigt scheint. Änderungen im Modell, wie z.B. eine veränderte Position der Flasche, führten jedoch zu großen Abweichungen in den Prognosen. Diese Erkenntnis lässt Zweifel aufkommen, ob ein allgemein gültiges empirisches Modell, welches für verschiedene Flaschen geeignet ist, gefunden werden kann. Auf Basis der in der Arbeit gewonnenen Erkenntnisse muss dies in Frage gestellt werden.

Was den Zeitaufwand angeht, müssen die beiden Modelle genau umgekehrt bewertet werden. Während die empirischen Modelle in Sekunden gelöst waren, betrug der Rechenaufwand für die CFD- Modelle in den durchgeführten Simulationen bis zu zwei Wochen (Vierkernprozessor 2,8 GHz, 16 GB Ram). Dies spricht auf den ersten Blick gegen das CFD- Modell. Allerdings zeigten die Regressionsmodelle (3.3.2.3.1), welche aus den Ergebnissen der CFD- Simulationen zur Bildung der *Response Surface* erstellt wurden, vielversprechende Ergebnisse. Sie beschreiben und quantifizieren Zusammenhänge, die in dieser Deutlichkeit noch nicht bekannt waren. Werden diese Modelle für einzelne Flaschen als Prognosemodelle genutzt, könnte sich die Anzahl der CFD- Simulationen und damit auch der Zeitaufwand erheblich verringern lassen.

Da sich bisher nur wenige Studien mit der Untersuchung des Flaschenleerungsprozesses beschäftigen und die Anzahl derer, die hierfür die mathematische Modellierung über die reine Empirie hinaus verwenden, noch geringer ist, haben sich bisher keine Standards für die Untersuchung von Strömungen in Flaschen ausbilden können. Die in dieser Arbeit entwickelte Verfahrensweise, mit Hilfe der CFD- Simulation ein empirisches Modell für einen definierten Raum zu bilden,

stellt jedenfalls einen interessanten Lösungsansatz dar. So erlaubt das CFD- Modell z. B., den Prozess zu visualisieren und die physikalischen Zustände punktgenau zu ermitteln, während die empirischen Regressionsmodelle, welche mit den Ergebnissen der CFD- Studien erstellt werden, den gesamten Versuchsraum beschreibbar machen (mehr hierzu in 6.4).

Insgesamt muss die CFD- Technik für die Simulation von Flaschenleerungen folglich als geeignetes Untersuchungsmittel angesehen werden, da sie zusätzlich viele Analysemöglichkeiten eröffnet.

6.3 Eignung des CFD- Modells

Die Ergebnisse der durchgeführten Studien belegen, dass das entwickelte CFD- Modell für die Untersuchung des Flaschenleerungsprozesses nicht nur geeignet ist, sondern im Vergleich mit den bisher verwendeten empirischen Modellen eine Verbesserung der Analysemöglichkeiten bietet, da mehr Informationen über das System vorliegen. So ist z. B. die exakte Geschwindigkeitsverteilung und eine bessere Abbildung der Realität möglich. Jedoch erfordern der heutige Stand der Technik und der Wissenschaft einige Einschränkungen und Vereinfachungen. So ist zum einen die Rechenleistung der verwendeten Computer stark beschränkt. Zum anderen existieren bisher kaum Untersuchungen von Flaschenleerungsprozessen, so dass noch Raum für Verbesserungsmöglichkeiten gegeben ist. Obwohl also noch Forschungsbedarf besteht, ändert dies nichts an der grundsätzlichen Eignung des Modells für die Beschreibung des untersuchten Prozesses.

Beim Vergleich des in dieser Arbeit verwendeten CFD- Modells mit den Ergebnissen anderer Studien sind im Besonderen die Erkenntnisse von Hain et al. (2009), die sich mit einem Füllventil befassen, von Taha & Cui (2006), die sich mit der Bewegung einer Blase in einem vertikalen Rohr beschäftigen, und von Rusche (2002), der die Modellierung von Zweiphasenströmungen näher beleuchtet, relevant. Diese Arbeiten dienen zum Teil als Grundlage für das entwickelte Modell, da in ihnen entweder physikalisch ähnliche Probleme untersucht werden oder die dort verwendeten Methoden vergleichbar sind mit den hier angewendeten. Darüber hinaus bestehen einige Ähnlichkeiten der untersuchten Prozesse zum Zielszenario, welches die Untersuchung des Auslaufens von Flaschen beliebiger Form ermöglichen soll.

Im Vergleich zur Realität ist das Modell, bezogen auf die Materialeigenschaften der Fluide, erheblich vereinfacht. Zum einen beschreibt das Modell nur newtonsche Fluide, wobei sowohl die Gas- als auch die Flüssigphase inkompressibel sind. Zum anderen werden Phasenübergänge, wie z. B. von der Flüssig- in die Dampfphase, und veränderte Fluideigenschaften, bspw. ein Unterschied in der Viskosität aufgrund eines anderen Drucks, nicht berücksichtigt. Die Vereinfachung ist nötig, um die Berechnung in endlicher Zeit durchführen zu können. Allerdings gelingt es auch keiner der drei Referenzstudien, ohne die Vereinfachungen auszukommen. Für die untersuchte Problematik des Flaschenleerens stellt dies keinen Nachteil dar, da derartige Phänomene eine untergeordnete Bedeutung haben. Diese Annahme wird durch die gefundenen Ergebnisse (5.1), welche durch den direkten Vergleich von Messwerten aus Experimenten mit den Modellergebnissen gewonnen wurden, gestützt. Das CFD-Modell beschreibt alle untersuchten Szenarien mit so geringer Abweichung, dass die Vereinfachungen wohl keine Auswirkungen haben.

Die richtige Abbildung der Turbulenz (4.1.2) ist einer der kritischsten Punkte bei der CFD, da die feinen Strukturen und die Kurzzeitigkeit der Wirbel extremen mathematischen Aufwand bei vollständiger Berechnung bedeuten würden. Diese Problematik wird von Hain et al. (2009) durch die Verwendung eines k - ε -Turbulenzmodells (4.1.2.1) gelöst, welches die Turbulenz nur noch modelliert. In dem hier entwickelten Modell für die Untersuchung zum Auslaufen der Flaschen wird hingegen auf das k - ε -*RNG-Modell* (4.1.2.2) zurückgegriffen, welches insbesondere Sekundärströmungen, denen große Bedeutung beim Auslaufen der Flasche zukommt, besser modelliert. Sekundärströmungen bewegen sich quer zur Hauptströmungsrichtung und sind z. B. für die Strudelbildung am Ende eines Auslaufprozesses relevant. Der Nachteil des k - ε -*RNG-Modells* gegenüber dem k - ε -*Modell* ist der höhere Berechnungsaufwand, welcher von Mehdizadeh et al. (2009, S. 61) mit 130 % beziffert wird. Taha & Cui (2006, S. 678) begründen die Entscheidung für das k - ε -*RNG-Modell* in ihrer Studie zwar nicht, aber die Ergebnisse zeigen, dass in ihren Untersuchungen, welche das Aufsteigen einer Gasblase in einem Rohr zum Thema haben, mit diesem Modell gute Ergebnisse erreicht werden können.

Auch wenn zur Beschreibung der Phasentrennung verschiedene Methoden zur Verfügung stehen, s. 4.1.3, wird in allen drei Referenzstudien auf VOF zurückgegriffen. Dieses Verfahren erzielt besonders bei der Massenerhaltung im Strömungsraum sehr gute Ergebnisse und scheint damit auch bei extrem disperser Phasenverteilung

geeignet. Allerdings führt diese Methode dazu, dass zum Teil starke Verschmierungen der Phasengrenze auftreten, die unerwünscht sind. Um dieses Phänomen zu vermindern, wird in dem entwickelten Modell der Term zur Berechnung der Phasengrenze, wie in 4.1.3 beschrieben, erweitert. Im Zusammenhang mit der Phasengrenze stellt auch die Oberflächenspannung einen wichtigen Parameter dar, da sie das Verhalten des Fluids oft erheblich beeinflusst. Im Fall der auslaufenden Flasche ist dies besonders im Mündungsbereich von großer Bedeutung. Dennoch wird sie in vielen Studien vernachlässigt (vgl. Chihara et al., 2009, S. 269). Die Integration der Oberflächenspannung in das Modell ist in 4.1.3 dargestellt. Somit ist sichergestellt, dass Effekte, die aus der Oberflächenspannung resultieren, korrekt berücksichtigt werden.

Mit Ausnahme von Rusche (2002) sind die Diskretisierungs- und Lösungsmethoden in den Referenzstudien nur sehr kurz angesprochen, und können deshalb oft nicht richtig nachvollzogen werden. In 4.1.4 und 4.1.5 findet eine detaillierte Darstellung dieser Thematik statt, weil sie häufig Ursache von Ungenauigkeiten und Abweichungen der CFD- Modelle von der Realität ist. Bei der Auswahl der Verfahren müssen immer verschiedene Aspekte beachtet werden, wie Stabilität, Genauigkeit und Berechnungsaufwand. Da die einzelnen Verfahren in der Regel nicht alle Anforderungen gleich gut erfüllen können, ist die Auswahl geeigneter Methoden besonders wichtig für das Simulationsergebnis. Die hier verwendeten Verfahren, s. 4.1.5, sind von vornherein so gewählt, dass die Simulationen in der Regel eine Genauigkeit 2. Ordnung aufweisen und nur an kritischen Stellen auf eine Genauigkeit 1. Ordnung sinken. Dies wird durch die Verwendung adaptiver Verfahren sichergestellt, welche situationsabhängig zwischen zwei vorgegebenen Verfahren hin- und herschalten.

Der wichtigste Beleg, dass das entwickelte CFD- Modell zur Beschreibung des Flaschenleerungsprozesses geeignet ist, wird durch den Vergleich der Simulationsergebnisse mit realen Messwerten erreicht. So wird garantiert, dass die maßgeblichen Einflussparameter berücksichtigt werden. Der Vergleich mit realen Prozessen ist auch das wichtigste Werkzeug zur Validierung des Modells, da die untersuchten Prozesse oft so komplex sind, dass im Einzelfall nur schwer entschieden werden kann, welche Einflüsse vernachlässigbar sind. Demzufolge kann CFD zwar praktische Versuche reduzieren, aber eine vollständige Ersetzung dieser Versuche scheint nicht empfehlenswert. Die unmittelbare Einordnung des Modells in den

wissenschaftlichen Kontext ist schwierig, da direkt vergleichbare Studien nach dem Wissen des Autors bisher nicht durchgeführt wurden. Dies führt dazu, dass ein starker Fokus auf der Methodendarstellung liegt, um die vollständige Nachvollziehbarkeit zu gewährleisten. Zusätzlich ist die gesamte Umsetzung im Anhang **B** dieser Arbeit beschrieben.

6.4 Versuchsplanung und Auswertung

Der große Rechenbedarf der CFD- Simulationen und die begrenzten Rechenressourcen erforderten die Verwendung einer geeigneten Versuchsplanung und -auswertung. Eine getrennte Betrachtung dieser beiden Aufgabenstellungen ist nicht möglich, da gerade eine gute Versuchsplanung die Aussagekraft der Auswertung erhöht (3.3.2). Wenige geschickt gewählte Experimente, in diesem Fall Simulationen, können eine viel höhere Aussagekraft haben als eine Vielzahl von willkürlich durchgeführten Versuchen. Bei der Auswertung der Untersuchungen hat sich besonders die *Response Surface* Methode als geeignet erwiesen, weil Extrempunkte schnell identifiziert werden konnten.

Für die Durchführung der Studien, welche in 4.4.2 und 4.4.3 näher beschrieben sind, wurden verschiedene statistische Verfahren herangezogen, um den Simulationsaufwand zu verringern und Wechselwirkungen besser erkennen zu können. Die einzelnen Simulationsläufe wurden jeweils in einem *Box- Behnken*- Versuchsdesign (3.3.2.1.1) durchgeführt. Zur Auswertung der Simulationsergebnisse wurde eine Regression (3.3.2.3.1) mit einem Polynom 2. Grades (3.3.2.3.2) verwendet, welches sich als Prognosemodell in einem eng definierten Versuchsraum eignet, da Extremwerte gut identifiziert werden können.

In der Vergangenheit wurden nur wenige CFD- Studien, welche ein Versuchsdesign verwenden, publiziert. Ausnahmen sind die Arbeiten von Hamstra et al. (2000), Song et al. (2003) und Chen et al. (2011). Hamstra et al. (2000) untersuchten mit einem CFD- Modell den Strömungsverlauf im Triebwerk eines Kampfflugzeugs. Hierbei nutzen sie ein *Central Composite Facing Design* (3.3.2.1.1) zur Bestimmung der Versuchspunkte für die sechs verschiedenen Faktoren, welche auf je drei Stufen untersucht wurden. Die Verwendung des Versuchsdesigns konnte die Anzahl der nötigen Versuche von 729 (3^6) auf 45 reduzieren. Eine weitere Reduzierung wäre durch die Verwendung des *Box- Behnken- Designs* möglich gewesen, wie es auch für diese Arbeit in den Studien 1 und 2 (4.4.2 und 4.4.3) eingesetzt wurde.

Song et al. (2003) versuchen auf allen Ebenen der CFD mit DoE zu arbeiten. Sie beziehen die Geometrieerstellung, Gittergenerierung und Lösung mit in den Prozess ein. Diese Vorgehensweise verspricht interessante Ergebnisse, da gerade im Prozessablauf der Geometrieerstellung und Gittergenerierung noch Verbesserungspotenzial liegt. Wie hoch das Verbesserungspotenzial tatsächlich ist,

lässt sich durch eine höhere Anzahl an Studien genauer ermitteln. In dieser Studie wurde hierauf verzichtet, da die Berechnungskapazitäten der Computer aufgrund der durchgeführten Untersuchungen bereits voll ausgelastet waren und weitere Analysen nicht möglich gewesen wären.

Chen et al. (2011) beschäftigen sich mit verschiedenen Verfahren der Metamodellierung und den Möglichkeiten, wie diese in den Simulationsablauf integriert werden können. Ihre Ergebnisse deuten darauf hin, dass ein Ansatz, der viel weiter reicht als der, der in dieser Studie verfolgt wurde, zielführend sein könnte. So erscheint es vielversprechend, ganze Lösungsteile zu modellieren. Allerdings sind diese Techniken und Methoden in Zusammenhang mit CFD noch nicht sehr ausgereift, wie dargelegt, da bisher nur wenige Untersuchungen mit CFD in diesem Bereich durchgeführt wurden.

Zusammengefasst kann der entwickelte Ansatz, verschiedene statistische Methoden für die Simulationsläufe zu nutzen, als erfolgreich bewertet werden. Die Anzahl der Versuche ließ sich deutlich reduzieren. Zudem lässt sich die Komplexität des Flaschenleerungsprozesses mit seinen starken Wechselwirkungen anschaulich darstellen, auch wenn die Zusammenhänge noch nicht vollständig entschlüsselt werden konnten.

6.5 Verwendung von F/OSS- Software

Eine Besonderheit dieser Arbeit ist, dass alle Arbeitsschritte mit F/OSS- Software realisiert wurden. Wie bereits in 3.4 angesprochen ist die Frage, ob F/OSS oder kommerzielle Software verwendet werden sollte, keine Frage der Qualität oder Kosten, sondern betrifft besonders die Zugänglichkeit der Ergebnisse und Methoden. Zugänglichkeit meint in diesem Zusammenhang sowohl die Nachvollziehbarkeit aller Ergebnisse als auch die Weiterentwicklungsmöglichkeiten, die durch die Quelloffenheit der Software entstehen. Diese sind nötig, um die Software auf die für die Versuche bestehenden Besonderheiten anzupassen.

Basierend auf den persönlichen Erfahrungen in dieser Arbeit kann allen in 4.2 aufgelisteten Softwareprogrammen ein sehr hoher Reifegrad attestiert werden. Zwar hält das ein oder andere kommerzielle Programm sicher noch ein praktisches Feature bereit, aber alle wichtigen Prozesse für die in der Zielsetzung (2) definierten Aufgaben können mit F/OSS- Software ausgeführt werden. Die gute Einsicht durch die Quelloffenheit der Programme erwies sich für diese Arbeit als sehr hilfreich. Eine Durchführung in der jetzigen Form wäre sonst nicht möglich gewesen.

7 Ausblick

Die Ergebnisse der Arbeit zeigen, dass sowohl eine quantitative als auch eine qualitative Untersuchung des Flaschenauslaufprozesses mittels CFD möglich ist. Die Optimierung von Flaschengeometrien erlaubt hierbei eine erhebliche Einsparung von Zeit. Der aktuelle wissenschaftliche Stand, basierend auf den Ergebnissen dieser Arbeit, bildet die Grundlage, um komplexe Phänomene im Flaschenreinigungsprozess mit CFD zu verstehen. So können verschiedene Prozessparameter und Flaschenformen untersucht und deren Einfluss auf die Auslaufzeit quantifiziert werden.

Wie in 3.1.2 dargestellt ist der Flaschenreinigungsprozess allerdings kein statischer Prozess. Die zu reinigende Flasche wird durch eine Flaschenwaschmaschine geführt und ist dabei (a) Bewegung, (b) Temperaturunterschieden, (c) Verformungen und (d) verschiedenen Reinigungsmitteln ausgesetzt. Die Verwendung von dünnwandigen PET-Flaschen hat besonders starke Verformungen der Flasche zufolge, die in dieser Studie jedoch nicht näher betrachtet wurden. Eine CFD-Analyse könnte einen Erkenntnisgewinn in diesem Bereich fördern. Das entwickelte Modell berücksichtigt derartige Phänomene noch nicht, kann aber in anschließenden Arbeiten dahingehend erweitert werden. Besonders (e) Restwassermenge und Rückstände von Reinigungsmitteln in der Flasche wären eine interessante Anschlussmöglichkeit an diese Arbeit.

Für den wissenschaftlichen Diskurs ergeben sich verschiedene Optionen, wie das vorgestellte Modell erweitert werden könnte: die (a) Bewegung der Flasche während des Prozesses und die damit einhergehende Veränderung des Strömungsregimes; die (b) Verteilung der Temperatur in der Flasche und die Frage, ob Belastungsgrenzen für das Material nicht überschritten werden; materialspezifische (c) Verformungen, welche den Prozess beeinflussen; die Kopplung mit (d) reinigungskinetischen Modellen, welche das Ab- und Auflösen von verschiedenen Verschmutzungen simulierbar machen; die genaue Beschreibung der Strömung und Haftkräfte an der Wand, so dass Restwassermengen exakt prognostiziert werden können.

Mit Hilfe des hier entwickelten Modells kann die Füllvorbereitung von Flaschen in der industriellen Praxis verbessert werden. Die vorherige Überprüfung einer Flaschenform im CFD-Modell gibt Aufschluss über deren Entleerbarkeit, was eine Abstimmung der Flaschenform auf die bereits vorhandene Maschine erlaubt. Das Reinigungsverhalten eines geänderten Flaschendesigns kann von vornherein abgeschätzt werden, so dass

Unternehmen aus verschiedenen Flaschenformen diejenige wählen können, die einen schnellen Abfluss der Fluide und damit eine bessere Reinigbarkeit aufweisen. Dadurch werden die Folgekosten für Unternehmen, die ein neues Flaschenmodell auf den Markt bringen, prognostizierbar.

Literaturverzeichnis

- Achhammer K.-H., Best P., Deister H.-P., Eisen G., Gieseke W., Hilche T., Hofmann M., Klenk K., Knülle A., Sandt E., Töpfer H.-H., Weber I., Wershofen T. and Wachenheim W. (2005) *Praxis-Handbuch für die Reinigung von Mehrwegflaschen aus Glas oder PET*. Versuchs- und Lehranstalt für Brauerei in Berlin e.V.- Kompetenzforum Getränkebehälter, Berlin.
- Adelmann S., Schwienheer C. and Schembecker G. (2011) Multiphase flow modeling in centrifugal partition chromatography. *Journal of Chromatography A* **1218**, S. 6092-6101.
- Adorean E. and Radu G. (2010) *Diesel engine in-cylinder calculations with OpenFOAM*. Transilvania University Press, Transilvania.
- Al-Baghdadi M., Abolhamid H. and Elgarni M. (2009) CFD modeling of contaminant transport in soils including the effect of chemical reactions. *Ovidus University Annals of chemistry* **20**, S. 40-43.
- Allus M., Brereton R. and Nickless G. (1989) The use of experimental design, multilinear regression, ANOVA, confidence bands and leverage in a study of the influence of metals on the growth of barley seedlings. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* **6**, S. 65-80.
- Almeida C., Rodrigues A., Bonilla S. and Giannetti B. (2010) Emergy as a tool for Ecodesign: evaluating materials selection for beverage packages in Brazil. *Journal of Cleaner Production* **18**, S. 32-43.
- Andersen C. and Nielsen N. (2008) Numerical investigation of a BFR using OpenFOAM. *Report Aalborg University o. A.*, S. 1-57.
- Andersson J. (2011) *Simulation of Wave Induced Forces on Semi Submerged Horizontal Cylinders Using OpenFOAM*. Thesis, Chalmers University of Technology.
- Andreas H., Christian J., Michael L., Aleksander K. C. M. and Michael H. (2009) CFD Simulation of commercial and open source solver using the VOF model: comparison of commercial and open source solvers with an experiment. *Chemical engineering transactions* **18**, S. 605-610.
- Arampatzis G., Assimacopoulos D. and Mitsoulis E. (1994) Treatment of numerical diffusion in strong convective flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* **18**, S. 313-331.
- Ashgriz N. and Poo J. (1991) FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. *Journal of Computational Physics* **93**, S. 449-468.
- Asteriadou K., Hasting T., Bird M. and Melrose J. (2007) Predicting cleaning of equipment using computational fluid dynamics. *Journal of food process engineering* **30**, S. 88-105.
- Asteriadou K., Hastings T., Bird M. and Melrose J. (2009) Exploring CFD solutions for coexisting flow regimes in a T-piece. *Chem. Eng. Technol.* **6**, S. 948-955.
- Atkinson A. and Donev A. (1992) *Optimum Experimental Designs (Oxford Statistical Science Series)*. Oxford University Press, Oxford.

- Aubin J., Fletcher D. and Xuereb C. (2004) Modeling turbulent flow in stirred tanks with CFD: the influence of the modeling approach, turbulence model and numerical scheme. *Experimental thermal and fluid science* **28**, S. 431-445.
- Barton I. (1998) Comparison of SIMPLE-and PISO-type algorithms for transient flows. *International Journal for numerical methods in fluids* **26**, S. 459-483.
- BASF (2012) *EcoKanister: Die innovative Verpackung von BASF*. BASF SE, Ludwigshafen.
- Baumann W., Bunge U., Frederich O., Schatz M. and Thiele F. (2006) *Finite--Volumen--Methode in der Numerischen Thermofluidodynamik*. Institut für Strömungsmechanik und technische Akustik der TU Berlin, Berlin.
- Berberović E., van Hinsberg N., Jakirlić S., Roisman I. and Tropea C. (2009) Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution. *Physical Review E* **79**, Nr. 036306.
- Bergeaud V. and Tajchman M. (2007) *Application of the SALOME software architecture to nuclear reactor research*, S. 383-387. In: *Proceedings of the 2007 spring simulation multiconference-Volume 2*, Norfolk.
- Bernard P. and Wallace J. (2002) *Turbulent flow analysis, measurement, and prediction*. John Wiley and Sons Inc, Hoboken.
- Biscarini C., Francesco S. and Manciola P. (2010) CFD modelling approach for dam break flow studies. *Hydrology and Earth System Sciences* **14**, S. 705-718.
- Blüml S. and Fischer S. (2004) *Handbuch der Fülltechnik: Grundlagen und Praxis für das Abfüllen flüssiger Produkte*. Behr's Verlag DE, Hamburg.
- Bohl W. and Elmendorf W. (2008) *Technische Strömungslehre*. Vogel Industrie und Medien GmbH und Co. KG, Würzburg.
- Box G. and Behnken D. (1960) Some new three level designs for the study of quantitative variables. *Technometrics* **2**, S. 455-475.
- Box G., Hunter J. and Hunter W. (2005) *Statistics for experimenters: design, innovation, and discovery*. Wiley-Interscience, New York.
- Brackbill J., Kothe D. and Zemach C. (1992) A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics* **100**, S. 335-354.
- Bressloff N. (2001) A parallel pressure implicit splitting of operators algorithm applied to flows at all speeds. *International journal for numerical methods in fluids* **36**, S. 497-518.
- Bretthauer D. (2002) Open source software: A history. *Information Technology and Libraries* **21**, S. 3-11.
- Böswirth L. (2010) *Technische Strömungslehre*. Viewag + Teubner, Wiesbaden.
- Cebeci T., Shao J. and Kafyeke F. Laurendeau E. (2005) *Computational fluid dynamics for engineers: from panel to navier-stokes methods with computer programs*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- Chen Q. (1995) Comparison of different k-epsilon models for indoor air flow computations. *Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals* **28**, S. 353-369.

- Chen T., Hadinoto K., Yan, W. and Ma Y. (2011) Efficient meta-modelling of complex process simulations with time-space-dependent outputs, *Computers & Chemical Engineering*, **35**, S. 502- 509.
- Chihara T. and Yamazaki K. (2012) Evaluation function of drinking ease from aluminum beverage bottles relative to optimum bottle opening diameter and beverage type. *Applied Ergonomics* **43**, S. 157-165.
- Chihara T., Yamazaki K., Itoh R. and Han J. (2009) Evaluation of drinking ease relative to the opening diameter and beverage type of aluminum beverage bottles. *Journal of Food Engineering* **95**, S. 264-271.
- Chorin A. (1980) Flame advection and propagation algorithms. *Journal of Computational Physics* **35**, S. 1-11.
- Clanet C. and Searby G. (2004) On the glug-glug of ideal bottles. *Journal of Fluid Mechanics* **510**, S. 145-168.
- Cooke R., Bosma A. and Harte F. (2005) A practical model of Heineken's bottle filling line with dependent failures. *European journal of operational research* **164**, S. 491-504.
- Crawley M. (2007) *The R book*. Wiley, Hoboken.
- Dalgaard P. (2008) *Introductory statistics with R*. Springer Verlag, New York.
- Datta A. (2008) Status of Physics-Based Models in the Design of Food Products, Processes, and Equipment. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety* **7**, S. 121-129.
- Do T., Chen L. and Tu J. (2010) Numerical study of turbulent trailing-edge flows with base cavity effects using URANS. *Journal of Fluids and Structures* **26**, S. 1155-1173.
- Evers H. (2004) *Physikalische Grundlagen*. In: Blüml S. and Fischer S. (Ed.), *Handbuch der Fülltechnik: Grundlagen und Praxis für das Abfüllen flüssiger Produkte*. Behr's Verlag DE, Hamburg.
- Evers H., Schmitt A. and Bechtluft J. (2009) Test on rinsing methods for non-refillable PET bottles. *BrewingScience* **62**, S. 44-53.
- Fang K.-T., Li R. and Sudjianto (2006) *Design and Modeling for Computer Experiments*. Chapman and Hall/CRC, Broken Sound Parkway.
- Ferreira S., Bruns R., Ferreira H., Matos G., David J., Brandão G., Da Silva E., Portugal L., Dos Reis P., Souza A. and others (2007) Box-Behnken design: An alternative for the optimization of analytical methods. *Analytica chimica acta* **597**, S. 179-186.
- Ferziger J. and Peric M. (2008) *Numerische Strömungsmechanik*. Springer, Berlin, Heidelberg.
- Friis A. and Jensen B. (2002) Prediction of hygiene in food processing equipment using flow modelling. *Food and bioproducts processing* **80**, S. 281-285.
- Fryer P. and Asteriadou K. (2009) A prototype cleaning map: A classification of industrial cleaning processes. *Trends in Food Science & Technology* **20**, S. 255-262.

- Geller S., Krafczyk M., Tölke J., Turek S. and Hron J. (2006) Benchmark computations based on lattice-Boltzmann, finite element and finite volume methods for laminar flows. *Computers & fluids* **35**, S. 888-897.
- Ghosh R. A., Aigrain P., Andradas R., Bernard R. and David P. (2006) *Study on the: Economic impact of open source software on innovation and the competitiveness of the Information and Communication Technologies (ICT) sector in the EU*. Bericht für die Europäische Kommission, Brüssel.
- Giovannitti-Jensen A. and Myers R. (1989) Graphical assessment of the prediction capability of response surface designs. *Technometrics* **31**, S. 159-171.
- Giunta A., Watson L. and Koehler J. (1998) *A comparison of approximation modeling techniques: polynomial versus interpolating models*, S. 392-404. In: *Proceedings of the 7th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Design*, Reston.
- Goupy J. and Creighton L. (2007) *Introduction to Design of Experiments: With JMP Examples*. SAS Publishing, Cary.
- Grote M. and Kirsch C. (2004) Dirichlet-to-Neumann boundary conditions for multiple scattering problems. *Journal of Computational Physics* **201**, S. 630-650.
- Hain K., Wels H. and Muhr M. (2009) *Simulation of the filling of polyethylene-terephthalate- bottles (PET) with a volumetric swirl chamber valve (VODM 40355) on the basis of calculation models and experiments*, S. 1-7. In: *Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries CSIRO*, Melbourne.
- Hamstra J., Miller D., Truax P., Anderson B. and Wendt B. (2000) Active inlet flow control technology demonstration *Aeronautical Journal*, **104**, S. 473-480.
- Harlow F. and Nakayama P. (1968) Transport of turbulence energy decay rate. *Los Alamos Scientific Lab., N. Mex.*, S. 1-7.
- Hauschild M., Jeswiet J. and Alting L. (2005) From life cycle assessment to sustainable production: status and perspectives. *CIRP Annals-Manufacturing Technology* **54**, S. 1-21.
- Hauschild M., Wenzel H. and Alting L. (1999) Life cycle design-a route to the sustainable industrial cultur?. *CIRP Annals-Manufacturing Technology* **48**, S. 393-396.
- Henley M. and Kemp R. (2008) Open source software: an introduction. *Computer Law & Security Report* **24**, S. 77-85.
- Hewitt G. (1982) *Flow regimes*. In: Hetsroni G. (Ed.), *Handbook of multiphase systems*. McGraw-Hill Book Co., New York.
- Hirsch C. (2007) *Numerical computation of internal and external flows: fundamentals of computational fluid dynamics*. Butterworth-Heinemann, Oxford.
- Hirt C. and Nichols B. (1981) Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics* **39**, S. 201-225.
- Issa R. (1985) Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational physics* **62**, S. 40-65.

- Issa R., Gosman A. and Watkins A. (1986) The computation of compressible and incompressible recirculating flows by a non-iterative implicit scheme. *Journal of Computational Physics* **62**, S. 66 - 82.
- Jaeger T. and Metzger A. (2006) *Open-source-Software*. Beck, München.
- Jang D. and Anderson-Cook C. (2011) Fraction of design space plots for evaluating ridge estimators in mixture experiments. *Quality and Reliability Engineering International* **27**, S. 27-34.
- Jasak H. (1996) *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine.
- Jasak H., Weller H. and Gosman A. (1999) High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes. *International journal for numerical methods in fluids* **31**, S. 431-449.
- Jensen B., Stenby M. and Nielsen D. (2007) Improving the cleaning effect by changing average velocity. *Trends in Food Science & Technology* **18**, S. 52-63.
- Kassem H., Saqr K., Aly H., Sies M. and Wahid M. (2011) Implementation of the eddy dissipation model of turbulent non-premixed combustion in OpenFOAM. *International Communications in Heat and Mass Transfer* **38**, S. 363-367.
- Khuri A. (2006) *Response surface methodology and related topics*. World Scientific Pub Co Inc, Singapore.
- Khuri A., Kim H. and Um Y. (1996) Quantile plots of the prediction variance for response surface designs. *Computational statistics & data analysis* **22**, S. 395-407.
- Kim S. and Benson T. (1992) Comparison of the SMAC, PISO and iterative time-advancing schemes for unsteady flows. *Computers & fluids* **21**, S. 435-454.
- Kjeldahl K. and Bro R. (2010) Some common misunderstandings in chemometrics. *Journal of Chemometrics* **24**, S. 558-564.
- Klein B. (2007) *Versuchsplanung-DoE: Einführung in die Taguchi/Shainin-Methodik*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München.
- Kleppmann W. (2008) *Taschenbuch Versuchsplanung*. Hanser Verlag, München, Wien.
- Kohira M., Kitahata H., Magome N. and Yoshikawa K. (2012) Plastic bottle oscillator as an on-off-type oscillator: Experiments, modeling, and stability analyses of single and coupled systems. *Physical Review E* **85**, S. 196-204.
- Kohira M., Magome N., Kitahata H. and Yoshikawa K. (2007) Plastic bottle oscillator: Rhythmicity and mode bifurcation of fluid flow. *American Journal of Physics* **75**, S. 893.
- Kohira M., Magome N., Mouri S., Kitahata H. and Yoshikawa K. (2009) Synchronization of Three Coupled Plastic Bottle Oscillators. *Journal of Unconventional Computing* **5**, S. 103-111.

- Koukouvaos¹ A. and Kubie J. (2001) Analysis of liquid outflow from single-outlet vessels. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science* **215**, S. 1189-1210.
- Kunkelmann C. (2011) *Numerical Modeling and Investigation of Boiling Phenomena*. PhD thesis, TU Darmstadt.
- Lakhani K. and Wolf R. (2005) Why hackers do what they do: Understanding motivation and effort in free/open source software projects. *MIT Sloan Working Paper 4425-03*, S. 1-27.
- Laurien E. and Oertel H. (2009) *Numerische Strömungsmechanik*. Viewag + Teubner, Wiesbaden.
- Leardi R. (2009) Experimental design in chemistry: A tutorial. *Analytica chimica acta* **652**, S. 161-172.
- Lelievre C., Antonini G., Faille C. and Benezech T. (2002) Cleaning-in-Place: Modelling of Cleaning Kinetics of Pipes Soiled by Bacillus Spores Assuming a Process Combining Removal and Deposition. *Food and Bioproducts Processing* **80**, S. 305-311.
- Lerner J. and Tirole J. (2002) Some simple economics of open source. *The journal of industrial economics* **50**, S. 197-234.
- Lerner J. and Tirole J. (2005) The economics of technology sharing: Open source and beyond. *Journal of Economic Perspectives* **19**, S. 99-120.
- Ligges U. (2008) *Programmieren mit R*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.
- Lotstedt P. (1982) A front tracking method applied to Burgers' equation and two-phase porous flow. *Journal of Computational Physics* **47**, S. 211-228.
- Maindonald J. and Braun J. (2007) *Data analysis and graphics using R: an example-based approach*. Cambridge Univ Pr, Cambridge.
- Maiwald A. and Schwarze R. (2011) Numerical analysis of flow-induced gas entrainment in roll coating. *Applied Mathematical Modelling* **35**, S. 3516-3526.
- Martin H. (2011) *Finite-Volumen-Methode*. In: Martin H. (Ed.), *Numerische Strömungssimulation in der Hydrodynamik*. Springer Berlin Heidelberg, Heidelberg, Dordrecht, London, New York.
- Mehdizadeh A., Firoozabadi B. and Sherif S. (2009) Simulation of a Density Current Turbulent Flow Employing Different RANS Models: A Comparison Study. *SCIENTIA IRANICA* **16**, S. 53-63.
- Meiron T. and Saguy I. (2007) Wetting properties of food packaging. *Food Research International* **40**, S. 653-659.
- Montgomery D. (2005) *Design and analysis of experiments*. John Wiley & Sons Inc, Hoboken.
- Morgan G., Zang J., Greaves D., Heath A., Whitlow C. and Young J. (2010) *Using the rasInterFoam CFD model for wave transformation and coastal modeling*, S. 1-9. In: *Proceeding to Coastal Engineering Conference*.

- Mouza A., Paras S. and Karabelas A. (2002) The influence of small tube diameter on falling film and flooding phenomena. *International Journal of Multiphase Flow* **28**, S. 1311-1331.
- Myers R., Montgomery D. and Anderson-Cook C. (2009) *Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments*. John Wiley and Sons Inc, Hoboken.
- Noh W. and Woodward P. (1976) *SLIC (simple line interface calculation)*, S. 330-340. In: *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics* 28. June —2. July, 1976 Twente University, Enschede.
- Norton T. and Sun D. (2006) Computational fluid dynamics (CFD)-an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: A review. *Trends in Food Science & Technology* **17**, S. 600-620.
- Oertel H. (2008) *Prandtl- Führer durch die Strömungslehre*. Viewag + Teubner, Wiesbaden.
- OpenFOAM (2011) *User Guide Version 2.0.0*. OpenCFD Limited, London.
- Owen M., Luscombe C., Lai L., Godbert S., Crookes D. and Emiabata-Smith D. (2001) Efficiency by design: optimisation in process research. *Organic Process Research & Development* **5**, S. 308-323.
- Padday J. (1992) Spreading, wetting, and contact angles. *Journal of Adhesion Science and Technology* **6**, S. 1347-1358.
- Paschedag A. (2004) *CFD in der Verfahrenstechnik: Allgemeine Grundlagen und mehrphasige Anwendungen*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Passalacqua A. and Marmo L. (2009) A critical comparison of frictional stress models applied to the simulation of bubbling fluidized beds. *Chemical Engineering Science* **64**, S. 2795-2806.
- Patankar S. (1981) A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. *Numerical Heat Transfer* **4**, S. 409-425.
- Peiró J. and Sherwin S. (2005) *Finite difference, finite element and finite volume methods for partial differential equations*. In: Peiró J. and Sherwin S. (Ed.), *Handbook of Materials Modeling*. Springer, .
- Pianet G., Vincent S., Leboi J., Caltagirone J. and Anderhuber M. (2010) Simulating compressible gas bubbles with a smooth volume tracking 1-Fluid method. *International Journal of Multiphase Flow* **36**, S. 273-283.
- Pope S. (2000) *Turbulent flows*. Cambridge Univ Pr, Cambridge.
- Popovic S., Tekic M. and Djuric M. (2009) Kinetic models for alkali and detergent cleaning of ceramic tubular membrane fouled with whey proteins. *Journal of Food Engineering* **94**, S. 307-315.
- Pukelsheim F. (2006) *Optimal Design of Experiments (Classics in Applied Mathematics)*. Wiley and Sons, New York.
- Raach H., Somasundaram S. and Mitrovic J. (2011) Optimisation of turbulence wire spacing in falling films performed with OpenFOAM. *Desalination* **267**, S. 118-119.

- Ratkovich N., Chan C., Berube P. and Nopens I. (2009) Experimental study and CFD modelling of a two-phase slug flow for an airlift tubular membrane. *Chemical Engineering Science* **64**, S. 3576-3584.
- Raymond E. (1999) The cathedral and the bazaar. *Knowledge, Technology & Policy* **12**, S. 23-49.
- Rubinstein R. and Kroese D. (2008) *Simulation and the Monte Carlo method*. Wiley-interscience, Hoboken.
- Rusche H. (2002) *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. PhD thesis, Imperial College of Science London.
- Schlichting H. (1979) *Boundary Layer Theory*. McGraw-Hill, New York.
- Schlüßler H.-J. and Mrozek H. (1968) *Praxis der Flschenreinigung*. Henkel und Cie GmbH, Düsseldorf.
- Schroeder W., Martin K. and Lorensen W. (1996) *The design and implementation of an object-oriented toolkit for 3D graphics and visualization*, S. 93-100. In: *Proceedings of the 7th conference on Visualization'96*, San Francisco.
- Schwartz M., Harrell F., Rossini A. and Francis I. (2008) *R: Regulatory Compliance and Validation Issues A Guidance Document for the Use of R in Regulated Clinical Trial Environments*. Citeseer, Wien.
- Schürmann S. (2000) *Measurement and Mathematical Approximation of the Impact of Descaling Nozzles*, S. . In: *Hydraulic Descaling Conference, London, London*.
- Scott-Pomerantz C. (2005) *The k-epsilon model in the theory of turbulence*. PhD thesis, University of Pittsburgh.
- Selma B., Bannari R. and Proulx P. (2010) A full integration of a dispersion and interface closures in the standard model of turbulence. *Chemical Engineering Science* **65**, S. 5417 - 5428.
- Siebertz K., Van Bebber D. and Hochkirchen T. (2010) *Statistische Versuchsplanung: Design of Experiments (DoE)*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York.
- Silva L., Damian R. and Lage P. (2008) Implementation and analysis of numerical solution of the population balance equation in CFD packages. *Computers & Chemical Engineering* **32**, S. 2933-2945.
- Sixtl F. (2000) *Der Mythos des Mittelwertes: Neue Methodenlehre der Statistik*. Oldenbourg Verlag, München Wien.
- Skakauskas V., Katauskis P. and Simeonov G. (2006) On a Fluid Outflow from a Bottle Turned Upside-Down. *Nonlinear Analysis* **11**, S. 277-291.
- Stern F., Wilson R., Coleman H. and Paterson E. (1999) *Verification and validation of CFD simulations*. Iowa Institute of Hydraulic Research, University of Iowa, Iowa.
- Song W., Keane A. and Cox W. (2003). CFD-based shape optimisation with Grid-enabled design search toolkits, in *Proceedings of UK e-Science All Hands Meeting*, S. 619- 626.

- Sussman M. and Puckett E. (2000) A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics* **162**, S. 301-337.
- Sussman M., Smereka P. and Osher S. (1994) *A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow*. PhD thesis, UCLA.
- Taha T. and Cui Z. (2006) CFD modelling of slug flow in vertical tubes. *Chemical engineering science* **61**, S. 676-687.
- Tehrani A., Patrick M. and Wragg A. (1992) Dynamic fluid behaviour of a tank draining through a vertical tube. *Int. J. Multiphase Flow* **18**, S. 977-988.
- Tehrani A., Wragg A. and Patrick M. (1994) *How fast will your bottle empty?*, S. 1-4. In: *The 1994 ICHME Research event*, Cambridge.
- Thompson J., Soni B. and Weatherill N. (1999) *Handbook of grid generation*. CRC, Boca Raton.
- Thompson J., Warsi Z. and Mastin C. (1985) *Numerical grid generation: foundations and applications*. North-holland, Amsterdam.
- Tu J., Yeoh G. and Liu C. (2008) *Computational fluid dynamics: a practical approach*. Butterworth Heinemann, Oxford.
- Turka A., Moulinecb C., Sunderlandb A. and Aykanata C. (2012) Code Saturne Optimizations in Preprocessing. *SMALL* **5**, S. 1-3.
- Ubbink O. (1997) *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. PhD thesis, Imperial college.
- Ujang P., Lawrence C., Hale C. and Hewitt G. (2006) Slug initiation and evolution in two-phase horizontal flow. *International Journal of Multiphase Flow* **32**, S. 527-552.
- Velten K. (2009) *Mathematical modeling and simulation: introduction for scientists and engineers*. Wiley VCH, Weinheim.
- Versteeg H. and Malalasekera W. (2007) *The finite volume method*. PEARSON Prentice Hall, Essex.
- Vijayan M., Jayanti S. and Balakrishnan A. (2001) Effect of tube diameter on flooding. *International Journal of Multiphase Flow* **27**, S. 797-816.
- Wackers J., Deng G., Leroyer A., Queutey P. and Visonneau M. (2012) Adaptive grid refinement for hydrodynamic flows. *Computers & Fluids* **55**, S. 85 - 100.
- Wallis G. (1961) *Flooding velocities for air and water in vertical tubes*. Report United Kingdom Atomic Energy Authority. Reactor Group. Atomic Energy Establishment, Dorset.
- Whalley P. (1987) Flooding, slugging and bottle emptying. *International journal of multiphase flow* **13**, S. 723-728.
- Whalley P. (1991) Two-phase flow during filling and emptying of bottles. *Int. J. Multiphase Flow* **17**, S. 145-152.
- Wiegand (2009a) *Konstruktionszeichnung Schlegelflasche mit MCA Mündung*. Wiegand-Glas GmbH, Steinbach am Wald.
- Wiegand (2009b) *Konstruktionszeichnung Aleflasche*. Wiegand-Glas GmbH, Steinbach am Wald.

- Wilcox D. (2006) *Turbulence Modeling for CFD (Hardcover)*. Dcw Industries, La Canada.
- Wöhler M. (2002) *Optimierung von Flaschenreinigungsmaschinen*. PhD thesis, Universität Paderborn.
- Yakhot V. and Smith L. (1992) The renormalization group, the ϵ -expansion and derivation of turbulence models. *Journal of Scientific Computing* **7**, S. 35-61.
- Youngs D. (1982) Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics* **24**, S. 273-285.

Anhang A: Statistische Ergebnisse

1 Regression Studie 1

1.1 Regression Gl. 76 (Polynom 1. Ordnung)

Call:
rsm(formula = time ~ F0(diameter, inclination, tension), data = etime)

Residuals:
Min 1Q Median 3Q Max
-54.66 -23.58 -20.33 21.24 118.53

Coefficients:
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 148.70173 216.46867 0.687 0.50943
diameter -6.93375 1.91651 -3.618 0.00559 **
inclination 0.08833 1.27767 0.069 0.94639
tension 335.25000 383.30246 0.875 0.40451

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 54.21 on 9 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.6063, Adjusted R-squared: 0.475
F-statistic: 4.62 on 3 and 9 DF, p-value: 0.03208

Analysis of Variance Table

Response: time

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
F0(diameter, inclination, tension)	3	40723	13574.5	4.6197	0.03208
Residuals	9	26446	2938.4		
Lack of fit	9	26446	2938.4		
Pure error	0	0			

Direction of steepest ascent (at radius 1):
diameter inclination tension
-0.0206779038 0.0002634286 0.9997861546

Corresponding increment in original units:
diameter inclination tension
-0.0206779038 0.0002634286 0.9997861546

1.2 Regression Gl. 77 (Polynom 2. Ordnung)

Call:

```
rsm(formula = time ~ SO(diameter, inclination, tension), data = etime)
```

Residuals:

1	2	3	4	5	6	7
-2.241e+01	2.336e+01	-2.336e+01	2.241e+01	6.725e+00	-3.905e+01	3.905e+01
8	9	10	11	12	13	
-6.725e+00	1.569e+01	1.664e+01	-1.664e+01	-1.569e+01	8.811e-13	

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	-2.635e+03	3.762e+03	-0.700	0.534
diameter	-2.513e+01	2.816e+01	-0.892	0.438
inclination	3.548e+01	4.456e+01	0.796	0.484
tension	5.925e+02	5.399e+03	0.110	0.920
diameter:inclination	-9.667e-03	1.525e-01	-0.063	0.953
diameter:tension	-6.525e+01	4.576e+01	-1.426	0.249
inclination:tension	-1.333e+00	3.051e+01	-0.044	0.968
diameter^2	6.089e-01	3.027e-01	2.012	0.138
inclination^2	-1.064e-01	1.345e-01	-0.791	0.487
tension^2	9.055e+03	1.211e+04	0.748	0.509

Residual standard error: 45.76 on 3 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.9065, Adjusted R-squared: 0.6259

F-statistic: 3.231 on 9 and 3 DF, p-value: 0.1819

Analysis of Variance Table

Response: time

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
FO(diameter, inclination, tension)	3	40723	13574.5	6.4822	0.07954
TWI(diameter, inclination, tension)	3	4270	1423.3	0.6797	0.62066
PQ(diameter, inclination, tension)	3	15893	5297.8	2.5299	0.23298
Residuals	3	6282	2094.1		
Lack of fit	3	6282	2094.1		
Pure error	0	0			

Stationary point of response surface:

diameter	inclination	tension
25.82889881	165.13466960	0.07249946

Eigenanalysis:

\$values

[1]	9055.1176027	0.4914089	-0.1065255
-----	--------------	-----------	------------

\$vectors

	[,1]	[,2]	[,3]
[1,]	3.603154e-03	0.999920286	-0.0121012077
[2,]	7.361993e-05	-0.012101551	-0.9999267708
[3,]	-9.999935e-01	0.003601999	-0.0001172178

2 Regression Studie 2

2.1 Regression Gl. 78 (Polynom 1. Ordnung)

```
[1] 32.50 9.62 35.63 7.93 25.03 4.20 16.91 5.10 9.66 13.84 9.90 13.54
[13] 7.16
```

Call:

```
rsm(formula = time ~ F0(diameter, neck, indentation), data = etime)
```

Residuals:

Min	1Q	Median	3Q	Max
-7.534	-2.921	-1.001	2.481	9.376

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	54.8988	10.4663	5.245	0.000531 ***
diameter	-2.0805	0.4502	-4.621	0.001253 **
neck	1.1575	2.2512	0.514	0.619518
indentation	-3.6400	9.0048	-0.404	0.695481

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 6.367 on 9 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.7076, Adjusted R-squared: 0.6101

F-statistic: 7.26 on 3 and 9 DF, p-value: 0.008914

Analysis of Variance Table

Response: time

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
F0(diameter, neck, indentation)	3	883.04	294.346	7.2601	0.008914
Residuals	9	364.89	40.543		
Lack of fit	9	364.89	40.543		
Pure error	0	0.00			

Direction of steepest ascent (at radius 1):

diameter	neck	indentation
-0.4783342	0.2661244	-0.8368836

Corresponding increment in original units:

diameter	neck	indentation
-0.4783342	0.2661244	-0.8368836

2.2 Regression Gl. 79 (Polynom 2. Ordnung)

```
[1] 32.50  9.62 35.63  7.93 25.03  4.20 16.91  5.10  9.66 13.84  9.90 13.54
[13]  7.16
```

Call:

```
rsm(formula = time ~ S0(diameter, neck, indentation), data = etime)
```

Residuals:

```
      1      2      3      4      5      6      7
3.040e+00 -1.445e+00 1.445e+00 -3.040e+00 -1.348e+00 3.138e+00 -3.138e+00
      8      9     10     11     12     13
1.348e+00 -1.693e+00 -9.750e-02 9.750e-02 1.693e+00 -2.320e-14
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	193.5075	51.6237	3.748	0.0332 *
diameter	-14.3175	4.5011	-3.181	0.0501 .
neck	-20.2575	14.0047	-1.446	0.2438
indentation	-22.5000	43.5505	-0.517	0.6411
diameter:neck	-0.2410	0.4152	-0.580	0.6024
diameter:indentation	1.8040	1.6610	1.086	0.3569
neck:indentation	-0.5400	8.3048	-0.065	0.9522
diameter^2	0.3067	0.1099	2.792	0.0683 .
neck^2	6.5925	2.7465	2.400	0.0958 .
indentation^2	-32.2800	43.9446	-0.735	0.5158

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 4.152 on 3 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.9585, Adjusted R-squared: 0.8342

F-statistic: 7.708 on 9 and 3 DF, p-value: 0.06

Analysis of Variance Table

Response: time

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
F0(diameter, neck, indentation)	3	883.04	294.346	17.0712	0.02173
TWI(diameter, neck, indentation)	3	26.22	8.740	0.5069	0.70453
PQ(diameter, neck, indentation)	3	286.94	95.646	5.5472	0.09656
Residuals	3	51.73	17.242		
Lack of fit	3	51.73	17.242		
Pure error	0	0.00			

Stationary point of response surface:

```
diameter      neck      indentation
23.2772105  1.9735633  0.2854146
```

Eigenanalysis:

\$values

```
[1]  6.5969383  0.3290367 -32.3067750
```

\$vectors

```
      [,1]      [,2]      [,3]
[1,] -0.020215140 0.99941405 -0.02762076
[2,]  0.999768175 0.02041169  0.00685263
[3,] -0.007412401 0.02747583  0.99959499
```

Anhang B: Verfahrensweisen in OpenFOAM

In diesem Anhang werden die Parametereinstellungen und Verfahrensweisen in OpenFOAM, die für die in dieser Arbeit diskutierten Simulationen erforderlich sind, beschrieben, und zwar exemplarisch anhand einer Simulation. Die angewandten Methoden und Theorien werden im entsprechenden Abschnitt der Dissertation diskutiert. Die angezeigten Dateien sind mit OpenFOAM Version 1.7.1 lauffähig. Für andere Versionen müssen einzelne Befehle oder Dateien geändert werden. Diese Beschreibung ist keine Anleitung für OpenFOAM generell, sondern stellt nur die für diese Arbeit relevanten Aspekte dar. Zur Nutzung von OpenFOAM ist profundes Wissen über das Programm nötig. Mehr Information hierzu findet sich im *Userguide* von OpenFOAM (2011).

1 Parameter

OpenFOAM ist ein kommandozeilenbasierendes Programm. Daher steht keine einheitliche Benutzeroberfläche zu Verfügung. Die für das Programm wichtigen Informationen sind in einzelne Dateien zusammengefasst, die mit einem beliebigen Editor bearbeitet werden können. Die einzelnen Dateien beinhalten die Informationen für einen einzelnen Parameter, z. B. das Geschwindigkeitsfeld, oder einzelne Themenkomplexe, wie Fluideigenschaften. Die Funktionen und Einstellungen der Parameter werden im Anschluss genau erklärt.

```
1 /*-----* C++ *-----*\
2 |=====|
3 | \\ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4 | \\ / O p e r a t i o n | Version: 2.0
5 | \\ / A n d | Web: www.OpenFOAM.org
6 | \\ / M a n i p u l a t i o n |
7 /*-----*\
8 FoamFile
9 {
10     version      2.0;
11     format        ascii;
12     class         volScalarField;
13     location      "0";
14     object        alpha1;
15 }
16 // *****
17
18 dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];
```

Abbildung 101: Kopfbereich der Dateien

Jede dieser Dateien beginnt mit einem sog. *Header* (Abb. 101), in dem verschiedene Informationen hinterlegt sind. Im Bsp. Abb. 1 ist der Header für das „*alpha1*“- Feld zu sehen. Alle blau markierten Bereiche sind nur Anmerkungen und Erklärungen und werden vom Programm nicht beachtet; sie sind auskommentiert. Die pinken Werte werden als numerische Werte erkannt. Folgende Information können aus diesem *Header* gelesen werden: Z. 10 beschreibt die verwendete Programmversionen, Z. 11 den verwendeten Zeichensatz der Datei, Z. 12 die Art des Feldes (hier skalare Werte), Z. 13 den Ort der Datei, Z. 14 den Parameter und Z. 18 die Dimension.

Die Dimension einer Größe wird durch das Si- System beschrieben (OpenFOAM, 2011, S. 107 f.). In Abb. 101 ist *alpha1* eine dimensionslose Größe, daher $[0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]$, siehe Abb. 102. Geschwindigkeit $\text{m}^1 \text{s}^{-1}$ würde mit $[0\ 1\ -1\ 0\ 0\ 0\ 0]$ beschrieben werden.

[A B C D E F G]

A = Masse [kg]

B = Länge [m]

C = Zeit [s]

D = Temperatur [K]

E = Molare Masse [kg/mol]

F = Stromstärke [A]

G = Lichtstärke [cd]

Abbildung 102: Dimensionen in OpenFOAM

Die Dateien sind am Anfang in drei Ordner, „0“, „constant“ und „system“, verteilt. Für jeden berechneten Zeitschritt, der gespeichert werden soll, wird ein zusätzlicher Ordner angelegt, in dem die entsprechenden Dateien für diesen Zeitschritt gespeichert werden. Die Dateien in den berechneten Zeitschritten stimmen namentlich mit den Dateien im Ordner „0“ überein. Die genaue Verteilung der Dateien kann der Gliederung in den folgenden Abschnitten des Anhangs **B** entnommen werden.

1.1 0- und Zeitverzeichnisse

Der „0“- Ordner und die im Laufe der Simulation entstehenden Zeitordner enthalten die Information über die einzelnen Felder (OpenFOAM, 2011, S. 104). Diese Felder enthalten sowohl die Randbedingungen für das jeweilige Feld als auch die Information über den Zustand des Feldes in jeder einzelnen Zelle zu diesem Zeitpunkt. Der Zustand wird entweder durch eine Skalargröße, wie etwa beim Druck, oder durch eine Vektorgöße, wie bei der Geschwindigkeit, beschrieben. Da ein Rechengitter oft aus vielen Tausenden, wenn nicht Millionen von Zellen besteht, werden an dieser Stelle nur die Anfangs- und Randbedingungen für jedes Feld zum Zeitpunkt 0 besprochen. Die Randbedingungen bleiben in der Regel und, je nach Randbedingung, über die gesamte Simulation stabil. Die mathematische Beschreibung der Randbedingungen erfolgt in 4.1.5.2.

In den Dateien, wie in Bsp. Abb. 104, tauchen drei Randgebiete auf: „defaultFaces“, „bottle_wall“ und „bottle_outlet“. Die Randgebiete „bottle_wall“ und „bottle_outlet“ entsprechen den physikalischen Randgebieten der Flasche, wie in Abb. 103 dargestellt. Das Randgebiet „defaultFaces“ ist dem Gittergenerierungsprozess geschuldet. Da diesem Randgebiet aber keine Zellen

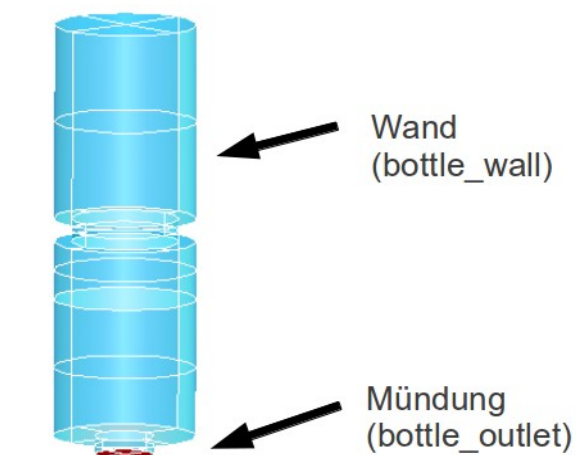


Abbildung 103: Randgebiete in den Simulationen

zugeordnet sind (Abb. 110, Z. 8), hat dieses keine Auswirkung auf die Simulation. Aus technischen Gründen kann der Eintrag dieses Randgebietes nicht entfernt werden und taucht daher auf, ohne eine Auswirkung zu haben. Auf die wiederholte Erklärung dieser Tatsache und die Beschreibung der gewählten Einstellung wird im Weiteren verzichtet.

1.1.1 *alpha1*

```

1 // ****
2
3 dimensions      [0 0 0 0 0 0];
4
5 internalField    uniform 1;
6
7 boundaryField
8 {
9     defaultFaces|
10    {
11        type      empty;
12    }
13    bottle_wall
14    {
15        type      zeroGradient;
16    }
17    bottle_outlet
18    {
19        type      inletOutlet;
20        inletValue uniform 0;
21        value      uniform 0;
22    }
23 }
24
25
26 // ****

```

Abbildung 104: „alpha1“- Datei

Der „alpha1“- Wert ist Bestandteil der *Volume of Fluid*- Methode, 4.1.3, und beschreibt die Phasenverteilung in der Zelle. Der „alpha1“- Wert kann zwischen 0 und 1 variieren. Ein Wert von 1 bedeutet, dass die Zelle komplett mit der 1. Phase gefüllt ist und somit keine Bestandteile der 2. Phase vorhanden sind. Ein Wert 0 bedeutet, dass die Zelle keine Bestandteile der 1. Phase enthält, somit komplett mit der 2. Phase gefüllt ist. Werte zwischen 0 und 1 beschreiben die anteilige Füllung der Zelle mit beiden Fluiden. Dementsprechend ist „alpha1“ eine dimensionslose Kennzahl, siehe Abb. 104 Z. 3.

Die Anfangsbedingung für die Simulation, beschrieben in 4.4, sieht vor, dass die gesamte Flasche mit Wasser gefüllt ist, daher Abb. 104 Z. 5 „*internalField uniform 1*“. Dieser Eintrag wird ab dem nächsten Zeitschritt durch den konkreten Wert, den die Zellen zum jeweiligen Zeitpunkt haben, ersetzt.

Die Randbedingungen der Simulation sind in den Z. 7-22 beschrieben. Für die Flaschenwand wird eine Neumann Randbedingung angenommen. Die Mündung wird durch eine adaptive Randbedingung beschrieben, welche zwischen *Dirichlet* und *Neumann* je nach Strömungsrichtung umschaltet (OpenFOAM, 2011, S. 122 ff.). Die einströmende Phase ist mit dem „alpha1“- Wert 0 festgelegt (Abb. 104 Z. 20), welcher der Luftphase zugeordnet ist. Die Beschreibung der Theorie erfolgt in 4.1.3.

1.1.2 *epsilon*

„ ϵ “ ist ein Bestandteil des k - ϵ -RNG - Modells (4.1.2.2), welches genutzt wird, um die auftretende Turbulenz (4.1.2) zu modellieren. „ ϵ “ beschreibt die Dissipation des Systems, die in m^2/s^3 (Abb. 105 Z. 3) gemessen wird.

```
1 // * * * * * //
2
3 dimensions      [0 2 -3 0 0 0];
4
5 internalField    uniform 0.152;
6
7 boundaryField
8 {
9
10  bottle_wall
11  {
12      type        epsilonWallFunction;
13      value        uniform 0.152;
14  }
15  bottle_outlet
16  {
17      type        inletOutlet;
18      inletValue    uniform 0.152;
19      value        uniform 0.152;
20  }
21  defaultFaces
22  {
23      type        empty;
24  }
25 }
26
27
28 // * * * * * //
```

Abbildung 105: „epsilon“- Datei

Zum Startzeitpunkt wird angenommen, dass eine gewisse Menge an Dissipation gegeben ist. Daher muss in Abb. 105 Z. 5 für das gesamte Feld, also in jeder einzelnen Zelle, ein Startwert angegeben werden. Dieser wird wie in 4.1.2.2 beschrieben bestimmt.

Die Randbedingungen der Simulation sind wie folgt: Für die Flaschenwand wird eine einheitliche Wandfunktion mit dem Wert 0,0152 verwendet. Die Beschreibung der Wandfunktionen erfolgt in 4.1.5.2. Für die Mündung wird die variable Randbedingung „inletOutlet“ (Abb. 105 Z. 20) genutzt, welche abhängig von der Strömungsrichtung zwischen *Dirichlet*- und *Neumann*- Randbedingung hin- und herschaltet, s. 4.1.5.2.

1.1.3 k

„ k “ ist ein Bestandteil des k - ϵ - RNG - Modells (4.1.2.2), welches genutzt wird, um die auftretende Turbulenz (4.1.2) zu modellieren. „ k “ beschreibt die turbulente Bewegungsenergie des Systems, die in m^2/s^2 (Abb. 106 Z. 3) gemessen wird.

```

1 // ****
2
3 dimensions      [0 2 -2 0 0 0 0];
4
5 internalField    uniform 0.01;
6
7 boundaryField
8 {
9     defaultFaces
10    {
11        type      empty;
12    }
13    bottle_wall
14    {
15        type      kqRWallFunction;
16        value      uniform 0.01;
17    }
18    bottle_outlet
19    {
20        type      inletOutlet;
21        inletValue uniform 0.01;
22        value      uniform 0.01;
23    }
24 }
25
26
27 // ****

```

Abbildung 106: „ k “- Datei

Zum Startzeitpunkt wird angenommen, dass nur sehr wenig turbulente Bewegungsenergie im System vorhanden ist, da die Flüssigkeit in Ruhe ist. Dennoch muss in Abb. 106 Z. 5 für das gesamte Feld, also in jeder einzelnen Zelle, ein Startwert vorgegeben werden. Dieser wird wie in 4.1.2.2 beschrieben bestimmt.

Die Randbedingungen der Simulation sind wie folgt: Für die Flaschenwand wird eine einheitliche Wandfunktion mit dem Wert 0,01 verwendet. Die Beschreibung der Wandfunktionen erfolgt in 4.1.5.2. Für die Mündung wird die variable Randbedingung „*inletOutlet*“ (Abb. 106 Z. 20) genutzt, welche abhängig von der Strömungsrichtung zwischen *Dirichlet*- und *Neumann*- Randbedingung hin- und herschaltet, s. 4.1.5.2.

1.1.4 p_rgh

Zur Berechnung des Drucks $p[\frac{kg}{m \cdot s^2} = \frac{N}{m^2}]$ in OpenFOAM wird nicht direkt nach dem Gesamtdruck gelöst, sondern nach dem dynamischen Druck (Staudruck), s. Abb. 107 Z. 3. Die Größe p_{rgh} entspricht dem Gesamtdruck p_g abzüglich des statischen Drucks $p_s = \rho \cdot g \cdot h$, wobei ρ die Dichte, g die Gravitation und h die Höhe darstellen (mehr hierzu in 4.1). Im Weiteren wird der Begriff Druck für den p_d -Wert verwendet.

$p_d = p - \rho \cdot g \cdot h$	(1)
----------------------------------	-----

```

1 // *****
2
3 dimensions      [1 -1 -2 0 0 0];
4
5 internalField    uniform 0;
6
7 boundaryField
8 {
9     defaultFaces
10    {
11        type      zeroGradient;
12    }
13    bottle_wall
14    {
15        type      buoyantPressure;
16        value      uniform 0;
17    }
18    bottle_outlet
19    {
20        type      totalPressure;
21        p0        uniform 0;
22        U;
23        phi;
24        rho;
25        psi;
26        gamma     1;
27        value      uniform 0;
28    }
29 }
30 }
31
32 // *****

```

Abbildung 107: „p_rgh“-Datei

Zur Vereinfachung wird für den Druck der relativ Druck verwendet, der am Anfang gleichmäßig auf Null gesetzt wird (Abb. 107 Z. 5), da angenommen wird, dass zu Beginn keine Druckunterschiede in der Flasche herrschen. Der Erinnerung halber sei erwähnt, dass der statische Druck für den p_d -Wert irrelevant ist. Daher gibt es keine Druckunterschiede in der Flasche zu Beginn.

Für die gesamten Simulationen wird der relative Druck verwendet, der auf 0 festgesetzt wird. Dies ist möglich, da nur Druckunterschiede für die Simulation Relevanz haben. Die Werte für Dichte, Viskosität usw. werden für Absolutdruck 1 atm gewählt. Diese entspricht in den Simulationen Relativdruck 0. An den Wänden der Flaschen (Abb. 107 Z. 13-17) wird die Randbedingung „*bouyountPressure*“ verwendet; die Randbedingung ist eine *Neumann*- Randbedingung 4.1.5.2, welche mit Hilfe des Umgebungsdrucks, hier 0 (Abb. 107 Z. 16), definiert wird.

An der Mündung der Flasche hängt der Druck von der Geschwindigkeit der einströmenden Luft bzw. der Geschwindigkeit des ausströmenden Wassers ab. Die Randbedingung „*totalPressure*“ (Abb. 107 Z. 19-28), welche jeweils abhängig vom Geschwindigkeitsfeld einen festen Wert berechnet, kann als adaptive *Dirichlet*- Randbedingung beschrieben werden (4.1.5.2).

$$p_0 = p + \frac{1}{2} \rho |U|^2 \quad (\text{OpenFOAM, 2011, S. 137})$$

(2)

1.1.5 U

```
1 // *****  
2  
3 dimensions      [0 1 -1 0 0 0];  
4  
5 internalField    uniform (0 0 0);  
6  
7 boundaryField  
8 {  
9     defaultFaces  
10    {  
11        type          fixedValue;  
12        value          uniform (0 0 0);  
13    }  
14    bottle_wall  
15    {  
16        type          fixedValue;  
17        value          uniform (0 0 0);  
18    }  
19    bottle_outlet  
20    {  
21        type          inletOutlet;  
22        inletValue     uniform (0 0 0);  
23        value          uniform (0 0 0);  
24    }  
25 }  
26  
27  
28 // *****
```

Abbildung 108: „U“- Datei

Die „U“- Datei beschreibt das Geschwindigkeitsfeld in der Flasche. Die Dimension ist m/s (Abb. 109 Z. 3). Die Geschwindigkeit am Anfang ist in der Flasche mit (0 0 0) festgelegt (Abb. 109 Z. 5). Die Geschwindigkeit wird in der Vektorschreibweise, basierend auf einem kartesischen Koordinatensystem, notiert. Für die Randbedingungen Wand und Flasche (Abb. 109 Z. 16) wird an der Wand eine *Dirichlet*- Randbedingung und an der Mündung die adaptive „inletOutlet“ (OpenFOAM, 2011, S. 122 ff.) Bedingung genutzt. Der Wert der *Dirichlet*- Randbedingung wird jeweils auf (0 0 0) festgelegt. Die Mündungsrandbedingung ist abhängig von der Strömungsrichtung. Im Allgemeinen ist sie „zeroGradient“, welches einer Neumann-Randbedingung entspricht. Beim Einfließen wechselt sie jedoch zu einer *Dirichlet*- Randbedingung mit dem Wert (0 0 0). Eine genaue Diskussion der Randbedingung erfolgt in 4.1.5.2.

1.2 constant- Verzeichnisse

Im „*constant*“- Ordner sind die Informationen über das Rechengitter, die Materialien, das Turbulenzmodell, die Umgebungsbedingungen und weitere konstante Größen gespeichert. Diese Größen ändern sich in der Regel über die gesamte Laufzeit der Simulation nicht. Ausnahmen, wie etwa eine veränderte Schwerkraft oder plastische Verformung der Geometrie, sind möglich.

1.2.1 *polyMesh* und *triSurface*- Ordner

In diesem Ordner sind alle Informationen zum Gitter gespeichert. Das Gitter beschreibt sowohl die Geometrie als auch jede einzelne Zelle. Zusätzlich können in den Dateien, die in den Ordnern enthalten sind, Informationen zur Geometrieerzeugung hinterlegt werden (OpenFOAM, 2011, S. 103 ff.).

Von besonderer Bedeutung im Unterordner *polyMesh* ist die Datei *boundary*, da dort die Art der Wandfunktion definiert wird. In diesem Bsp. (Abb. 109) ist die Mündung als *patch* und die Flaschenwand als *wall* definiert. Diese beiden Typen bestimmen, welche Einstellungen in den einzelnen Felddateien, wie *U* (Anhang B 1.1.5), *p_rgh* (Anhang B 1.1.4) usw., für die Wandfunktionen verwendet werden können.

```

1 // * * * * *
2
3 3
4 (
5     defaultFaces
6     {
7         type            empty;
8         nFaces          0;
9         startFace       140316;
10    }
11    bottle_outlet
12    {
13        type            patch;
14        nFaces          277;
15        startFace       140316;
16    }
17    bottle_wall
18    {
19        type            wall;
20        nFaces          20890;
21        startFace       140593;
22    }
23 )
24
25 // * * * * *
```

Abbildung 109: „*boundary*“- Datei

1.2.5 *transportProperties*

```

1 // ****
2
3 phase1
4 {
5     transportModel    Newtonian;
6     nu                nu [ 0 2 -1 0 0 0 ] 1e-06;
7     rho               rho [ 1 -3 0 0 0 0 ] 1000;
8 }
9
10 phase2
11 {
12     transportModel    Newtonian;
13     nu                nu [ 0 2 -1 0 0 0 ] 1.48e-05;
14     rho               rho [ 1 -3 0 0 0 0 ] 1;
15 }
16 }
17
18 sigma                sigma [ 1 0 -2 0 0 0 ] 0.07;
19
20
21 // ****

```

Abbildung 113: „*transportProperties*“- Datei

In der „*transportProperties*“- Datei sind die Eigenschaften der Fluide näher beschrieben. In den durchgeführten Simulationen (4.4) sind dies Wasser und Luft. Wasser entspricht in diesem Bsp. (Abb. 113) der „*phase1*“ und Luft der „*phase2*“. Zur Beschreibung dieser newtonschen Fluide wird die Dichte „*rho*“ kg/ m³, Abb. 113 Z. 7, und die kinematische Viskosität „*nu*“ m²/ s, Abb. 113 Z. 6, verwendet (OpenFOAM, 2011, S. 63). Die Werte werden mit der entsprechenden Dimension angegeben. Die Oberflächenspannung zwischen den Fluiden wird mit dem „*sigma*“- Wert N/ m in Abb. 113 Z. 18 beschrieben. Die Erläuterung der einzelnen Werte ist in 3.2 zu finden.

1.3 system- Verzeichnisse

Die Dateien im „system“- Verzeichnis dienen zur Steuerung der Simulation und bleiben gewöhnlich über die gesamte Laufzeit der Simulation unverändert.

1.3.1 controlDict

```
1 // * * * * *
2
3 application      interFoam;
4
5 startFrom        latestTime;
6
7 startTime        0;
8
9 stopAt           endTime;
10
11 endTime          5.2;
12
13 deltaT           0.001;
14
15 writeControl      adjustableRunTime;
16
17 writeInterval     0.01;
18
19 purgeWrite        0;
20
21 writeFormat       ascii;
22
23 writePrecision     9;
24
25 writeCompression  compressed;
26
27 timeFormat        general;
28
29 timePrecision      6;
30
31 runTimeModifiable yes;
32
33 adjustTimeStep    yes;
34
35 maxCo              0.5;
36 maxAlphaCo         0.5;
37
38 maxDeltaT          0.01;
39
40
41 // * * * * *
```

Abbildung 114: „controlDict“- Datei

In „controlDict“ werden die Einstellungen vorgenommen, welche den zeitlichen Berechnungsraum betreffen. Hierbei muss zwischen berechneten und gespeicherten Zeitschritten unterschieden werden. Die Anzahl der gespeicherten Zeitschritte ist in der Regel deutlich geringer als die der berechneten Zeitschritte. Konkret für dieses Bsp., Abb. 114, soll das Zeitintervall 0 (Z. 7) bis 5,2 s (Z. 11) betrachtet werden. Die Ergebnisse sollen alle 0,01 s (Z. 17) gespeichert werden, womit pro Sekunde 100 Speicherpunkte erzeugt werden. Die berechneten Zeitintervalle werden in dieser

Konfiguration durch die *Courant*-Zahl (*Co.*), welche von den auftretenden Geschwindigkeiten und der Zellgröße abhängt, bestimmt, v.g.l. 4.1.4. In dieser konkreten Simulation lag die berechnete Schrittweite im Durchschnitt bei $E-5$ s. Somit waren Informationen zu 10 000 Zeitpunkten gegeben. Die genaue *Co.* wird in Z. 35 und 36 vorgegeben. Hierbei wird zwischen einer allgemeinen *Co.*, welche nur die Zellgröße und Geschwindigkeit berücksichtigt, in Z. 35 und einer *Co.*, welche besonders die Phasengrenze berücksichtigt, in Z. 36 unterschieden. In Z. 38 wird die maximale Schrittweite auf 0,01 s festgelegt. Die Verwendung der *Co.*-Methode zur zeitlichen Schrittweitenbestimmung erfolgt in Z. 15, 31 und 34. Alternativ wäre auch eine feste Schrittweite möglich, s. OpenFOAM (2011, S. 62).

In der *ControlDict*-Datei wird zusätzlich das Format der gespeicherten Zeitschrittdateien definiert. In Z. 21 wird der Zeichensatz ASCII, in Z. 23 die Präzision auf 9 Dezimalstellen und in Z. 25 die Komprimierung mittels *Zip*-Format festgelegt.

1.3.2 *decomposeParDict*

```

1 // * * * * *
2
3 numberOfSubdomains 3;
4
5 method          scotch;
6
7 scotchCoeffs
8 {
9 }
10
11
12 distributed      no;
13
14 roots            ( );
15
16
17 // * * * * *

```

Abbildung 115: „*decomposeParDict*“-Datei

In der Datei „*decomposeParDict*“ werden die Einstellungen zum parallelen Rechnen (4.1.4.3) auf mehrere Prozessoren gelegt. Hierzu muss das Rechengebiet in einzelne Untergebiete zerlegt werden, für die der jeweilige Prozess berechnet wird. Die Anzahl der Teilgebiete wird in Z. 3 bestimmt, die verwendete Methode in Z. 4. Hier wird die „*scotch*“-Methode benutzt, welche die Anzahl der Zellen gleichmäßig über die Prozessoren verteilt und gleichzeitig die Anzahl der Grenzflächen zwischen den einzelnen Teilgebieten minimiert. In Z. 7-9 können Koeffizienten für die einzelnen Teilgebiete vorgegeben werden, falls unterschiedlich leistungsstarke Prozessoren verwendet werden. Wenn kein Eintrag in der Z. 8 vorliegt, erfolgt eine gleichmäßige Verteilung.

1.3.3 fvSolution

In der „fvSolution“-Datei werden die Lösungsmethoden und -algorithmen gewählt und eingestellt (OpenFOAM, 2011 S. 54). Zum besseren Verständnis der Einstellung ist Abb. 116 hilfreich, diese zeigt die Ausgabe, die OpenFOAM bei der Durchführung der Simulation gibt. In Z. 1- 4 wird für *alpha1* gelöst, in Z. 5- 16 wird für *p_rgh* gelöst, in Z. 17 wird für ϵ gelöst, in Z. 18 wird für *k* gelöst, in Z. 21 wird die allgemeine *Courant*-Zahl berechnet, in Z. 22 wird die *Courant*-Zahl der Phasengrenze berechnet, in Z. 8 wird die Kontinuitätsabweichung berechnet, in Z. 23 wird die Größe des Zeitschritts ausgegeben und in Z. 24 wird der Zeitpunkt, der simuliert, wird ausgegeben. Die Ausgabe für die Lösung nach einer der Variablen, z. B. *p_rgh* in Z. 5, enthält zusätzlich Informationen über die verwendete Lösungsmethode „4.1.5“, hier GAMG, das anfängliche Residual, das finale Residual und die Anzahl der benötigten Iterationen. Insgesamt lässt sich der gesamte Lösungsprozess für einen einzelnen Zeitschritt nachvollziehen und erkennen, wie schnell und wie genau eine Lösung gefunden werden konnte.

```
1 MULES: Solving for alpha1
2 Liquid phase volume fraction = 0.999998772 Min(alpha1) = 0 Max(alpha1) = 1.0000000
3 MULES: Solving for alpha1
4 Liquid phase volume fraction = 0.999995566 Min(alpha1) = 0 Max(alpha1) = 1.0000000
5 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.593745483, Final residual = 0.0131997829, No Iterations 1
6 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.137740117, Final residual = 0.00418019812, No Iterations 1
7 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.0115954623, Final residual = 0.000491624378, No Iterations 2
8 time step continuity errors : sum local = 2.29445561e-08, global = -1.63596948e-08, cumulative = -3.57313161e-08
9 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.0209768907, Final residual = 0.000568560807, No Iterations 2
10 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.00324575875, Final residual = 0.000158055425, No Iterations 2
11 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.000687597314, Final residual = 1.99606407e-05, No Iterations 3
12 time step continuity errors : sum local = 8.97827078e-10, global = -5.33805139e-10, cumulative = -3.62651212e-08
13 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.0127009137, Final residual = 0.000366253136, No Iterations 1
14 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.00312164558, Final residual = 0.000101187172, No Iterations 1
15 GAMG: Solving for p_rgh, Initial residual = 0.000269803164, Final residual = 1.25115824e-05, No Iterations 2
16 time step continuity errors : sum local = 5.53698086e-10, global = -4.94811539e-10, cumulative = -3.67599328e-08
17 DILUPBiCG: Solving for epsilon, Initial residual = 0.0108816398, Final residual = 8.85999411e-10, No Iterations 3
18 DILUPBiCG: Solving for k, Initial residual = 0.294981444, Final residual = 1.91705336e-10, No Iterations 4
19 ExecutionTime = 4.67 s ClockTime = 5 s
20
21 Courant Number mean: 4.44785376e-05 max: 0.388207925
22 Interface Courant Number mean: 7.05280276e-06 max: 0.388207925
23 deltaT = 0.00108843537
24 Time = 0.00455782
```

Abbildung 116: Lösungsausgabe einer Simulation

Der Lösungsprozess ist sowohl im Ganzen als auch im Einzelnen ein iterativer Prozess. Der genaue Ablauf des Lösungsprozesses ist in 4.1.5 dargestellt. Zuerst erfolgt die grobe Lösung, mit der dann im nächsten Schritt eine bessere Lösung gefunden werden kann usw. Diese Schleife wird so lange aufrechterhalten, bis gewisse Kriterien der Genauigkeit oder Wiederholungszahl erfüllt sind. Diese Kriterien werden in der „fvSolution“-Datei zusammen mit den verwendeten Techniken eingestellt.

In Abb. 117, in Z. 5-26 sind die Einstellung für das anfängliche Druckfeld und in Z. 28- 41 für das weitere Druckfeld zusehen. Von besonderer Bedeutung ist die Festlegung der Toleranz, die sich auf das Residual bezieht, in Z. 23 und die Anzahl der maximalen Iterationen in Z. 24, da diese Einstellungen bestimmen wie oft der einzelne Lösungsschritt wiederholt wird, zusätzlich kann die Art des Lösungsverfahrens (4.1.5.4), des *Smoother* und des *Preconditioner* festgelegt werden. In den Zeilen weiteren Zeilen erfolgt die genaue Einstellung der Löser s. OpenFOAM (2011, S. 122 ff.). Abb. 18 Z. 43- 65 zeigt die Einstellung für das finale Druckfeld entsprechend dem iterativen Lösungsprinzip wird die Genauigkeit immer besser.

```

1 // * * * * *
2
3 solvers
4 {
5     pcorr
6     {
7         solver          PCG;
8         preconditioner
9         {
10             preconditioner  GAMG;
11             tolerance       0.001;
12             relTol          0;
13             smoother        DICGaussSeidel;
14             nPreSweeps      2;
15             nPostSweeps    2;
16             nBottomSweeps  2;
17             cacheAgglomeration false;
18             nCellsInCoarsestLevel 10;
19             agglomerator    faceAreaPair;
20             mergeLevels    1;
21         }
22
23         tolerance         0.0001;
24         relTol             0;
25         maxIter            100;
26     }
27
28     p_rgh
29     {
30         solver            GAMG;
31         tolerance         1e-08;
32         relTol            0.05;
33         smoother          DICGaussSeidel;
34         nPreSweeps        2;
35         nPostSweeps       2;
36         nFinestSweeps     2;
37         cacheAgglomeration false;
38         nCellsInCoarsestLevel 10;
39         agglomerator       faceAreaPair;
40         mergeLevels       1;
41     }
42

```

Abbildung 117: „fvSolution“- Datei 1. Teil

Parameter

Abb. 118- 119 Z. 67- 97 zeigen die Einstellung des Lösungsverfahrens für U, k, epsilon und nuTilda. Die verwendeten Lösungsverfahren sind in 4.1.5.4 beschrieben. In Abb. 19 Z. 100- 106 werden die Werte für die Unterrelaxation (4.1.5.4) festgelegt.

```
43 p_rghFinal
44 {
45     solver          PCG;
46     preconditioner
47     {
48         preconditioner  GAMG;
49         tolerance       1e-08;
50         relTol          0;
51         nVcycles        2;
52         smoother        DICGaussSeidel;
53         nPreSweeps      2;
54         nPostSweeps     2;
55         nFinestSweeps   2;
56         cacheAgglomeration false;
57         nCellsInCoarsestLevel 10;
58         agglomerator    faceAreaPair;
59         mergeLevels     1;
60     }
61     tolerance       1e-08;
62     relTol          0;
63     maxIter         20;
64 }
65 }
66
67 U
68 {
69     solver          smoothSolver;
70     smoother        GaussSeidel;
71     tolerance       1e-06;
72     relTol          0;
73     nSweeps         1;
74 }
75
76 k
77 {
78     solver          PBiCG;
79     preconditioner  DILU;
80     tolerance       1e-08;
81     relTol          0;
82 }
83
84 epsilon
85 {
86     solver          PBiCG;
87     preconditioner  DILU;
88     tolerance       1e-08;
89     relTol          0;
90 }
```

Abbildung 118: „fvSolution“- Datei 2. Teil

```
90
91 nuTilda
92 {
93     solver          PBiCG;
94     preconditioner  DILU;
95     tolerance       1e-08;
96     relTol          0;
97 }
98 }
99
100 relaxationFactors
101 {
102     p 0.4;
103     U 0.7;
104     k 0.7;
105     epsilon 0.7;
106 }
107
108 PISO
109 {
110     momentumPredictor no;
111     nCorrectors        2;
112     nNonOrthogonalCorrectors 2;
113     nAlphaCorr         2;
114     nAlphaSubCycles    1;
115     cAlpha             1;
116 }
```

Abbildung 119: „fvSolution“- Datei 3. Teil

1.3.4 fvSchemes

In der „fvSchemes“-Datei werden die Schemata, die zur Approximation genutzt, werden festgelegt. Informationen über die Technik sind in 4.1.5.3 zu finden, und die genaue Einstellung dieser ist in OpenFOAM (2011 S. 113 ff.) zu finden. Im Einzelnen werden die Schemata in Z. 3-6 für zeitliche Ableitungen, in Z. 8- 11 für Gradienten, in Z. 13- 22 für Divergenz, in Z. 24- 27 für Laplace- Operatoren, in Z. 29- 32 für Punkt zu Punkt interpolation und Z. 34- 37 für oberflächennormale Gradienten festgelegt. In Z. 39- 45 werden die Felder festgelegt, durch die der *Flux* erzeugt wird, welcher nach dem Lösen der Druckgleichung berechnet wird (OpenFOAM, 2011, S. 122).

```

1 // *****
2
3 ddtSchemes
4 {
5     default          Euler;
6 }
7
8 gradSchemes
9 {
10    default          Gauss linear;
11 }
12
13 divSchemes
14 {
15     div(rho*phi,U)  Gauss limitedLinearV 1;
16     div(phi,alpha)  Gauss limitedLinear 1;
17     div(phi,b,alpha) Gauss interfaceCompression;
18     div(phi,k) Gauss linearUpwind cellMDLimited Gauss linear 1;
19     div(phi,epsilon) Gauss linearUpwind cellMDLimited Gauss linear 1;
20     div(phi) Gauss linear;
21     div(U) Gauss linear;
22 }
23
24 laplacianSchemes
25 {
26     default          Gauss linear corrected;
27 }
28
29 interpolationSchemes
30 {
31     default          linear;
32 }
33
34 snGradSchemes
35 {
36     default          corrected;
37 }
38
39 fluxRequired
40 {
41     default          no;
42     p_rgh;
43     pcorr;
44     alpha;
45 }
46
47
48 // *****

```

Abbildung 120: „fvSchemes“-Datei

2 Verfahrensweisen

2.1 OpenFOAM-Versionen

Die vorgestellten Simulationen sind mit OpenFOAM Version 1.7.1 gerechnet worden. Neuere Versionen und Änderungen der Syntax, die mit den neuen Versionen einhergehen, können hier nicht berücksichtigt werden. Oft müssen jedoch nur kleinere Änderungen in den Dateien vorgenommen werden, damit diese auch in neueren Versionen lauffähig sind, s. die jeweils aktuellen Userguides (OpenFOAM, 2011).

2.2 Verfahrensweise zur Gittergenerierung

Die Gittergenerierung ist ein wichtiger Schritt bei der Vorbereitung einer Simulation, wobei ein geeignetes Gitter so wenige Zellen wie möglich hat, aber nicht weniger, um sowohl eine realisierbare Rechenzeit als auch die Korrektheit der Ergebnisse zu gewährleisten. Die vorgestellte Methode zur Gittergenerierung wurde in der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Velten in Zusammenarbeit von Herrn C. Meister und mir entwickelt. Die Methode beruht auf der Prämisse, nur F/OSS zu verwenden.

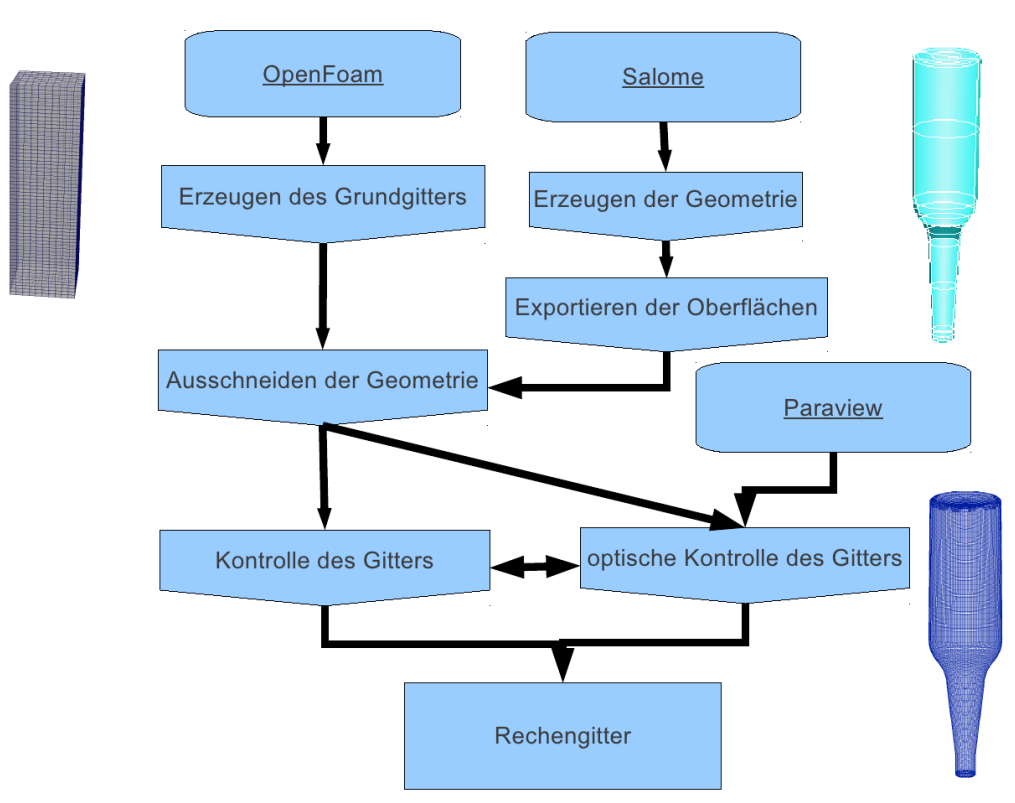


Abbildung 121: Flussdiagramm Gittergenerierung

Einen Überblick über den gesamten Prozess gibt das Flussdiagramm in Abb. 121. Zur Gittergenerierung werden im Wesentlichen drei Programme verwendet: OpenFOAM, Salome und Paraview, s. 4.2.

In Salome integriert ist ein *CAD*- Modul, welches zum Erzeugen und Konvertieren der geometrischen Daten genutzt wird. Zur Gittergenerierung werden die geometrischen Informationen, getrennt nach Typ der Oberfläche, hier Flaschenwand und Mündung, im *.stl- Format exportiert. Nachdem die einzelnen Randgebiete exportiert worden sind und als ASCII-Dateien vorliegen, werden diese mit dem entsprechenden Namen des Randgebiets versehen und zu einer *.stl- Datei zusammengefügt.

Das in OpenFOAM integrierte Programm „*blockMesh*“ wird genutzt, um ein Grundgitter zu erzeugen. Aus diesem wird mit Hilfe des „*snappyHexMesh*“-Programms, welches auch in OpenFOAM vorhanden ist, die Oberfläche, die in der *.stl Datei hinterlegt ist, ausgeschnitten. Die genauen Parametereinstellungen für „*snappyHexMesh*“ und „*blockMesh*“ werden in den jeweiligen Dateien, die im „system“- und „constant“- Ordner hinterlegt sein müssen, vorgenommen. Genaue Informationen zu „*blockMesh*“ und „*snappyHexMesh*“ sind in OpenFOAM (2011, S. 127 ff.) zu finden.

Die Kontrolle des Rechengitters erfolgt mit der „*checkMesh*“- Funktion von OpenFOAM und Paraview. „*checkMesh*“ untersucht das Gitter auf verdrehte und falsche Zellen und Randgebiete. Paraview erlaubt die optische Kontrolle des Gitters.

2.3 Verfahrensweise bei Abbruch

Die mathematischen Lösungsverfahren sind nicht immer stabil, und im Laufe einer Simulation können sog. „*Blow-ups*“ entstehen (4.1.5). Diese resultieren in der Regel in einem komplett unphysikalischen Verhalten der Simulation und haben deren Abbruch zufolge. In den durchgeführten Simulationen waren besonders die k - und ε - Gleichung Ursache für derartige Phänomene. Da das Weiterrechnen nach einem solchen Abbruch nicht möglich ist, muss die Berechnung neu gestartet werden. Zwar ist ein kompletter Neustart der Simulation von Beginn an nicht nötig. Dennoch sollten die Speicherpunkte unmittelbar vor dem Abbruch gelöscht werden, um zu verhindern, dass das unphysikalische Verhalten Einfluss auf das Ergebnis hat oder dieses Problem wieder auftritt. In den hier vorliegenden Simulationen wurde das Zeitintervall der zu löschenden Speicherpunkte auf 0,3 s festgelegt.

Da bei unveränderten Rahmenbedingungen das nochmalige Auftreten des Fehlers wahrscheinlich ist, sollten zusätzlich die Berechnungsmatrix, die Lösungsschemen, die Relaxation, der Löser oder die Berechnungsschrittweite verändert werden, wobei meistens eine der genannten Möglichkeiten genügt. Die Größe der Matrix kann durch eine andere Verteilung der Parallelberechnungen erreicht werden. Hierzu sollte das Gitter zusammengesetzt und über eine geänderte Anzahl an Prozessoren wieder neu verteilt werden. Da jeder Prozessor die Gleichungssysteme nur für ein Teilstück löst, verhindert dies häufig, dass der Fehler wieder auftritt. Die Lösungsschemen werden in „*fvSchemes*“- Dateien geändert, s. Anhang **B** 1.3.3. Die Relaxation und die Löser werden in der „*fvSolution*“- Datei bestimmt, s. Anhang **B** 1.3.4. Die Größe der Schrittweite wird durch die *Co.* bestimmt, welche in der „*controlDict*“ festgelegt wird, s. Anhang **B** 1.3.1.