



universität
wien

MASTERARBEIT / MASTER'S THESIS

Titel der Masterarbeit / Title of the Master's Thesis

Evaluierung numerischer Methoden für bauphysikalische Fragestellungen

verfasst von / submitted by

Michael Schaubmaier, BSc

angestrebter akademischer Grad / in partial fulfilment of the requirements for the degree of

Master of Science (MSc)

Wien, 2016 / Vienna, 2016

Studienkennzahl lt. Studienblatt /
degree programme code as it appears on
the student record sheet:

A 066 876

Studienrichtung lt. Studienblatt /
degree programme as it appears on
the student record sheet:

Masterstudium Physik

Betreut von / Supervisor:

ao. Univ.-Prof. i.R. Dr. Martin Neumann

Mitbetreut von / Co-Supervisor:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
1.1	Einführung und Motivation	7
1.2	Aufbau der Arbeit	9
2	Numerische und analytische Methoden ($\lambda = \text{const.}$)	10
2.1	Allgemein	10
2.2	Fourier'sche Differentialgleichung	15
2.3	Finite-Differenzen	17
2.3.1	Notation	17
2.3.2	Differenzenquotienten	17
2.3.3	Zeit-Integration	19
2.4	Verfahren	21
2.4.1	Explizites Euler-Verfahren	21
2.4.2	Crank-Nicholson-Verfahren	23
2.5	Stabilitätsanalyse	26
2.5.1	Von-Neumann-Stabilitätsanalyse	26
2.6	Implementierung	31
2.6.1	Anfangs- und Randbedingungen	31
2.6.2	Gleichungssysteme	34
2.7	Analytische Lösung	37
2.7.1	Formulierung des Problems	37
2.7.2	Fourier-Ansatz	37
2.7.3	Separationsansatz	40
2.7.4	Bestimmung der Fourier-Koeffizienten	42
2.8	Simulationen mit konstantem Diffusionskoeffizienten	45
3	Numerische Methoden ($\lambda \neq \text{const.}$)	55
3.1	Diskretisierung der Fourier'schen Differentialgleichung	55
3.1.1	Stabilitätsanalyse	58
3.2	Methode mit Hilfselementen	61
3.2.1	Stabilitätsanalyse	66
3.3	Simulationen mit nicht-konstantem λ , ρ und c	68
3.3.1	Simulation mit Hilfselementen	68
3.3.2	Simulation mit Fourier'scher Differentialgleichung	74
3.4	Gegenüberstellung	80
4	Anwendung	81
4.1	physikalisch-mathematischer Hintergrund	81
4.1.1	Diffusionskoeffizient	82

4.1.2	Sättigungsdampfdruck	83
4.1.3	Taupunkt und Kondensation	84
4.2	Umsetzung	85
4.3	Simulationen	87
4.3.1	Zeitlich veränderliche Randbedingungen	87
4.3.2	Periodische, zeitlich veränderliche Randbedingungen	99
4.3.3	Tauwasserausfall	103
4.3.4	Zusammenfassung der Simulationen	112
5	Diskussion	113
6	Anhang	114
6.1	Kurzfassung	114
6.2	Abstract	115

Abbildungsverzeichnis

1.1	schematischer Wandaufbau	8
2.1	Diskretisierung	10
2.2	Anfangs- und Randbedingung	14
2.3	explizites Euler-Verfahren	22
2.4	Informationsfluss explizites Euler-Verfahren	23
2.5	Crank-Nicholson-Verfahren	24
2.6	Informationsfluss Crank-Nicholson-Verfahren	25
2.7	numerische Fehlerquellen	26
2.8	Implementierung der Anfangs- und Randbedingungen	31
2.9	Informationsverlust ohne Vorgabe von Randbedingungen	33
2.10	stückweise lineare Funktion	43
2.11	qualitative Analyse: 50 cm Ziegel	47
2.12	Fehleranalyse 50 cm Ziegel	49
2.13	Fehleranalyse des CN-Verfahrens: $\Delta x = 0.01$ m, $\Delta t =$ variabel . . .	52
2.14	Fehleranalyse des CN-Verfahrens: $\Delta x =$ variabel, $\Delta t = 30$ s	54
3.1	adaptierte Fermi-Funktion	57
3.2	Konstruktion von Hilfselementen	62
3.3	qualitative Analyse der Verfahren mit Hilfselementen: 36 cm Ziegel, 14 cm EPS	69
3.4	qualitative Analyse der Verfahren mit Hilfselementen: 36 cm Ziegel, 14 cm EPS, vergrößerter Ausschnitt	71
3.5	Unterschied zwischen CN-Verfahren und Euler-Verfahren	73
3.6	Diskretisierung der Fourier'schen DGL bzw. Lösung der Wärmelei- tungsgleichung mit Methode der Hilfselementen	75
3.7	Simulation Fourier'sche DGL, variables Δx , $\gamma = 0.001$ m	77
3.8	Simulation der Fourier'schen DGL, variables Δx , $\gamma = 0.001$ m, ver- größerter Bereich der Grenzfläche	79
4.1	schematische Darstellung der Integration der parallelen Differenti- algleichungen für Temperatur- und Dampfdruckverteilung	86
4.2	Temperaturverlauf in 2-schichtigem Mauerwerksaufbau: 36 cm Zie- gel, 14 cm EPS	88
4.3	zeitlich veränderliche äußere Randbedingungen; Temperaturverlauf in 2-schichtigem Mauerwerk mit 36 cm Ziegel und 14 cm Außendäm- mung (EPS)	90
4.4	zeitliche Änderung der Temperatur an ausgewählten Stellen in ei- nem 2-schichtigen Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm Außen- dämmung (EPS)	92

4.5	zeitlich veränderliche äußere Randbedingungen; Temperaturverlauf in 2-schichtigem Mauerwerk mit 14 cm EPS (Innendämmung) und 36 cm Ziegel	94
4.6	zeitliche Änderung der Temperatur an ausgewählten Stellen in einem 2-schichtigem Mauerwerk aus 14 cm EPS (Innendämmung) und 36 cm Ziegel	96
4.7	zeitliches Ausbreitungsverhalten der Temperaturmaxima im Ziegel von außen nach innen bei einer örtlichen Auflösung von 2 cm	98
4.8	zeitlich periodische Randbedingungen bei einem System aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS	100
4.9	vergrößerter Ausschnitt des Temperaturverlaufs vom Ziegel und EPS bei zeitlich periodischen Randbedingungen	101
4.10	zeitlich periodische Änderung der Temperatur an ausgewählten Stellen in einem 2-schichtigem Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm Außendämmung (EPS)	102
4.11	Temperatur- und Dampfdruckprofile in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS	105
4.12	zeitabhängige Dampfdruckprofile und Sättigungsdampfdrücke in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS . . .	107
4.13	Temperatur- und Dampfdruckprofile in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 14 cm EPS und 36 cm Ziegel	109
4.14	zeitabhängige Dampfdruckprofile und Sättigungsdampfdrücke in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 14 cm EPS und 36 cm Ziegel . . .	111

Tabellenverzeichnis

2.1	materialspezifische Parameter	45
2.2	Parameter zu Abbildung 2.11	47
2.3	Parameter zu Abbildung 2.13	50
2.4	Parameter zu Abbildung 2.14	51
3.1	Parameter zu Abbildung 3.3	68
3.2	Parameter zu Abbildung 3.6	74
3.3	Parameter zu Abbildung 3.7	76
4.1	Wasserdampfdiffusionswiderstände	83
4.2	Parameter zu Abbildung 4.2	87
4.3	Parameter zu Abbildung 4.3	89
4.4	Energiewerte bei einem System aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS (Außendämmung)	93
4.5	Parameter zu Abbildung 4.5	95
4.6	Energiewerte bei einem System aus 14 cm EPS (Innendämmung) und 36 cm Ziegel	97
4.7	Randbedingungen	103
4.8	Parameter zu Abbildung 4.11	104
4.9	Parameter zu Abbildung 4.13	108

1 Einleitung

1.1 Einführung und Motivation

Numerische Methoden zur Lösung von naturwissenschaftlichen Problemen bzw. Fragestellungen werden heutzutage immer häufiger eingesetzt.

Ein Hauptgrund hierfür ist einerseits die immer höher werdende Rechenleistung und Performance der Personal Computer und andererseits die Methodik an sich. Denn bei vielen physikalischen Gesetzen, welche durch gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen beschrieben werden, stößt man mit der analytischen Lösbarkeit an die Grenzen.

Entweder ist überhaupt keine analytische Lösung möglich oder, wenn doch, dann oft nur in einer nicht geschlossenen Form (z.B.: unendliche Reihe).

Die numerische Lösungsmethodik stellt deswegen aber keine Einschränkung dar, da durch die richtige Wahl der Diskretisierung man sich theoretisch beliebig nahe an die analytische Lösung herantasten kann. Vielmehr erweitert diese die mathematische Werkzeugkiste und die Möglichkeiten, sodass immer häufiger numerische Methoden zum Einsatz kommen. Gerade bei realistischen, also nicht-idealisierten, mathematischen Beschreibungen physikalischer Probleme oder Prozesse kommt man daran nicht vorbei. Anders ausgedrückt, erst durch die Möglichkeit der Verwendung computergestützter numerischer Methoden konnten viele mathematische Fragestellungen überhaupt erfolgreich angegangen werden.

Ein großes Einzugsgebiet stellen die computergestützten numerischen Methoden in den Ingenieurwissenschaften dar. Egal ob durch Finite-Differenzen-Methoden oder Finite-Elemente-Methoden werden Bereiche in der Automobilbranche, im Flugzeugbau bis hin zur Berechnung von Wärmeverteilungen in Pumpen erfolgreich angegangen. Man ersieht schon die Wichtigkeit und den Nutzen, der durch dieses eher neuartige Gebiet möglich wird.

Deswegen wird in der vorliegenden Arbeit primär auf numerische Methoden (insbesondere Finite-Differenzen-Methoden) eingegangen, um diese auf in der Bauphysik relevante Fragestellungen anzuwenden.

Der Bereich der Bauphysik stellt für mich persönlich ein besonders interessantes Themengebiet dar, da ich selbst in den letzten Jahren dort immer wieder tätig war. Zum anderen wirft dieses Thema praktisch relevante Fragen auf, die in gewisser Weise jeden von uns betreffen.

Die nachfolgende Abbildung soll einen kurzen Einblick in ein typisch bauphysikalisches Problem geben, welches auch Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist.

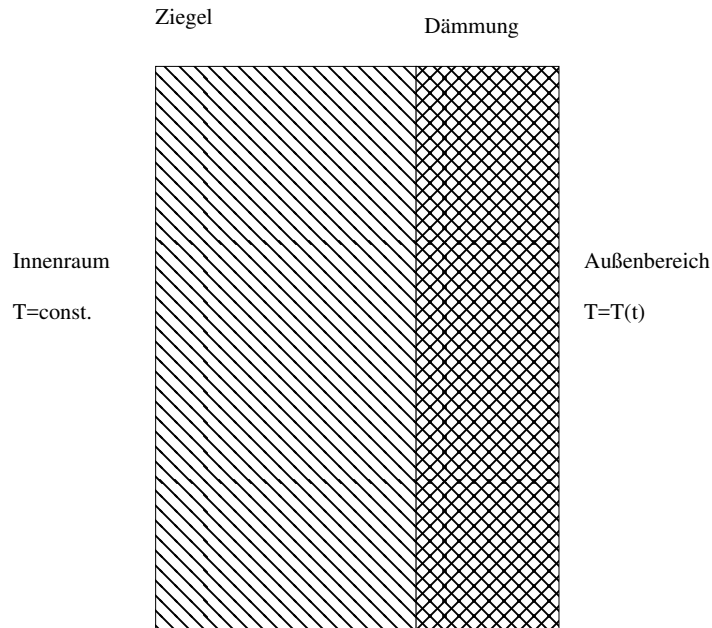


Abbildung 1.1: schematischer Wandaufbau

Die Abbildung zeigt einen eindimensionalen Mauerwerksaufbau (also Ausschnitt einer „unendlich ausgedehnten“ Wand), wobei der angrenzende Innenraum (links) eine zeitlich konstante Temperatur aufweist. Beim Außenbereich (rechts) hingegen, kann eine zeitlich veränderliche Temperatur vorliegen. Diese Annahmen spiegeln die realen Verhältnisse wider, da im Innenbereich meist eine annähernd konstante, bis auf ein paar wenige °C, Temperatur vorherrscht. Dementsprechend ist zu erwarten, dass starke Temperaturschwankungen im Außenbereich hauptsächlich in der Dämmung eine Rolle spielen.

Ziel dieser Arbeit ist einerseits die Evaluierung verschiedener numerischer Methoden im Hinblick auf Umsetzbarkeit, Genauigkeit, und Performance, bezüglich einer derartigen bauphysikalischen Fragestellung, sowie andererseits die Simulation des Temperaturverhaltens (aber auch der Wasserdampfdiffusion bzw. der Kon-

densatbildung), um Erkenntnis darüber zu erlangen, unter welchen Bedingungen bzw. Umständen ein Mauerwerksaufbau geeignet ist oder eben nicht. Zum anderen unterstützen derartige Simulationen die Beurteilung analoger experimenteller Versuche bzw. helfen zur Planung eines bevorstehenden Experimentes in Form von Anhaltspunkten.

Somit stellt die Zusammenführung von theoretischen (idealisierten) Simulationen und experimentellen Versuchen die beste Kombination dar, um Aufschlüsse über verschiedene Systeme zu erzielen.

1.2 Aufbau der Arbeit

Die folgenden Überlegungen sollen als ein kurzer Überblick dienen und als Leitfaden für ein besseres Verständnis bezüglich des Aufbaus der vorliegenden Arbeit gelten.

Im nachfolgenden Kapitel werden systematisch verschiedene numerische Methoden zur Lösung der 1-dimensionalen Wärmeleitungsgleichung hergeleitet und deren Anwendbarkeit evaluiert.

Im Prinzip lassen sich diese in zwei verschiedene Klassen unterteilen:

- Methoden mit Hilfselementen
- direkte Methoden

Bei der „Methode mit Hilfselementen“ wird die bekannte Wärmeleitungsgleichung (mit konstanter Wärmeleitfähigkeit λ) als Basis zur Berechnung eines Systems mit einer nicht-konstanten Wärmeleitfähigkeit verwendet. Dabei kommen sog. Hilfselemente zum Einsatz, die der Ortsabhängigkeit Rechnung tragen.

Hingegen wird bei der „direkten Methode“ die verallgemeinerte partielle Differentialgleichung (mit ortsabhängiger Wärmeleitfähigkeit λ) verwendet (Fourier'sche Differentialgleichung).

Zudem soll, wenn möglich, die numerische Lösung mit der analytischen Lösung verglichen und beurteilt werden.

Im letzten Kapitel werden zusätzlich zum eigentlichen Simulationsprogramm verschiedene kleine Programme erstellt, die einerseits die Anfangs- und Randbedingungen initialisieren und andere, die den instationären Verlauf der gekoppelten Temperatur- und Feuchteströme (Wasserdampfströme) berechnen.

2 Numerische und analytische Methoden ($\lambda = \text{const.}$)

2.1 Allgemein

Da bei Verwendung computergestützter numerischer Methoden nur endlich viele diskrete Werte gespeichert werden können, muss die ursprüngliche gewöhnliche oder partielle Differentialgleichung diskretisiert und in Form von Differenzengleichungen auf einem endlichen Gitter gelöst werden.

Das Gitter auf dem die diskretisierte Differentialgleichung gelöst werden soll, weist in unserem Fall eine äquidistante Schrittweite auf. Durch die Diskretisierung wird die gesuchte Funktion nur an den Knotenpunkten (siehe Abb. 2.1, Seite 10) ausgewertet. Unter geeigneten Voraussetzungen macht die gesuchte Lösung keine

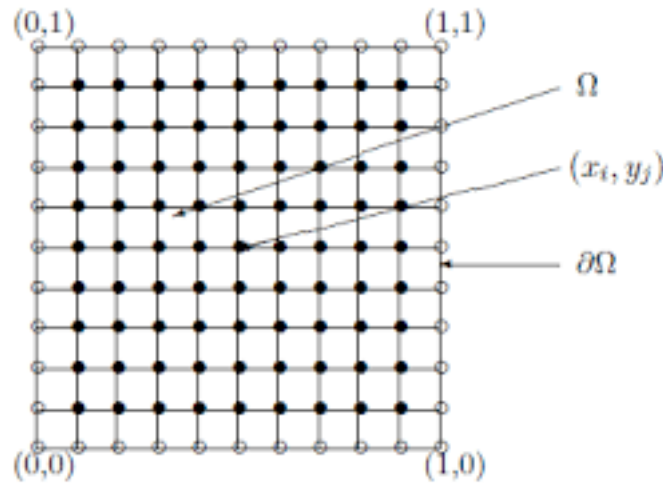


Abbildung 2.1: [1] Diskretisierung eines Randwertproblems auf dem Gebiet Ω mit äquidistanter Schrittweite

sprungartigen (kurzwelligen) Änderungen zwischen den einzelnen Knotenpunkten, sodass die numerische Lösung eine gute langwellige Näherung darstellt.

Die Beschränkung auf die einzelnen Knotenpunkte bzw. das Gitter stellt aber keine Einschränkung dar, da die Diskretisierungsweite (Gitterpunktweite) beliebig klein (unter Berücksichtigung der Darstellbarkeit) gewählt werden kann.

Durch eine geeignete Wahl der Diskretisierungsschrittweite kann die Approximation, im Vergleich zur analytischen Lösung, verbessert werden.

Speziell bei bauphysikalischen Fragestellungen ergibt sich zwangsläufig ein endlich zu betrachtendes Intervall (siehe Abbildung 1.1). In Bezug auf diese Arbeit

nehmend, wäre als Beispiel, die Berechnung des Wärme- und Feuchteprofils (Wasserdampfprofil) durch ein Mauerwerk, geeignet.

Mathematisch können diese beiden Transportvorgänge durch die Wärmeleitungs- bzw. Diffusionsgleichung beschrieben werden.

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

Um diese partielle Differentialgleichung auch numerisch sinnvoll berechnen zu können, müssen zwei Arten von Problemstellungen betrachtet werden:

- Anfangswertprobleme oder auch Cauchy-Probleme
- Randwertprobleme

Bei Anfangswertproblemen ist die Aufgabe, ausgehend von einem vorgegebenen Anfangszustand, die zeitliche Entwicklung der Lösung zu bestimmen.

Angenommen, die gesuchte Lösung sei von der Form $u(t)$, dann beschreibt das Anfangswertproblem den Zustand $u(t = 0) = u(t_0) = u_0$.

Ein derartiges Anfangswertproblem hat somit die Form

$$\dot{u}(t) = f(t, u(t))$$

mit der Anfangsbedingung

$$u(t = 0) = u(t_0) = u_0$$

Bei einem Randwertproblem werden Eigenschaften der Lösung am Rand eines Gebiets vorgegeben, und es wird die Lösung im Inneren des Gebiets gesucht. Bei einem eindimensionalen Randwertproblem im Intervall $x \in [a, b]$ ergibt sich somit folgende mögliche Form (wobei $u(x) \dots$ Lösungsfunktion)

$$f(x, u(x), u'(x), u''(x)) = 0, \quad x \in [a, b]$$

mit der Randbedingung

$$u(a) = u_a, \quad u(b) = u_b$$

Es gibt aber noch allgemeinere Randbedingungen, wo nicht unbedingt Funktionswerte der Lösung am Rand vorgegeben sein müssen. Die folgende Auflistung zeigt die möglichen Arten von Randwertproblemen.

- Dirichlet-Bedingungen
- Neumann-Bedingungen
- Randbedingungen dritter Art (Linearkombination aus Dirichlet- und Neumannbedingung)

Da sich die vorliegende Arbeit hauptsächlich mit der Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung beschäftigt, sollen die oben genannten Randbedingungen für diesen Fall vorgestellt werden. Die Wärmeleitungsgleichung lautet

$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad D = \frac{\lambda}{\rho c} \quad (2.2)$$

wobei die Wärmeleitfähigkeit λ , die Dichte ρ und die Wärmekapazität c darstellt.

Bei Dirichlet-Bedingungen werden einfach Funktionswerte der Lösung am Rand vorgegeben. erinnert man sich an Abbildung 1.1, würden hier einfach Temperaturwerte am linken Rand T_a bzw. am rechten Rand T_b des Wandaufbaus vorgegeben sein. Im Spezialfall $T_a = 0$ und $T_b = 0$ spricht man von homogenen Dirichlet-Randbedingungen, ansonsten von inhomogenen Randbedingungen. Häufig wird bei der Konstruktion der Lösung eines inhomogenen Problems zuerst einfach das dazugehörige homogene Problem gelöst. Durch Addition einer geeigneten Funktion, kann die Lösung der Differentialgleichung mit inhomogenen Randbedingungen gewonnen werden.

Bei Neumann-Bedingungen hingegen ist die Ableitung der Lösungsfunktion am linken Rand $T'(x = a) = \alpha$ und am rechten Rand $T'(x = b) = \beta$ gegeben.

Vorausgesetzt, dass $\dot{q} = \lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial x}$ beschreibt die Neumann-Bedingung hingegen den Wärmestrom am Rande des Mauerwerks.

$\dot{q} \dots$ Wärmestromdichte,
 $T \dots$ Wandtemperatur,
 $\lambda \dots$ Wärmeleitkoeffizient

Randbedingungen dritter Art stellen allgemein eine Linearkombination von Dirichlet-Bedingung und Neumann-Bedingung dar. In unserem Spezialfall des Wärmetransportes beschreiben sie den konvektiven Wärmeübergang von der Oberfläche eines Körpers (Wand) an ein angrenzendes, strömendes Fluid (Innen- bzw. Außenluft).

Mathematisch kann dies durch den sogenannten Newton-Ansatz beschrieben werden $\dot{q}_w = \alpha(T_w - T_\infty)$.

$\dot{q}_w \dots$	Wärmestromdichte Wand,
$T_w \dots$	Wandoberflächentemperatur,
$T_\infty \dots$	Umgebungstemperatur (Luft),
$\alpha \dots$	Wärmeübergangskoeffizient

Durch Gleichsetzen mit der Wärmestromdichte $\dot{q}$ (siehe Neumann-Bedingung) und dem Newton-Ansatz erhält man die gewünschte Randbedingung.

$$\dot{q}_w = \lambda \cdot \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=x_w} = \alpha(T_w - T_\infty)$$

Durch Umstellen in $\alpha T_w - \lambda \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=x_w} = \alpha T_\infty$ sieht man, dass es sich dabei tatsächlich um eine Linearkombination handelt.

Der Koeffizient α ist keine Materialkonstante, sondern beschreibt den Wärmeübergang in Abhängigkeit von der Form der Oberfläche (Wand) sowie der Geschwindigkeits- und Temperaturverteilung im Fluid (Luft).

Man sieht, dass durch die Verwendung verschiedener Randbedingungen verschiedene physikalische Systeme beschrieben werden können. In dieser Arbeit beschränken wir uns auf inhomogene Dirichlet-Bedingungen, um den zeitlichen Temperaturverlauf in einem Mauerwerk zu berechnen.

Für die sinnvolle Umsetzung am Computer sind sowohl Anfangs- als auch Randbedingungen erforderlich. Es soll an dieser Stelle nochmals die Wärmeleitungsgleichung sowie die Anfangs- und Randbedingungen dargestellt werden.

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} &= D \cdot \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \\ T(x, t = 0) &= f(x), \end{aligned} \tag{2.3}$$

$$T(x = a, t) = g(t) \text{ und } T(x = b, t) = h(t)$$

Um dies zu verdeutlichen, betrachte man nachfolgendes Schema. In Abbildung ¹ 2.2 betrachtet man einerseits die gegebenen Anfangs- und Randwerte sowie die noch zu berechnenden “ungefüllten“ Kreise (=Knotenpunkte). Die Pfeile deuten die zeitliche Entwicklung der Lösung, in Abhängigkeit der Anfangsbedingung, an.

¹[2], S. 1025

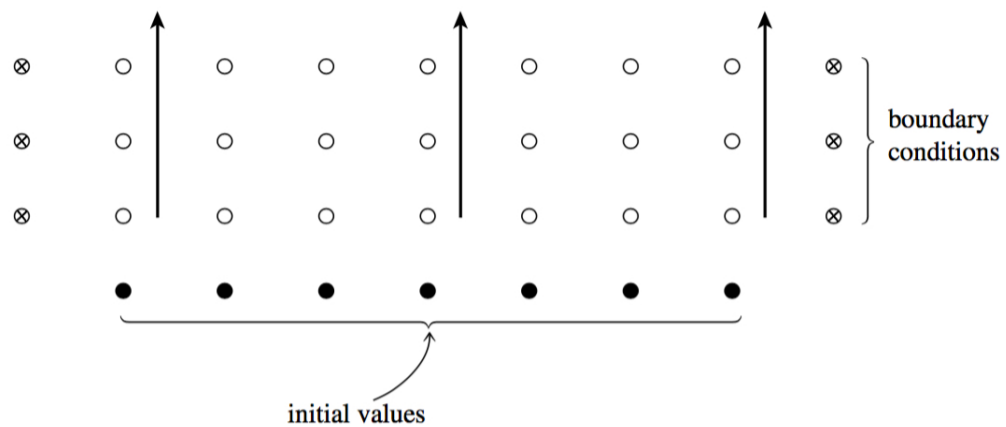


Abbildung 2.2: Gitter der Stützpunkte für ein Anfangswertproblem

Die Werte an der linken und rechten Intervallgrenze müssen nicht mehr berechnet werden, da diese durch die Randbedingungen gegeben sind und für alle Zeiten festgelegt sind. Auf die Implementierung dieser Bedingungen wird in späterer Folge noch eingegangen.

2.2 Fourier'sche Differentialgleichung

Da in den nachfolgenden Kapiteln hauptsächlich die Wärme- bzw. Diffusionsgleichung verwendet wird, soll an dieser Stelle kurz die Herleitung erfolgen. Diese Herleitung ist im Wesentlichen auch in der Literatur [5] zu finden.

Im ersten Schritt wird die allgemeine Fourier'sche Differentialgleichung hergeleitet, aus welcher dann direkt die bekannte Form der Wärmeleitungsgleichung folgt. Die allgemeine Form berücksichtigt zusätzlich noch innere Wärmequellen und eine ortsabhängige Wärmeleitfähigkeit.

Zur Herleitung der Gleichung bedient man sich der Energieerhaltung in einem infinitesimalen Volumenelement eines thermisch leitenden Materials. Da in Summe keine Energie vernichtet oder erzeugt werden kann, muss die Zufuhr von Wärme ΔQ zwangsläufig zu einer Erhöhung der inneren Energie ΔU führen. Damit lautet die Energiebilanz

$$\Delta U = \Delta Q, \quad (2.4)$$

dies ist nichts anderes als der 1. thermodynamische Hauptsatz für ein offenes, ruhendes System (also ein System an dem keine mechanische Arbeit verrichtet wird)

Unter der Annahme für ein ruhendes Medium mit konstanter Massendichte ρ ist die spezifische innere Energie (Energie pro Masseneinheit) $\Delta u = c\Delta T$ ($c \dots$ spez. Wärmekapazität, $T \dots$ Temperatur)

Eine Änderung der inneren Energie führt demnach zu einer Temperaturänderung im Volumenelement $dV = dx dy dz$ in der Form von

$$\Delta U = \rho c \Delta T dV$$

Dies beschreibt physikalisch die Energiespeicherung. Es kann aber Wärme über den Rand des Systems ∂V zu- oder abgeführt werden. Ebenso kann durch innere chemische bzw. elektrische Prozesse Wärme erzeugt werden (Wärmequelle). Für ein kleines Zeitintervall Δt gilt dann

$$\Delta Q = \left(\dot{Q}_{\partial V} + \dot{\omega} dV \right) \Delta t$$

Hier entspricht $\dot{Q}_{\partial V}$ dem Wärmestrom über den Rand und $\dot{\omega}$ der Wärmequellendichte. Betrachtet man nun nur die x-Koordinate der Wärmestromdichte $\dot{q}_x$ am Volumenelement, so entspricht die dem Volumen zu- bzw. abgeführte Energie über den Rand der Stirnfläche $dy dz$

$$\dot{Q}_{\partial V, x} = \dot{q}_x|_x dy dz - \dot{q}_x|_{x+dx} dy dz$$

Eine Taylor-Entwicklung der Wärmestromdichte $\dot{q}_x$ ergibt

$$\dot{q}_x|_{x+dx} = \dot{q}_x|_x + \left. \frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} \right|_x dx + \left. \frac{\partial^2 \dot{q}_x}{\partial x^2} \right|_x \frac{dx^2}{2} + \dots$$

Betrachtet man nur den linearisierten Term folgt

$$\dot{Q}_{\partial V, x} = (\dot{q}_x|_x - \dot{q}_x|_{x+dx}) dy dz = - \left. \frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} \right|_x dx dy dz$$

Analoge Überlegungen gelten für die y- und z-Richtung.

Führt man die letzten Überlegungen mit Gleichung 2.4 zusammen und eliminiert dV , liefert das

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial \dot{q}_x}{\partial x} - \frac{\partial \dot{q}_y}{\partial y} - \frac{\partial \dot{q}_z}{\partial z} + \dot{\omega}$$

Setzt man $\dot{q} = \lambda \nabla T$ voraus, erhält man die Fourier'sche Differentialgleichung

$$\boxed{\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{\omega}} \quad (2.5)$$

Vernachlässigt man innere Wärmequellen und setzt die Wärmeleitfähigkeit λ als konstant voraus, erhält man die bekannte Wärmeleitungs- oder Diffusionsgleichung $\left(D = \frac{\lambda}{\rho c} \right)$

$$\boxed{\frac{\partial T}{\partial t} = D \Delta T \quad \Delta \dots \text{Laplace-Operator}} \quad (2.6)$$

Die Wärmeleitungsgleichung kann somit direkt aus der Energiebilanz am infinitesimalen Volumenelement hergeleitet werden.

2.3 Finite-Differenzen

2.3.1 Notation

Die folgende Darstellung orientiert sich an [4]. Da bei der Behandlung numerischer Methoden ein diskretes Punktgitter zu Grunde liegt und man nur Funktionswerte an diesen Punkten berechnet, muss eine geeignete Notation gefunden werden.

Man rufe sich nochmals die Abbildung 2.1 auf Seite 10 in Erinnerung.

Hier werden die verschiedenen Punkte am Gitter mit (x_i, y_i) bezeichnet. Da typischerweise ein äquidistantes Gitter vorliegt, wobei die Schrittweiten in den verschiedenen Richtungen unterschiedlich sein können, folgt unsere Notation mit

$$\begin{aligned}x_j &= j \cdot \Delta x \\y_l &= l \cdot \Delta y \\t_n &= n \cdot \Delta t\end{aligned}$$

Die gesuchte Lösungsfunktion bezeichnen wir mit $u(x, y, \dots, t)$. Daraus folgt für die Diskretisierung

$$u_{j,l}^{(n)} = u(x_j, y_l, \dots, t_n)$$

2.3.2 Differenzenquotienten

Im folgenden werden Differenzenquotienten für das darunterliegende Gitter hergeleitet. Der Einfachheit halber wird hier eine Funktion mit nur einer Variablen $u(x)$ betrachtet. Diese können dann nach ihrer Genauigkeit klassifiziert werden.

Ausgehend von der linearisierten Taylorentwicklung für $u(x_{j+1}) = u(x_j + \Delta x)$

$$u(x_{j+1}) = u(x_j) + u_x(x_j)\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

folgt nach Auflösung nach $u_x(x_j)$ die Gleichung

$$\boxed{\frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta x} = u_x(x_j) + \mathcal{O}(\Delta x)} \quad (2.7)$$

Mit gleicher Vorgehensweise ergibt sich für $u(x_{j-1}) = u(x_j - \Delta x)$

$$u(x_{j-1}) = u(x_j) - u_x(x_j)\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Diese Gleichung wieder aufgelöst nach $u_x(x_j)$ liefert

$$\boxed{\frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x} = u_x(x_j) + \mathcal{O}(\Delta x)} \quad (2.8)$$

Man sieht, dass beide Gleichungen von erster Ordnung sind.

Das heißt, dass der Fehler mit der ersten Potenz von Δx nach null geht. In der praktischen Anwendung ist dieses Verhalten trotzdem oft schon ausreichend, da durch Verkleinerung der Schrittweite der Fehler verringert werden kann. Zu beachten dabei ist aber, dass durch die Verkleinerung der Schrittweite natürlich an Performance des Programmes eingebüßt wird.

Gleichung 2.7 nennt sich Vorwärts-Differenz, wogegen sich Gleichung 2.8 Rückwärts-Differenz nennt.

Bildet man nun die Differenz aus Gleichung 2.7 und 2.8, unter Berücksichtigung Terme höherer Ordnung, ergibt sich

$$u(x_{j+1}) - u(x_{j-1}) = 2u_x(x_j)\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

Nach Umstellung auf $u_x(x_j)$ ergibt sich folgende Formel

$$\boxed{\frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2\Delta x} = u_x(x_j) + \mathcal{O}(\Delta x^2)} \quad (2.9)$$

Dieser Differenzenquotient ist, im Vergleich zu den beiden obigen, von 2.Ordnung. Damit stellt dieser eine wesentlich genauere Formel dar und kann trotzdem noch einfach implementiert werden.

Da in den nachfolgenden Kapiteln ständig die Wärmeleitungsgleichung verwendet wird, muss noch eine Formel für die 2. Ableitung konstruiert werden.

Bildet man nun die Summe von Gleichung 2.7 und 2.8, diesmal wieder unter Berücksichtigung höherer Terme, liefert das als Zwischenergebnis

$$u(x_{j+1}) + u(x_{j-1}) = 2u(x_j) + u_{xx}(x_j)\Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

Nach Umstellung auf $u_{xx}(x_j)$ ergibt sich folgende Formel

$$\boxed{\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2} = u_{xx}(x_j) + \mathcal{O}(\Delta x^2)} \quad (2.10)$$

Ebenso wie Gleichung 2.9 stellt diese eine Formel 2.Ordnung dar. Dieser Differenzenquotient wird in weiterer Folge noch des öfteren verwendet werden.

2.3.3 Zeit-Integration

Da in der vorliegenden Arbeit der Fokus auf der Wärmeleitungsgleichung liegt, muss eine geeignete Methode erarbeitet werden, um derartige Anfangswertprobleme lösen zu können.

Ein derartiges Anfangswertproblem ist auf Seite 11 schon skizziert. Zur Erinnerung soll es hier nochmals angeführt werden - mit leichten formalen Änderungen.

$$\begin{array}{l} \frac{du}{dt} = f(t, x, u, u_x, u_{xx}, \dots) = Lu \\ \\ \text{mit der Anfangsbedingung} \\ \\ u(t = 0, x) = u(t_0, x) = u_0(x) \end{array} \quad (2.11)$$

Hier soll L schematisch einen, im allgemeinen nicht-linearen, räumlichen Differentialoperator darstellen.

Ziel ist nun einen Formalismus, der es ermöglicht aus dem Anfangszustand $u_0(x)$ die Lösung für alle anderen Zeiten $t > 0$, also $u(t, x)$, zu konstruieren. Das heißt, dass aus der Lösung zum Zeitpunkt t_n die Lösung zum Zeitpunkt t_{n+1} berechnet werden kann.

Die Beschränkung auf eine Ableitung erster Ordnung in der Zeit, siehe Gleichung 2.11, stellt kein Problem dar, da jede Gleichung höherer Ordnung auf ein System von Gleichungen erster Ordnung zerlegt werden kann. Da die Wärmeleitungsgleichung aber nur erster Ordnung in der Zeit ist, genügt es, von diesem Standpunkt auszugehen.

Die Umsetzung eines derartigen Anfangswertproblems stellt einen deutlichen Unterschied zu einem reinen Randwertproblem dar. Beim Anfangswertproblem versucht man, wie schon erwähnt, die Lösung zum neuen Zeitschritt durch Integration aus dem alten, bekannten zu berechnen. Durch wiederholtes Anwenden des Integrationsschrittes ist es offensichtlich möglich, beliebig weit in der Zeit zu propagieren. Im Unterschied dazu kann beim Randwertproblem nicht so einfach schrittweise integriert werden. Stellt man sich zum Beispiel ein eindimensionales Randwertproblem vor, so kann ausgehend vom linken Randzustand, durch einfache Integration der rechte Randzustand meist nicht „getroffen“ werden. Vielmehr muss die Lösung auf einmal „gefunden“ werden. Dies führt in der Regel meist auf Gleichungssysteme.

Um nun einen Formalismus für das oben beschriebene Anfangswertproblem zu

konstruieren, wird Gleichung 2.1 einen Zeitschritt integriert (bei festen Ortskoordinaten). Dadurch erhält man

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial u}{\partial t} dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (Lu)_t dt$$

Nach Ausführung des Integrationsschrittes auf der linken Seite und anschließender Umstellung ergibt sich die gewünschte Formel, um die Lösung in der Zeit fortschreiten lassen zu können.

$$\boxed{u^{(n+1)} = u^{(n)} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} Lu dt} \quad (2.12)$$

Einziges Problem hierbei ist, dass für die Lösung $u^{(n+1)}$ der Integrand zum Zeitpunkt t_{n+1} ausgewertet werden muss. Da dieser zu diesem Zeitpunkt jedoch noch nicht bekannt ist, muss für die Lösung des Integrals eine Approximation verwendet werden. Je nach Methode der Approximation können unterschiedliche Genauigkeiten erreicht werden.

Um einen quantitativen Ausdruck für die Genauigkeit zu erhalten wird $(Lu)_t$ in eine Taylorreihe entwickelt.

$$(Lu)_t = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t - t_n)^k}{k!} \left(\frac{d^k}{dt^k} Lu \right)_{t_n}$$

Einsetzen in Gleichung 2.12 ergibt

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t - t_n)^k}{k!} \left(\frac{d^k}{dt^k} Lu \right)_{t_n} dt$$

Nach der Integration ergibt sich

$$\boxed{u^{(n+1)} = u^{(n)} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta t^k}{k!} \left(\frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}} Lu \right)_{t_n}} \quad (2.13)$$

Ausgeschrieben bedeutet oben angeführte Gleichung

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \Delta t (Lu)_{t_n} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{d}{dt} Lu \right)_{t_n} + \dots + \frac{\Delta t^p}{p!} \left(\frac{d^{p-1}}{dt^{p-1}} Lu \right)_{t_n} + \mathcal{O}(\Delta t^{p+1})$$

Stimmt nun eine Approximationsmethode bis zum Term Δt^p überein, so ist diese von p -ter Ordnung.

2.4 Verfahren

Dieses Kapitel beschränkt sich auf die Herleitung zweier verschiedener Näherungsverfahren zum Lösen für das Integral, siehe Gleichung 2.12. Tatsächlich gibt es unzählige, geeignete oder auch weniger geeignete, Verfahren für die verschiedenen Differentialgleichungen.

Die beiden Ansätze, denen sich dieses Kapitel widmet, führen auf das

- explizite Euler-Verfahren
- und das
- Crank-Nicholson-Verfahren.

Beide Verfahren wurden gewählt, weil sie unterschiedliche Eigenschaften haben. Beim expliziten Euler-Verfahren handelt es sich um ein explizites Verfahren. Das heißt, dass der neue Funktionswert $u_j^{(n+1)}$ nur von bestimmten alten Funktionswerten $u^{(n)}$ abhängt.

Beim Crank-Nicholson-Verfahren handelt es sich hingegen um ein implizites Verfahren, wobei der neue Funktionswert $u_j^{(n+1)}$ auch von allen anderen neuen Funktionswerten zum Zeitpunkt t_{n+1} abhängen kann. Ebenso gibt es einen mathematischen Unterschied in der Genauigkeit, also der Ordnung, der beiden Näherungsverfahren für das Integral.

2.4.1 Explizites Euler-Verfahren

Das einfachste Verfahren erhält man, wenn man das Integral einfach durch die Fläche eines Rechtecks ersetzt. Die folgende Abbildung² 2.3 soll dies verdeutlichen.

Das heißt, ersetzt man nun

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} Lu \, dt \mapsto (Lu)_{t_n} \Delta t$$

erhält man das explizite-Euler-Verfahren, wobei $(\cdot)_{t_n} \equiv (\cdot)^{(n)}$.

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \Delta t (Lu)^{(n)} \quad (2.14)$$

Vergleicht man nun diese Formel mit Gleichung 2.13, sieht man, dass nur der erste Term mit der Taylor-Entwicklung übereinstimmt. Somit ist das explizite Euler-Verfahren von 1.Ordnung. Trotzdem genügt dieses Verfahren oft, zumindest für

²[3], Kapitel 2, Seite 26

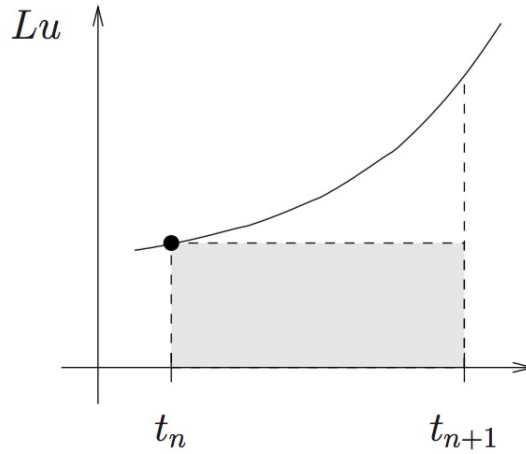


Abbildung 2.3: explizites Euler-Verfahren, rechteckige Näherung

einfache Anwendungen bzw. als Art Prototyp für ein explizites Verfahren. Zur Erhöhung der Genauigkeit kann einfach der Zeitschritt verkleinert werden. In weiterer Folge wird dieses einfache Verfahren mit einem Verfahren 2.Ordnung verglichen, um die Genauigkeit zu demonstrieren.

Anwendung auf die Wärmeleitungsgleichung

Es soll nun das explizite Euler-Verfahren (Gleichung 2.14) auf die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung 2.6 angewendet werden.

Setzt man nun für $Lu = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ ein, erhält man daraus

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \Delta t \left(D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)^{(n)}.$$

Um die zweite Ableitung zu diskretisieren, verwendet man einfach Gleichung 2.10 und erhält die diskretisierte Form der Wärmeleitungsgleichung.

$$\boxed{u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left(u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)} \right)} \quad (2.15)$$

Man sieht, dass zur Berechnung der Werte zum neuen Zeitpunkt lediglich die Werte zum alten Zeitpunkt erforderlich sind. In der folgenden Abbildung³ soll der Informationsfluss für den neuen Zeitpunkt schematisch dargestellt werden.

³[3], Kapitel 3, Seite 53

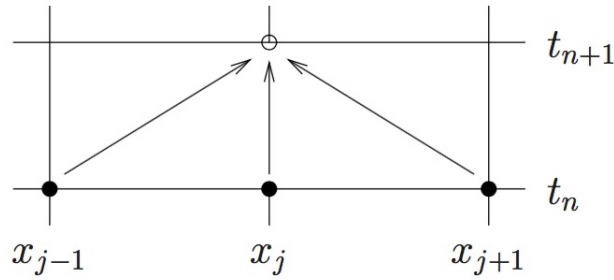


Abbildung 2.4: Informationsfluss beim expliziten Euler-Verfahren

2.4.2 Crank-Nicholson-Verfahren

Da im Allgemeinen implizite Verfahren stabiler sind, als explizite Verfahren, wird an dieser Stelle das Crank-Nicholson-Verfahren (auch CN-Verfahren) hergeleitet. Die Besonderheit dabei ist die unbedingte Stabilität bei Anwendung auf die Wärmeleitungsgleichung. Deswegen ist dieses Verfahren von großer Beliebtheit zur Simulation von Diffusionsvorgängen.

Das Thema Stabilität bzw. Stabilitätsbedingung wird noch in den darauffolgenden Kapiteln diskutiert.

Ersetzt man nun die Rechtecksnäherung durch eine trapezförmige Approximation des Integrals nach der Zeit, folgt das Crank-Nicholson-Verfahren.

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} Lu \, dt \mapsto \frac{\Delta t}{2} ((Lu)_{t_n} + (Lu)_{t_{n+1}})$$

Eingesetzt ergibt dies

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} ((Lu)^{(n)} + (Lu)^{(n+1)}) .$$

Zur Veranschaulichung der Approximation des Integrals folgend eine schematische Skizze⁴. Schon allein durch optische Betrachtung könnte man folgern, dass die

⁴[3], Kapitel 2, Seite 28

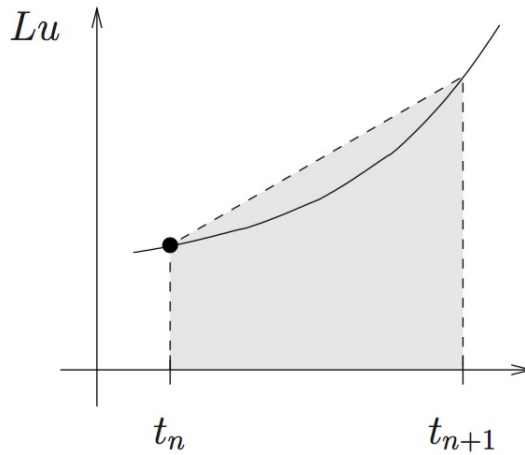


Abbildung 2.5: trapezförmige Approximation

trapezförmige Approximation genauer ist als die rechteckige. Natürlich muss noch der mathematische Beweis erbracht werden. Dazu wird der Term $(Lu)^{(n+1)}$ in eine Taylor-Reihe entwickelt.

$$\begin{aligned} u^{(n+1)} &= u^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} \left[(Lu)^{(n)} + (Lu)^{(n)} + \Delta t \left(\frac{d}{dt} Lu \right)_{t_n} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{d^2}{dt^2} Lu \right)_{t_n} + \dots \right] = \\ &= u^{(n)} + \Delta t (Lu)^{(n)} + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{d}{dt} Lu \right)_{t_n} + \frac{\Delta t^3}{4} \left(\frac{d^2}{dt^2} Lu \right)_{t_n} + \dots \end{aligned}$$

Vergleicht man nun diese Entwicklung mit Gleichung 2.13, so sieht man, dass diese bis zur 2.Ordnung übereinstimmen.

Somit ist dieses Verfahren genauer als das explizite Euler-Verfahren.

Anwendung auf die Wärmeleitungsgleichung

Mit analoger Vorgehensweise wie beim Euler-Verfahren wird auch hier für $Lu = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ eingesetzt.

Man erhält daraus

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \frac{\Delta t}{2} \left(\left(D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)^{(n)} + \left(D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)^{(n+1)} \right).$$

Unter Berücksichtigung, dass der Diffusionskoeffizient D zeitunabhängig ist, und nach Diskretisierung der zweiten Ableitung gemäß Gleichung 2.10 folgt daraus

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} \left(u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)} + u_{j+1}^{(n+1)} - 2u_j^{(n+1)} + u_{j-1}^{(n+1)} \right) \quad (2.16)$$

Dies ist das sogenannte Crank-Nicholson-Verfahren, welches von 2.Ordnung, sowohl in Zeit als auch im Ort, ist.

Schon wie beim expliziten Euler-Verfahren soll auch an dieser Stelle der Informationsfluss durch nachfolgende Abbildung⁵ schematisch dargestellt werden. Man

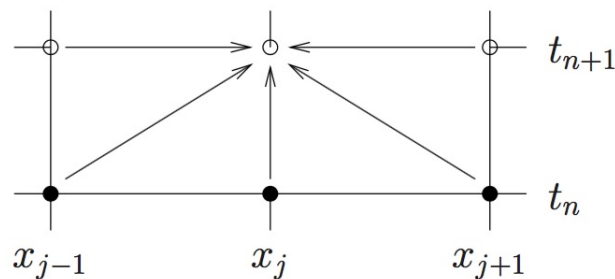


Abbildung 2.6: Informationsfluss CN-Verfahren

sieht hier deutlich, dass der zu berechnende Funktionswert $u_j^{(n+1)}$ sowohl von den benachbarten alten als auch von den neuen Funktionswerten abhängt. Da aber die benachbarten Funktionswerte von den übernächsten Nachbarn (Funktionswerte) abhängen und so weiter, hängt im Grunde $u_j^{(n+1)}$ von allen Funktionswerten ab. Deshalb ist es naheliegend, dass dieses Verfahren unbedingt stabil ist.

⁵[3], Kapitel 3, Seite 65

2.5 Stabilitätsanalyse

Bei der Herleitung beider Verfahren, des explizites Euler-Verfahren und des Crank-Nicholson-Verfahren, wurde noch nicht bestimmt, unter welchen Bedingungen das jeweilige Verfahren stabil ist. Das heißt, ob diese Verfahren überhaupt für die Simulation der Wärmeleitungsgleichung geeignet sind, und wenn ja, welche Voraussetzungen bei den Diskretisierungsweiten erzielt werden müssen.

Im Allgemeinen sind bei der computergestützten Umsetzung von mathematischen Problemen Ergebnisse immer mit einem Fehler behaftet. Der Fehler kann einerseits durch bereits vorkommende Fehler in den Anfangsdaten entstehen, oder durch den Algorithmus an sich sowie durch eine nicht exakte Darstellung von Fließkommazahlen. Schematisch kann dies auf folgende Weise dargestellt werden.

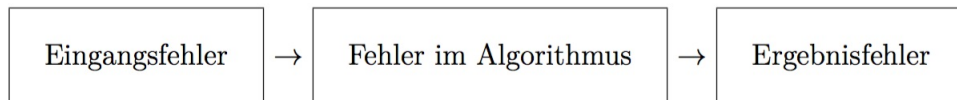


Abbildung 2.7: numerische Fehlerquellen

Für die Stabilitätsanalyse werden einige Annahmen getroffen. Es werden einerseits die Anfangsdaten, als auch die Rechenoperationen als exakt angenommen und man hofft, dass für $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ die numerische Lösung genügend nahe an die analytische Lösung kommt. Da der Computer aber nur mit endlich vielen Stellen rechnet, tritt ein unvermeidbarer Rundungsfehler auf. Nur mit diesem Fehler beschäftigt sich die Stabilitätsanalyse.

2.5.1 Von-Neumann-Stabilitätsanalyse

Die Von-Neumann-Stabilitätsanalyse beschränkt sich auf die Analyse von Fehlern für lineare Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten. Da die Lösung von derartigen Differentialgleichungen, bei geeigneten Randbedingungen, mit Hilfe eines Fourier-Ansatzes gewonnen werden kann, liegt es nahe, diese Methodik auch bei der Untersuchung von numerischen Fehlern einzusetzen.

Dabei wird angenommen, dass die Differentialgleichung auf einem Gebiet $[0, L]$ gelöst werden soll. Dazu ordnen wir jedem Stützpunkt (t_n, x_j) am Raum-Zeit-Gitter einen Fehler $\epsilon_j^{(n)}$ zu, der aus der Differenz der numerischen Lösung mit Rundungsfehler und der idealisierten, mit unendlicher Genauigkeit berechneten numerischen Lösung (mit derselben Diskretisierung) besteht.

Als erster Schritt wird der Fehler $\epsilon_j^{(n)}$ zum festen Zeitpunkt t_n durch eine diskrete Fourier-Transformation dargestellt. Dabei werden periodische Randbedingungen, das heißt $u(x=0) = u(x=L)$ bzw. $\epsilon(x=0) = \epsilon(x=L)$, angenommen. Die Summe läuft dann über endlich viele k -Werte ($k = k_m$), die sich aus der DFT ergeben.

$$\epsilon_j^{(n)} = \sum_{\{k\}} c_k^{(n)} \cdot e^{ikx_j}, \quad k = m \cdot \frac{2\pi}{L}$$

Der Fehler $\epsilon_j^{(n+1)}$ hängt nicht nur von $\epsilon_j^{(n)}$ ab, sondern von einer ganzen Reihe von $\epsilon_{j'}^{(n)}$, wobei $j' \neq j$ ist. Die Verstärkungsmatrix G hat folgende Form

$$G_{j,j'} = \frac{\partial \epsilon_j^{(n+1)}}{\partial \epsilon_{j'}^{(n)}}$$

und soll die Forderung $\|G\| \leq 1$ (Matrixnorm) erfüllen. Wenn die Basisfunktionen e^{ikx_j} der DFT die Verstärkungsmatrix diagonalisieren (dies ist oft der Fall, ohne Beweis), dann ist $\|G\|$ gleich dem betragsmäßig größten Eigenwert $g(k)$ von G . Das heißt

$$\|G\| = \max_k |g(k)| \leq 1$$

In diesem Fall können die einzelnen Eigenwerte $g(k)$ abgelesen werden aus

$$\epsilon_j^{(n+1)} = g(k) \epsilon_j^{(n)} \tag{2.17}$$

wobei $\epsilon_j^{(n)} = e^{ikx_j}$.

Stabilitätsanalyse für das explizite Euler-Verfahren

Nun soll die beschriebene Stabilitätsanalyse auf das explizite Euler-Verfahren (Gleichung 2.15, S. 22) angewendet werden.

Das Euler-Verfahren für die Wärmeleitungsgleichung lautet

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left(u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)} \right).$$

Unter Einbeziehung, dass jeder Wert $u_j^{(n)}$ mit einem gewissen numerischen Rundungsfehler $\epsilon_j^{(n)}$ behaftet ist, lautet die eigentliche Differentialgleichung, welche es zu lösen gilt

$$\left(u_j^{(n+1)} + \epsilon_j^{(n+1)} \right) = \left(u_j^{(n)} + \epsilon_j^{(n)} \right) + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left[\left(u_{j+1}^{(n)} + \epsilon_{j+1}^{(n)} \right) - \left(2(u_j^{(n)} + \epsilon_j^{(n)}) \right) + \left(u_{j-1}^{(n)} + \epsilon_{j-1}^{(n)} \right) \right]$$

Da es sich um eine lineare Differentialgleichung handelt, entwickelt sich der Fehler in analoger Weise wie die Lösung. Das heißt, dass Gleichung 2.15 auch die Fehlerfortpflanzung beschreibt.

Somit gilt analog für den Fehler

$$\epsilon_j^{(n+1)} = \epsilon_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left(\epsilon_{j+1}^{(n)} - 2\epsilon_j^{(n)} + \epsilon_{j-1}^{(n)} \right)$$

Setzt man nun für $\epsilon_j^{(n)} = e^{ikx_j}$ ein, so führt das auf

$$\begin{aligned} \epsilon_j^{(n+1)} &= e^{ikx_j} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left(e^{ikx_{j+1}} - 2e^{ikx_j} + e^{ikx_{j-1}} \right) \\ &= e^{ikx_j} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left(e^{ik(x_j+\Delta x)} - 2e^{ikx_j} + e^{ik(x_j-\Delta x)} \right) \\ &= e^{ikx_j} \left\{ 1 + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x} \right) \right\} \\ &= e^{ikx_j} \left\{ 1 - 2\frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (1 - \cos(k\Delta x)) \right\} \\ &= \underbrace{e^{ikx_j}}_{\epsilon_j^{(n)}} \left\{ 1 - 4\frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$= \epsilon_j^{(n)} \left\{ 1 - 4 \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right) \right\}$$

Man sieht, dass der Fehler $\epsilon_j^{(n+1)}$ genau von oben beschriebener Form ($\epsilon_j^{(n+1)} = g(k) \cdot \epsilon_j^{(n)}$) ist, wobei der Verstärkungsfaktor $g(k)$ folgende Form hat

$$g(k) = 1 - 4 \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right)$$

Um zu erreichen, dass der Fehler im nächsten Zeitschritt nicht ansteigt, muss für alle erlaubten k gefordert werden

$$|g(k)| = \left| 1 - 4 \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right) \right| \leq 1$$

beziehungsweise

$$-1 \leq 1 - 4 \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right) \leq 1$$

Da $\sin^2(\cdot)$ immer positiv ist, ist somit die rechte Seite der Ungleichung immer erfüllt.

Um auch die linke Seite zu erfüllen, muss offensichtlich

$$4 \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \leq 2$$

sein. Oder nach Umstellung für einen expliziten Ausdruck für Δt

$$\boxed{\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}} \tag{2.18}$$

Somit gibt es eine Bedingung an die Diskretisierungsweiten Δt und Δx . Das heißt, dass das explizite Euler-Verfahren nur bedingt stabil ist.

Je nach fixem Δx muss somit ein passendes Δt gewählt werden. Jedenfalls muss der Zeitschritt auf ein Viertel reduziert werden, wenn der Ortsschritt „halbiert“ wird.

Stabilitätsanalyse für das Crank-Nicholson-Verfahren

In analoger Vorgehensweise wie beim expliziten Euler-Verfahren soll auch für das CN-Verfahren

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} \left(u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)} + u_{j+1}^{(n+1)} - 2u_j^{(n+1)} + u_{j-1}^{(n+1)} \right)$$

die Bedingung für Stabilität analysiert werden. Wie in der vorangegangenen Analyse schon gezeigt, entwickelt sich der Fehler wie die Lösung der Differentialgleichung, also

$$\epsilon_j^{(n+1)} = \epsilon_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} \left(\epsilon_{j+1}^{(n)} - 2\epsilon_j^{(n)} + \epsilon_{j-1}^{(n)} + \epsilon_{j+1}^{(n+1)} - 2\epsilon_j^{(n+1)} + \epsilon_{j-1}^{(n+1)} \right)$$

Da es sich hierbei um ein Mehrschrittverfahren handelt, wird für den Fehler der Ansatz $\epsilon_j^{(n)} = g^n(k) \cdot e^{ikx_j}$ gemacht.

Betrachtet man nun den Schritt von $t_n \rightarrow t_{n+1}$, so ergibt das

$$\begin{aligned} g e^{ikx_j} &= e^{ikx_j} \left\{ 1 + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} (e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x} + g(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x})) \right\} \\ g &= 1 + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} (e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x} + g(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x})) \\ &= 1 + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} (2(\cos(k\Delta x) - 1) + 2g(\cos(k\Delta x) - 1)) \\ &= 1 - \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) - \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) g \end{aligned}$$

Löst man die letzte Gleichung nach $g(k)$ auf, ergibt das

$$\boxed{g(k) = \frac{1 - \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}{1 + \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}}. \quad (2.19)$$

Damit der Fehler je Zeitschritt beschränkt bleibt, muss wieder $|g(k)| \leq 1$ erfüllt sein. Da der Zähler immer kleiner als der Nenner ist, ist $|g(k)| \leq 1$ für alle Δt und Δx erfüllt. Somit ist das CN-Verfahren unbedingt stabil.

2.6 Implementierung

2.6.1 Anfangs- und Randbedingungen

Die Anfangs- und Randbedingungen sind von enormer Bedeutung für die numerische Lösbarkeit und der Entwicklung der Lösung für $t > t_0$. Um sich ein besseres Verständnis bezüglich dem Gitter machen zu können, wird nochmals Abbildung⁶ 2.2 gezeigt.

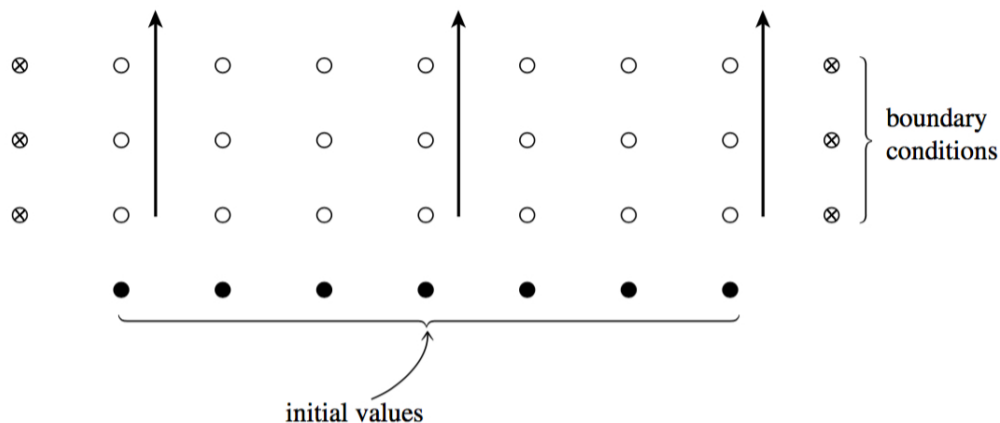


Abbildung 2.8: Implementierung der Anfangs- und Randbedingungen

Im Hinblick auf die Verwendung der Wärmeleitungsgleichung zur Bestimmung von gekoppelten Temperatur- und Feuchteströmen können die einzelnen Zeilen als zeitliche Entwicklung der Lösung eines gegebenen Querschnittes betrachtet werden, während eine einzelne Spalte die zeitliche Entwicklung eines bestimmten Punktes x_i im Querschnitt beschreibt.

Die ausgefüllten Punkte stellen die Anfangsbedingung dar. Diese ist zwingend vorzugeben, da ansonsten keine „Startwerte“ vorhanden sind, mit denen der jeweilige numerische Algorithmus initialisiert wird.

Die Anfangsbedingung beschreibt einfach die Lösungsfunktion zum Zeitpunkt $t = t_0$

$$u(x, t = 0) = u(x, t_0) = f(x) .$$

Veranschaulicht man sich ganz formal das Integrationsschema

$u^{(n+1)} = T[u^{(n)}]$, ($T \dots$ Integrationsoperator) für die zeitliche Entwicklung der Lösung, so sieht man sofort, dass ohne Anfangsbedingung keine numerische Lösung zustande kommen kann.

⁶[2], Seite 828

Bei den partiell gefüllten Punkten handelt es sich um die jeweilige Randbedingung. Je nachdem, ob am Rande Funktionswerte der Lösung oder Funktionswerte der Ableitung der Lösung gegeben sind, unterscheidet man zwischen Dirichlet- bzw. Neumann-Randbedingungen. Im hier vorliegenden Fall werden Dirichlet-Randbedingungen diskutiert.

Diese Funktionswerte stellen somit direkt Temperaturwerte oder Konzentrationswerte dar. Im einfachsten Fall sind die Randbedingungen konstant, das heißt

$$u(0, t) = a$$

bzw.

$$u(L, t) = b,$$

Ebenso wie die Anfangsbedingung benötigt man die Randbedingung für die numerische Lösbarkeit.

Zum besseren Verständnis soll dies exemplarisch an Hand des expliziten Euler-Verfahrens dargestellt werden.

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} [u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}]$$

Dazu werden die Funktionswerte der ersten durchgehenden Spalte der Abbildung 2.8 mit $u_1^{(n)}$ bezeichnet.

Ausgehend von der Anfangsbedingung $u_j^{(0)}$ benötigt man zur Bestimmung der Funktionswerte des nächsten Zeitschrittes an der Position $u_1^{(1)}$, wie aus dem Euler-Schema ersichtlich, die Werte $u_0^{(0)}$, $u_1^{(0)}$ und $u_2^{(0)}$. Wobei hier der Wert $u_0^{(0)}$ gerade die Randbedingung darstellt.

Ist diese Randbedingung nicht gegeben, kann der Wert $u_1^{(1)}$ nicht berechnet werden. Der erste berechenbare Wert wäre somit $u_2^{(1)}$, wobei hier schon ein Informationsverlust auftritt. Für alle folgenden Zeitschritte lässt sich diese Überlegung analog fortsetzen, wobei in jedem neuen Zeitschritt ein Informationsverlust entsteht. Das heißt, nach kurzer Zeit kann der Algorithmus nicht mehr fortgesetzt werden, da zu wenig Information über die Funktionswerte der alten Zeitpunkte mehr vorhanden ist (siehe Abbildung 2.9). Um also zeitlich beliebig weit in die Zukunft propagieren zu können, müssen Randbedingungen gegeben sein.

Im Falle von Dirichlet-Randbedingungen können die Funktionswerte an den Randpunkten einfach eingesetzt werden und es müssen lediglich die Werte an den ungefüllten Punkten noch berechnet werden.

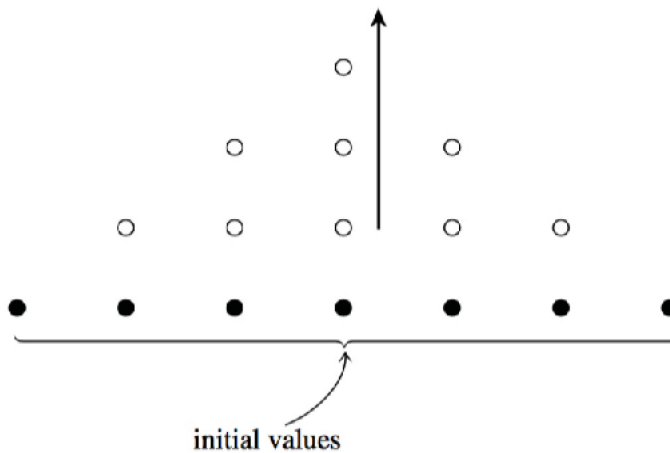


Abbildung 2.9: Informationsverlust ohne Vorgabe von Randbedingungen

Da bei der Betrachtung bauphysikalischer Probleme wie Temperaturverteilung oder Feuchtekonzentration realistischerweise keine konstanten Randbedingungen vorausgesetzt werden können (speziell im Außenbereich), muss unsere Betrachtungsweise noch ausgebaut werden.

Den realistischen Fall von zeitlich variierenden Randbedingungen beschreibt

$$\begin{aligned}
 u(0, t) &= g(t) \\
 &\text{bzw.} \\
 u(L, t) &= h(t),
 \end{aligned}$$

wobei $g(t)$ und $h(t)$ beliebige Funktionen sind.

Für die numerische Berechnung bedeutet dies, dass in jedem beliebigen Zeitschritt bekannte Dirichlet-Randbedingungen vorgegeben sind, diese sich aber mit jedem Zeitschritt Δt ändern.

Hinsichtlich der instationären Simulation der Wärme- und Feuchteverteilung in einem Mauerwerk wird den zeitlich veränderlichen äußeren Randbedingungen Rechnung getragen. In den nachfolgenden Simulationen wird häufig von einer konstanten inneren Randbedingung (Mauerwerkinnenseite) und einer veränderlichen äußeren Randbedingung (Mauerwerkaußenseite) ausgegangen.

2.6.2 Gleichungssysteme

Ein wichtiger Aspekt, der vor den Simulationen noch zu behandeln ist, beschäftigt sich mit dem Lösen linearer Gleichungssysteme.

Gekoppelte Gleichungssysteme treten im Allgemeinen bei impliziten Verfahren auf (z.B. CN-Verfahren). Je nach Art der Differentialgleichung können diese Gleichungssysteme linear oder nichtlinear sein. Da viele wichtige Differentialgleichungen linear sind, beschränken wir die Erläuterung auf lineare Gleichungssysteme.

Beim Lösen derartiger Gleichungssysteme, welche auf Grund der Diskretisierung eindimensionaler Probleme mit bestimmten Randbedingungen entstehen, trifft man immer auf dünn besetzte Kopplungsmatrizen - meist tridiagonale. Diese Matrizen bestehen hauptsächlich aus Nullen, bis auf die mittleren drei Diagonalen.

Theoretisch kann zum Lösen entweder ein allgemeines Verfahren z.B. Gauß-Algorithmus benutzt werden, oder spezielle Algorithmen für dünnbesetzte Kopplungsmatrizen. In der Praxis jedoch verwendet man ausschließlich spezielle Algorithmen, da die allgemeinen Verfahren zu aufwendig sind.

Da im Allgemeinen bei impliziten Verfahren, zu jedem Zeitschritt Δt ein lineares Gleichungssystem zu lösen ist, verwendet man für die bessere Performance des Simulationsprogramms ein spezielles Verfahren, z.B. den Thomas- Algorithmus.

Thomas-Algorithmus

Betrachtet man das Crank-Nicholson-Verfahren

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} \left(u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)} + u_{j+1}^{(n+1)} - 2u_j^{(n+1)} + u_{j-1}^{(n+1)} \right),$$

so ergibt sich, nach chronologischer Umstellung und Multiplikation mit 2, folgendes Gleichungssystem

$$\boxed{-ru_{j+1}^{(n+1)} + (2 + 2r)u_j^{(n+1)} - ru_{j-1}^{(n+1)} = ru_{j+1}^{(n)} + (2 - 2r)u_j^{(n)} + ru_{j-1}^{(n)}} \quad (2.20)$$

mit $r = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}.$

Die rechte Seite der Gleichung beinhaltet lediglich Lösungswerte zum alten, bekannten Zeitpunkt, während die linke Seite aus den Unbekannten samt Koeffizienten besteht. Bezeichnet man nun die Unbekannten mit $u^{(n+1)} \rightarrow x$ und die gesamte rechte Seite mit y_j , so erhält man in der üblichen Notation für Gleichungssysteme

$$A \cdot x = y$$

oder in Koeffizientenschreibweise

$$a_j x_{j-1} + b_j x_j + c_j x_{j+1} = y_j \quad (2.21)$$

Zur Vereinfachung wird $a = -r$, $b = 2 + 2r$, $c = -r$ gesetzt. Folgend eine schematische Darstellung des Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} a & b & c & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a & b & c & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a & b & c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = y$$

Die Dimension der Kopplungsmatrix A beträgt $(N - 1) \times (N + 1)$.

Die Anzahl der Zeilen kann leicht aus der Anzahl der noch Unbekannten $x_1 \dots x_{N-1}$ gefolgert werden. In dieser Darstellung stellen x_0 und x_N die Dirichlet-Bedingung des eindimensionalen Problems dar.

Zu jedem Zeitschritt muss nun ein solches Gleichungssystem gelöst werden. Beim Gauss-Verfahren würde im Eliminationsschritt die untere Diagonale eliminiert werden, wodurch einfach x_{N-1} berechnet werden kann. Durch Substitution dieser Lösung in die darüberliegende Zeile kann auch x_{N-2} bestimmt werden und so weiter. Die Idee des Thomas-Algorithmus besteht nun darin, direkt mit der Rücksubstitution, an Hand folgenden Ansatzes, zu beginnen

$$x_{j-1} = e_{j-1} x_j + f_{j-1} \quad (2.22)$$

Damit bekommt die Gleichung 2.20 folgende Gestalt (rechte Seite wird wie gehabt mit y_j bezeichnet).

$$a x_{j-1}^{(n+1)} + b x_j^{(n+1)} + c x_{j+1}^{(n+1)} = y_j$$

Setzt man nun Gleichung 2.22 ein, ergibt sich

$$y_j = a(e_{j-1} x_j^{(n+1)} + f_{j-1}) + b x_j^{(n+1)} + c x_{j+1}^{(n+1)}$$

$$x_j^{(n+1)} (b + a e_{j-1}) = y_j - a f_{j-1} - c x_{j+1}^{(n+1)}$$

$$x_j^{(n+1)} = -x_{j+1}^{(n+1)} \frac{c}{b + a e_{j-1}} + \frac{y_j - a f_{j-1}}{b + a e_{j-1}}$$

Vergleicht man nun den letzten Ausdruck mit Gleichung 2.22 so erhält man

$$\begin{aligned} e_j &= \frac{-c}{b + ae_{j-1}} \\ f_j &= \frac{y_j - af_{j-1}}{b + ae_{j-1}} \end{aligned} \tag{2.23}$$

Dies stellt eine aufsteigende Rekursion dar, die bei Vorhandensein von Startwerten bestimmt werden kann. Die Startwerte erhält man einfach aus der ersten Zeile des Gleichungssystems.

$$ax_0 + bx_1 + cx_2 = y_1$$

Auflösen nach x_1 ergibt

$$x_1 = \frac{y_1 - cx_2 - ax_0}{b}$$

Vergleicht man dies mit dem Ansatz für den Thomas-Algorithmus (Gleichung 2.22), so erhält man

$$e_1 = \frac{-c}{b}$$

$$f_1 = \frac{y_1 - ax_0}{b}$$

Diese Ergebnisse erhält man auch, wenn man ganz formal

$$e_0 = 0 \tag{2.24}$$

$$f_0 = x_0$$

setzt. Das heißt, nach aufsteigender Rekursion für alle e_j und f_j können die Lösungswerte x_j in absteigender Rekursion bestimmt werden, da x_0 und x_N als Randwert vorgegeben sind.

2.7 Analytische Lösung

Um die Qualität der numerischen Lösung beurteilen zu können, wird in diesem Abschnitt die analytische Lösung der eindimensionalen Wärmeleitungsgleichung (mit konstanter Wärmeleitfähigkeit λ) mittels

- Fourier-Ansatz

und

- Separationsansatz

hergeleitet.

Dabei soll die Lösung inhomogenen, konstanten Dirichlet-Randbedingungen genügen. Ähnlich wie bei der Lösung von inhomogenen Differentialgleichungen wird auch hier anfänglich das Problem mit homogenen Randbedingungen gelöst und durch eine additive partikuläre Lösung der Inhomogenität Rechnung getragen.

2.7.1 Formulierung des Problems

Zu lösen gilt die partielle Differentialgleichung auf dem Intervall $[0, L]$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$u(x, 0) = f(x) \tag{2.25}$$

$$u(0, t) = 0, \quad u(L, t) = 0$$

2.7.2 Fourier-Ansatz

Für eine stetige reellwertige Funktion im Intervall $[0, L]$ gilt der Ansatz

$$u(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nkx) + b_n \sin(nkx),$$

wobei auf die Koeffizienten a_n und b_n erst später eingegangen wird.

Bei der Wärmeleitungsgleichung geht $u(x) \rightarrow u(x, t)$ über, wobei die Zeitabhängigkeit in die Koeffizienten „gepackt“ wird. Das heißt, man entwickelt die Funktion

zu einem festen Zeitpunkt bezüglich der x -Koordinate in eine Fourier-Reihe. Hier wird $k = 2\pi/L$ gesetzt.

$$u(x, t) = \frac{a_0(t)}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \cos\left(\frac{n2\pi x}{L}\right) + b_n(t) \sin\left(\frac{n2\pi x}{L}\right),$$

Zuerst wird $u(x, t)$ ungerade vom Intervall $[0, L]$ auf das Intervall $[-L, L]$ fortgesetzt und dann in der Entwicklung nur die (ungeraden) Sinusterme beibehalten. Daraus folgt, dass alle $a_n(t) = 0$. Für genauere Informationen über Fourierreihen siehe [8].

Man erhält für den Ansatz

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n(t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (2.26)$$

Setzt man nun den Ansatz in die Wärmeleitungsgleichung ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \sum_n \dot{b}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= - \sum_n b_n(t) \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \end{aligned}$$

Fügt man beide Terme zusammen, folgt

$$\sum_n \dot{b}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = - \sum_n b_n(t) \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right).$$

Ein Koeffizientenvergleich liefert die gewöhnliche Differentialgleichung für die Koeffizienten

$$\dot{b}_n(t) = -D \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 b_n(t) \quad (2.27)$$

Diese Differentialgleichung wird durch Separierung der Variablen gelöst.

$$\begin{aligned} \frac{db_n(t)}{b_n(t)} &= -D \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 dt \\ \log(b_n(t)) &= -D \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 t + c_n \\ b_n(t) &= c_n \exp\left(-\frac{D n^2 \pi^2 t}{L^2}\right) \end{aligned}$$

Die c_n stellen einfach die Fourier-Koeffizienten der Anfangsbedingung dar, das heißt $c_n = b_n(0)$. Setzt man die Lösung der Koeffizienten $b_n(t)$ in die Gleichung 2.26 ein, so ergibt sich die Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp\left(-\frac{D n^2 \pi^2 t}{L^2}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (2.28)$$

Bis hier wurden jedoch lediglich homogene Dirichlet-Randbedingungen angenommen (auch die Anfangsbedingung wurde noch nicht explizit berücksichtigt). Die Beschreibung von inhomogenen Randbedingungen soll nun nachgeholt werden.

Um die inhomogenen Randbedingungen zu erfüllen, kann - falls L (hier ist L ein Differentialoperator) linear ist - eine beliebige zeitunabhängige Funktion $v(x)$ addiert werden. Für eine allgemeine Differentialgleichung der Form $\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f$ sowie $\bar{u} = u - v$ gilt

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} = Lu + f = L(\bar{u} + v) + f = L\bar{u} + Lv + f = L\bar{u} + \bar{f}$$

$$\text{mit } \bar{f} = Lv + f$$

Hierbei muss $\bar{u}$ nur homogene Randbedingungen erfüllen.

In dem hier vorliegenden Fall wäre eine lineare Funktion $v(x) = kx + d$ geeignet. Nun müssen nur mehr die Variablen k und d aus den gewünschten Randbedingungen bestimmt werden. Addiert man nun die lineare Funktion $v(x)$, so erhält man die endgültige Lösung der Wärmeleitungsgleichung

$$u(x, t) = \left[\sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp\left(-\frac{D n^2 \pi^2 t}{L^2}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right] + \underbrace{\frac{b-a}{L}x + a}_{v(x)} \quad (2.29)$$

Die Lösung zum Zeitpunkt $t = 0$, entspricht gerade der Anfangsbedingung, und lautet

$$u(x, 0) = \underbrace{\left[\sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right]}_{\text{Fourier-Reihe}} + \frac{b-a}{L}x + a \quad (2.30)$$

Mit den Koeffizienten c_n kann somit die Anfangsbedingung $u(x, 0) = f(x)$ implementiert werden.

Für die Koeffizienten einer Fourier-Reihe mit $k = \pi/L$ gilt

$$c_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad (2.31)$$

Interpretation

Die Lösung der Wärmeleitungsgleichung kann also als eine Fourier-Darstellung der Anfangsbedingung $f(x)$ interpretiert werden, wobei die in dieser enthaltenen Wellenlängen zeitlich unterschiedlich schnell zerfallen.

Zu diesem Schluss gelangt man, wenn die unterschiedlichen Wellenvektoren $k_n = n \cdot \frac{\pi}{l}$ und die jeweils dazugehörigen Exponentialfaktoren $\exp(\cdot)$ betrachtet werden. Offensichtlich zerfallen die kurzwelligen Anteile der Lösung am schnellsten, wodurch die Lösung zu größeren Zeiten hauptsächlich durch die langwelligen Anteile bestimmt wird.

2.7.3 Separationsansatz

Um die Lösung durch den Fourier-Ansatz zu bestätigen, wird auch noch versucht, die Wärmeleitungsgleichung mit einem Separationsansatz zu lösen, obwohl durch diesen Ansatz nur spezielle Lösungen gefunden werden können.

Dazu wird die Lösungsfunktion $u(x, t)$ als Produkt von zwei Funktionen, mit jeweils nur einer Abhängigkeit, angesetzt.

$$u(x, t) = T(t)X(x)$$

Setzt man nun diesen Ansatz in die Wärmeleitungsgleichung ein, erhält man

$$\begin{aligned}\dot{T}(t)X(x) &= DT(t)X''(x) \\ \frac{\dot{T}(t)}{T(t)} &= D \frac{X''(x)}{X(x)} = \pm\nu \\ \nu &\dots \text{Separationskonstante}\end{aligned}$$

Somit erhält man aus der partiellen Differentialgleichung zwei gewöhnliche Differentialgleichungen.

$$\frac{\dot{T}(t)}{T(t)} = \pm\nu, \quad D \frac{X''(x)}{X(x)} = \pm\nu$$

Die zeitabhängige Lösung beträgt

$$T(t) = c_1 e^{-\nu t}, \tag{2.32}$$

wobei nur die negativen Werte in Frage kommen, da sonst $T(t \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$ gilt, die Lösung jedoch nicht divergieren darf.

Für die zweite Differentialgleichung erhält man als Lösung

$$X(x) = c_2 \sin \left(\sqrt{\frac{\nu}{D}} x \right) + c_3 \cos \left(\sqrt{\frac{\nu}{D}} x \right) \quad (2.33)$$

Setzt man nun die beiden Lösungen der gewöhnlichen Differentialgleichungen in den Produktansatz ein, ergibt dies

$$u(x, t) = T(t)X(x) = e^{-\nu t} \left[\underbrace{c_1 c_2}_c \sin \left(\sqrt{\frac{\nu}{D}} x \right) + \underbrace{c_1 c_3}_d \cos \left(\sqrt{\frac{\nu}{D}} x \right) \right]$$

Hier ist c nicht mit der Wärmekapazität zu verwechseln. Ähnlich wie beim Fourier-Ansatz wird auch hier die Wärmeleitungsgleichung zuerst mit homogenen Randbedingungen gelöst.

$$u(0, t) = d e^{-\nu t} = 0 \quad \rightarrow \quad d = 0$$

Für die zweite Randbedingung folgt

$$u(L, t) = c e^{-\nu t} \sin \left(\sqrt{\frac{\nu}{D}} L \right) = 0$$

Diese Forderung wird durch zwei Möglichkeiten erfüllt, wobei nur eine zielführend ist. Wäre $c = 0$, dann würde sich als Lösung lediglich die triviale Lösung $u(x, t) = 0$ ergeben. Als zweite Möglichkeit kann die Separationskonstante ν angepasst werden. Mit

$$\nu = \frac{n^2 \pi^2 D}{L^2}$$

kann obige Randbedingung auch erfüllt werden. Man erhält somit eine Linearkombination spezieller Lösungen ($c \rightarrow c_n$). Als Gesamtlösung erhält man nun

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp \left(-\frac{D n^2 \pi^2 t}{L^2} \right) \sin \left(\frac{n \pi x}{L} \right) \quad (2.34)$$

Dies ist aber nichts anderes als die Fourier-Darstellung bezüglich der x -Koordinate zu einem festen Zeitpunkt. Das heißt man erhält durch den Separationsansatz erst wieder die Basisfunktionen des Fourier-Ansatzes.

Durch Addition mit $v(x)$ können wieder die inhomogenen Randbedingungen erfüllt werden.

$$u(x, t) = \left[\sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp \left(-\frac{D n^2 \pi^2 t}{L^2} \right) \sin \left(\frac{n \pi x}{L} \right) \right] + \underbrace{\frac{b-a}{L} x + a}_{v(x)}$$

2.7.4 Bestimmung der Fourier-Koeffizienten

Die Wahl der Anfangsbedingung ist eigentlich unwichtig, solange man nur an der stationären Lösung interessiert ist. Der Grund dafür ist, dass die Anfangsbedingung beim Erreichen der stationären Lösung schon „vergessen“ ist. Sucht man aber die zeitabhängige Lösung (z.B. oszillierende Temperaturverläufe mit Periode = 1 Tag), muss man warten bis sich das System „eingeschwungen“ hat.

Die Bestimmung der Fourier-Koeffizienten von Gleichung 2.29 für eine bestimmte Anfangsbedingung soll nun nachgeholt werden. Dabei wird nicht eine beliebige Anfangsbedingung hergeleitet, sondern eine, welche Ähnlichkeiten mit der zu erwartenden Lösung mit sich bringt.

Welche stationäre Lösung ist also zu erwarten?

Stationär bedeutet, dass sich die Lösung zeitlich nicht mehr ändert, dementsprechend muss

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}}_0 &\stackrel{\text{stationär}}{=} D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ 0 &= D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\end{aligned}$$

sein. Somit entspricht $u(x, t)$ im stationären Fall einer linearen Funktion mit entsprechenden Randbedingungen. Ähnliches gilt für ein System aus mehreren Schichten, z.B. für einen Mauerwerksaufbau (Ziegel, Dämmung, Putz). In diesem Fall besteht die stationäre Lösung aus stückweise linearen Funktionen mit unterschiedlichen Steigungen.

Deswegen ist es naheliegend, auch als Anfangsbedingung eine stückweise lineare Funktion zu konstruieren, welche jedoch nicht mit der gesuchten Lösung zusammenfallen muss.

Abbildung 2.10 soll die gewünschte Anfangsbedingung verdeutlichen. Die Anfangsbedingung hat somit die Form

$$f(x) = \begin{cases} \frac{v}{w}x & x \in [0, w] \\ \frac{v}{L-w}(L-x) & x \in [w, L] \end{cases}$$

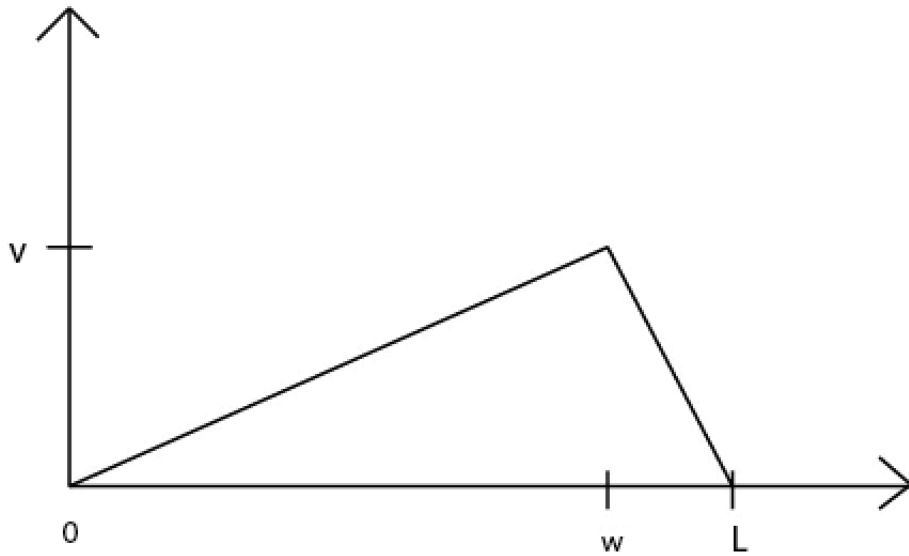


Abbildung 2.10: stückweise lineare Funktion

Für die Fourier-Koeffizienten gilt die bekannte Relation aus 2.31, wobei $k = \pi/L$

$$c_n = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

Nach dem Einsetzen der Integralgrenzen ergibt sich

$$\begin{aligned}
 c_n &= \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\
 &= \frac{2}{L} \left[\int_0^w \frac{v}{w} x \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx + \int_w^L (L-x) \frac{v}{L-w} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \right] \\
 &= \frac{2}{L} \left[\underbrace{\frac{vL \left(L \sin\left(\frac{n\pi w}{L}\right) - \pi w n \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right) \right)}{\pi^2 w n^2}}_{\text{1. Integral}} + \right. \\
 &\quad \left. + \underbrace{\frac{vL \left(L \left(\sin(n\pi) - \sin\left(\frac{n\pi w}{L}\right) \right) + \pi n(w-L) \cos\left(\frac{n\pi w}{L}\right) \right)}{\pi^2 n^2 (w-L)}}_{\text{2. Integral}} \right]
 \end{aligned}$$

Bringt man nun beide Terme auf gleichen Nenner und kürzt, so folgt

$$\begin{aligned}
 c_n &= \frac{2vL^2 \sin\left(\frac{\pi wn}{L}\right)}{L\pi^2 n^2} \frac{-L}{w(w-L)} \\
 &= \frac{-2vL^2 \sin\left(\frac{\pi wn}{L}\right)}{\pi^2 w n^2 (w-L)}
 \end{aligned}
 \tag{2.35}$$

2.8 Simulationen mit konstantem Diffusionskoeffizienten

Da nun die wichtigsten mathematischen Grundlagen geschaffen sind, kann mit einigen exemplarischen Simulationen begonnen werden, welche als Grundlagen für die weiterfolgenden Simulationen mehrschichtiger Bauteile (mit nicht-konstanter Wärmeleitfähigkeit λ) dienen sollen.

Dadurch sollen die grundlegenden Fragen im Anwendungsfall simuliert werden. Einige dieser Fragen wären:

- Qualität der verschiedenen Verfahren in Abhängigkeit des eingeführten Parameters r (siehe Gleichung 2.20)

sowie die

- Performance der numerischen Algorithmen

Sämtliche Computerprogramme zur Simulation sind in der Programmiersprache FORTRAN 90/95 implementiert. Dabei kommen verschiedene kleinere Subprogramme zum Einsatz: ein Programm zur Initialisierung der Anfangsbedingung, ein weiteres zur Darstellung der Randbedingungen sowie das eigentliche Hauptprogramm, welches die Berechnungen mit Hilfe des jeweiligen Verfahrens durchführt.

Da in der vorliegenden Arbeit der Fokus auf bauphysikalischen Fragenstellungen liegt, sollen an dieser Stelle erstmals alle relevanten materialspezifischen Parameter aufgelistet werden.

Diese finden auch in den weiterführenden Simulationen (nicht-konstanter Diffusionskoeffizient) Verwendung.

Tabelle 2.1: materialspezifische Parameter [12], [13]

Material	$\lambda \left[\frac{\text{W}\cdot\text{m}}{\text{K}} \right]$	$\rho \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$	$c \left[\frac{\text{J}}{\text{kg}\cdot\text{K}} \right]$
Ziegel	0.7	1800	1000
Beton	2.1	2500	1000
Polystyrol (EPS)	0.04	15	1400

In der Tabelle stellt die zweite Spalte die Wärmeleitfähigkeit λ , die dritte die Masendichte ρ und die vierte die spezifische Wärmekapazität c dar. Die Abkürzung in der ersten Spalte beschreibt eine spezielle Variante des Polystyrol (EPS ... expandiertes Polystyrol).

In allen folgenden Simulationen soll ein Außenmauerwerk unter Einfluss verschiedener Randbedingungen simuliert werden. Die Mindestschichtdicke bei einem Außenmauerwerk muss, bei tragender Funktion, zumindest 36 cm betragen. Weiters werden die Randbedingungen an der Innenseite konstant gehalten, wobei sich, je nach Simulation, die äußeren Randbedingungen zeitlich ändern dürfen. Zusätzlich gibt es zu beachten, dass bei allen Diagrammen die berechnete Größe (Temperatur, etc.) jeweils in der Mitte des Diskretisierungsintervalls aufgetragen wird, wodurch die Grafiken nicht am exakten Nullpunkt des Koordinatensystems starten (sondern bei $\Delta x/2$) und ebenso wenig am exakten Ende L enden (sondern bei $L - \Delta x/2$). Als Anfangszustand werden zwei stückweise lineare Funktionen gewählt, die an der Stelle $x = 0.30$ m verbunden sind. Dieser geknickte Anfangszustand wird gewählt, damit dieser Ähnlichkeiten mit der stationären Lösung hat (insbesondere in den nachfolgenden Kapiteln, wo $\lambda \neq \text{const}$)

Zu Beginn soll zunächst eine qualitative „Orientierungssimulation“ Aufschluss darüber geben, ob relevante Unterschiede in der Genauigkeit bei gleichen Diskretisierungsbedingungen beider (explizites Euler-Verfahren und CN-Verfahren) numerischer Verfahren zu erwarten sind.

Das Modellproblem der Orientierungssimulation stellt ein homogenes einschichtiges System (50 cm Ziegel) dar. Es werden konstante Dirichlet-Randbedingungen, sowohl innen als auch außen, angenommen. Die Anfangsbedingung hat einen „Knick“ bei 0.30 m. Dieser Knick kann natürlich nicht exakt dargestellt werden, da nur endlich viele Terme der Reihenentwicklung berücksichtigt werden. Insbesondere soll die Relaxation des anfänglichen Temperaturverlaufs zur stationären Lösung (linearer Verlauf) überprüft werden.

Zu jeder Abbildung wird eine Tabelle gezeigt, welche die in der Simulation verwendeten Parameter aufzeigt. Dabei gibt Δt_{plot} über das Zeitintervall der einzelnen Kurven Aufschluss und t_{stat} entspricht der Zeit zum Erreichen des stationären Zustandes, welcher durch die im Programm implementierte Abbruchbedingung erreicht wird. Die Abbruchbedingung ist von der Form $|T_j^{(n)} - T_j^{(n+m\Delta t)}| \leq 10^{-2} \forall j$, wobei m (natürliche Zahl, beliebig) das Zeitintervall zwischen den einzelnen Kurven (Temperatur-Ort-Kurven) bestimmt. (Dabei ist zu beachten, dass unterschiedliche Abbruchbedingungen zu unterschiedlichen t_{stat} führen, weshalb dieser Parameter nicht zu „eng“ betrachtet werden sollte). Desweiteren soll noch erwähnt werden, dass die analytische Lösung für alle nachfolgende Kapiteln als Reihenentwicklung bezeichnet wird, da nur endlich viele Terme der Summe (50 Terme werden im Simulationsprogramm verwendet) berücksichtigt werden können und deshalb auch mit einem Fehler behaftet ist.

Tabelle 2.2: Parameter zu Abbildung 2.11

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	Δt_{plot} [h]	t_{stat} [h]
CN - Verfahren	0.01	30	4	510.5
exp. Euler	0.01	30	4	518
Reihenentwicklung	-	-	4	155

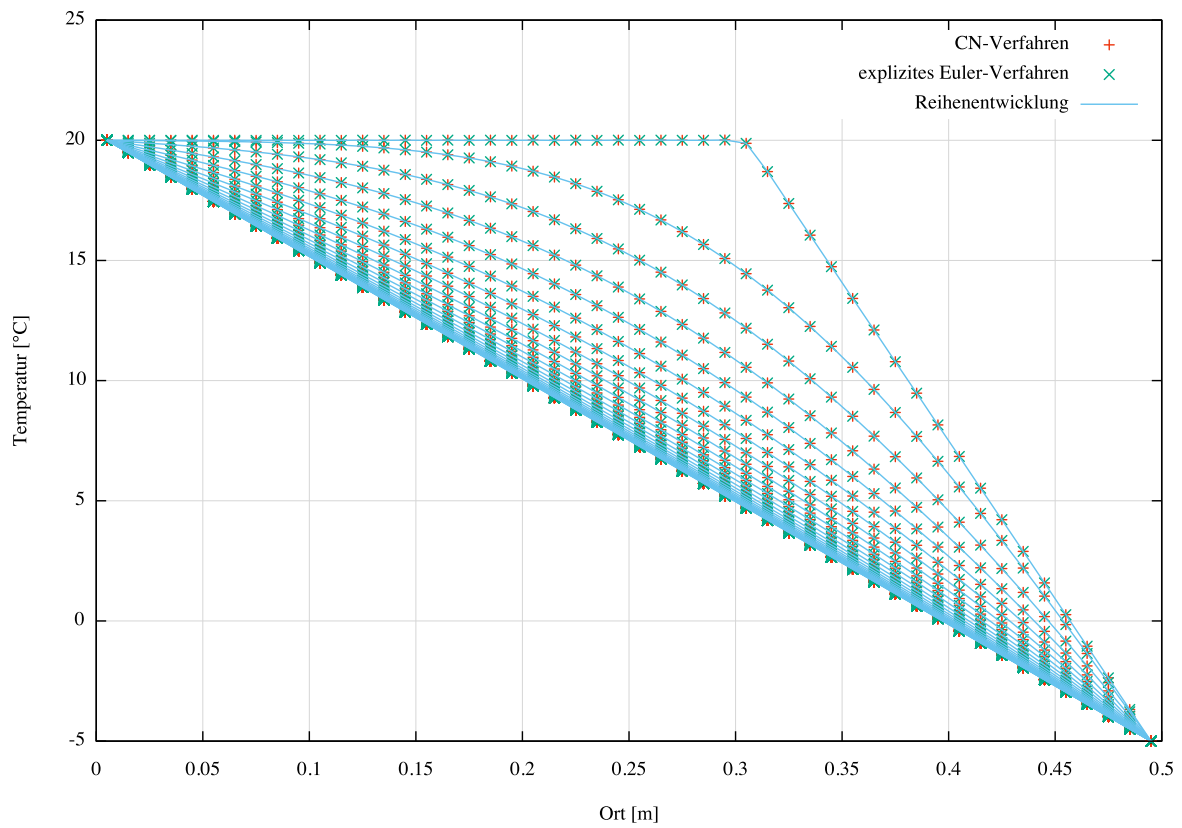


Abbildung 2.11: qualitative Analyse: 50 cm Ziegel

Man sieht durch Abb. 2.11 recht deutlich, dass sowohl das explizite Euler Verfahren (1. Ordnung) als auch das CN-Verfahren (2.Ordnung) qualitativ sehr gut mit der Reihenentwicklung der Lösung übereinstimmen. Wie bereits erwähnt ist die „analytische“ Lösung durch die endliche Reihenentwicklung jedoch auch mit einem kleinen Fehler behaftet.

Einzig das Erreichen des stationären Zustandes wird bei weitem überschritten. Wie jedoch bereits erwähnt, hängt dies von der Abbruchbedingung des numerischen Algorithmus ab. Man sieht, dass in der Nähe der stationären Lösung die Anzahl der numerisch berechneten Kurven sehr groß ist, weshalb ein Abschwächen der Abbruchbedingung gerechtfertigt wäre. Dadurch würde sich natürlich auch der stationäre Zeitpunkt deutlich nach vorne verschieben.

Um eine quantitative Aussage über das Verhalten der numerischen Verfahren, im Vergleich zur Reihenentwicklung, machen zu können, wird in Abb. 2.12 der Fehler $u_{\text{Reihe},j}^{(n)} - u_{\text{num.},j}^{(n)}$ gezeigt. Das linke Diagramm zeigt den Fehler des CN-Verfahrens und das rechte Diagramm den Fehler des expliziten Euler-Verfahrens.

Interpretation

In Abb. 2.12 sind wieder alle Kurven im Zeitintervall von 4 h dargestellt. Zum Zeitpunkt $t = 0$, also der Anfangsbedingung, liegt noch kein Fehler vor - dies ist auch nicht verwunderlich, denn beide Simulationsprogramme wurden mit der gleichen Anfangsbedingung initialisiert. Im nächsten Zeitschritt sieht man jedoch schon Oszillationen des Fehlers, welche im Laufe der Zeit zerfallen bis sich ein linearer Fehlerverlauf einstellt. Der lineare Fehlerverlauf kann folgend erklärt werden: bei beiden numerischen Verfahren wird nach der Initialisierung mit der Funktion zum Zeitpunkt $t = 0$ die Funktionswerte an den Randpunkte $x_{\Delta x/2}$ und $x_{L-\Delta x/2}$ zu jedem Zeitschritt nicht mehr berechnet, sondern nur mehr die Werte an den Stellen $x_{\Delta x/2+j\Delta x}$ ($\{\forall j \in \mathbb{N}: x_{\Delta x/2} < x_{\Delta x/2+j\Delta x} < x_{L-\Delta x/2}\}$). Bei der Reihenentwicklung hingegen werden in jedem Zeitschritt alle Funktionswerte an den Stellen $x_{\Delta x/2+j\Delta x}$ ($\{\forall j \in \mathbb{N}: x_{\Delta x/2} \leq x_{\Delta x/2+j\Delta x} \leq x_{L-\Delta x/2}\}$) berechnet, wodurch sich die Werte an den Randpunkten ändern können. Trotz des Fehlers im stationären Zustand können beide Verfahren zum Berechnen des Endzustands für dieses Modellsystem als hinreichend genau eingestuft werden (Größenordnung des maximalen Fehlers beträgt rund $10^{-3} \text{ } ^\circ\text{C}$)

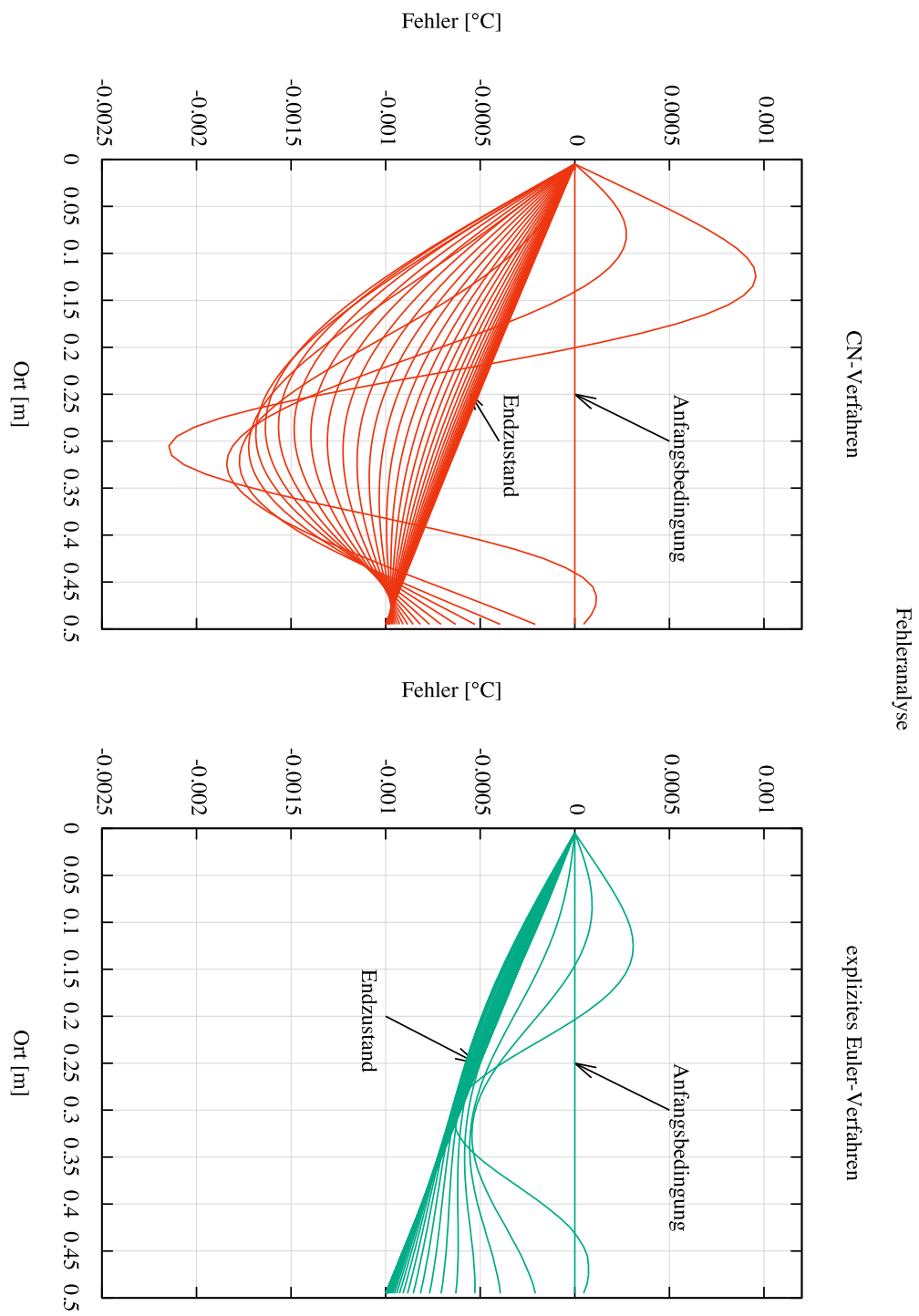


Abbildung 2.12: Fehleranalyse 50 cm Ziegel

Abhängigkeit des Fehlers vom Parameter r

Der Parameter $r = D\Delta t/\Delta x^2$ stellt eine Verbindung zwischen den Diskretisierungsgrößen und der Materialparameter dar und ist deshalb für die Beurteilung der Genauigkeit von großer Bedeutung. Der Parameter r wurde bereits in Gleichung 2.20 eingeführt.

Für die quantitative Beurteilung der Genauigkeit eines numerischen Verfahrens eignet sich die Untersuchung der dazu gehörigen Dispersionsrelation. Dazu wird eine Fourierdarstellung der Lösungsfunktion mit Basisfunktionen (Fourier-Moden) $e^{i(kx-\omega t)}$ verwendet, um den typischen Zusammenhang $\omega = \omega(k)$ (Dispersionsrelation) zu erhalten. Diese Fourierdarstellung wird einerseits für die „originale“ Differentialgleichung und andererseits in diskreter Form für das numerische Verfahren gemacht. Durch den Vergleich der Dispersionsrelation für die originale Differentialgleichung und der Dispersionsrelation für das numerische Verfahren, kann man durch Änderung des Parameters r Rückschlüsse über die Genauigkeit des numerischen Verfahrens erhalten.

Für das CN-Verfahren erhält man als optimalen Wert [3] des Parameters $r \approx 0.5$, für das Euler-Verfahren hingegen $r \approx 0.25$. Das heißt, dass bei gleichem Δx beim CN-Verfahren deutlich größere Zeitschritte verwendet werden können. Wird der optimale Wert des Parameters r überschritten, so wird im Falle vom CN-Verfahren der Parameter r komplex und es treten oszillierende Moden auf. Unterhalb von $r \approx 0.5$ bleibt die Dispersionsrelation reell, jedoch variiert die Genauigkeit.

Im folgenden wird eine Fehleranalyse des CN-Verfahrens (Abb. 2.13) bei unterschiedlichen Werten des Parameters r gezeigt (Material: Ziegel). Dabei wird $\Delta x = 0.01$ m konstant gehalten, während Δt variiert. Hierbei ist zu beachten, dass die erste dargestellte Kurve in jedem Diagramm jene nach $t = 15$ min (nicht bei $t = 0$) ist (Begründung folgt). Die Anfangsbedingung muss ohnehin fehlerfrei sein.

Die Abbildungen in der obersten Reihe sind nahezu identisch, wobei $r < 0.5$ und

Tabelle 2.3: Parameter zu Abbildung 2.13

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	Δt_{plot} [h]	Parameter r
CN - Verfahren	0.01	30	4	0.116
CN - Verfahren	0.01	100	4	0.388
CN - Verfahren	0.01	200	4	0.7
CN - Verfahren	0.01	300	4	1.166

die Dispersionsrelation reell ist. Die linke untere Abbildung zeigt bei $r > 0.5$ den mit Abstand größten Fehler (beachte anderen Maßstab). Das rechte untere Bild entspricht ebenso einer komplexen Dispersionsrelation, wobei auch die anfänglichen Oszillationen zu sehen sind. Da diese hochfrequenten Oszillationen bereits nach kurzer Zeit zerfallen ($\propto \exp(-Dn^2\pi^2t/L^2)$, siehe Gleichung 2.28), wurde der Anfangszustand bei $t = 15$ min gewählt, da sonst die Oszillationen bei einem Zeitintervall von 4 h nicht mehr sichtbar gewesen wären.

Trotz alledem geht der Fehler, auch bei einem Modem $r > 0.5$, für $t \rightarrow t_{\text{stat}}$ gegen einen linearen Fehlerverlauf (Größenordnung des maximalen Fehlers 10^{-3}°C), welcher vernachlässigbar klein ist. Dies liegt wohl daran, dass in jedem Fall alle Moden im Laufe der Zeit zerfallen und nur der lineare Temperaturverlauf übrig bleibt. Der eigentliche Unterschied liegt vor allem am Beginn der Zeitentwicklung für $r > 0.5$, wo Oszillationen auftreten können.

Die Größenordnung des Fehlers liegt bei dieser Simulationsreihe (variablem Δt) in einem ähnlichen Bereich - einzige Ausnahme ist die Simulation mit einem Parameter $r = 0.7$, wo der anfängliche Fehler um eine Größenordnung mehr ist.

Nun soll noch bei konstantem Δt und variablen Δx eine Fehleranalyse gemacht werden. Dazu betrachte man nachfolgende Abbildung 2.14. Der Zeitschritt wird hier fest, mit $\Delta t = 30$ s, gewählt. In dieser Abbildung ist in jedem Diagramm der erste Zustand wieder bei $t = 15$ min gezeigt (der Anfangszustand $t = 0$ min ist ohnehin fehlerfrei).

Die folgende Tabelle fasst die verwendeten Parameter zusammen.

Tabelle 2.4: Parameter zu Abbildung 2.14

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	Δt_{plot} [h]	Parameter r
CN - Verfahren	0.005	30	4	0.466
CN - Verfahren	0.01	30	4	0.116
CN - Verfahren	0.025	30	4	0.018
CN - Verfahren	0.05	30	4	0.004

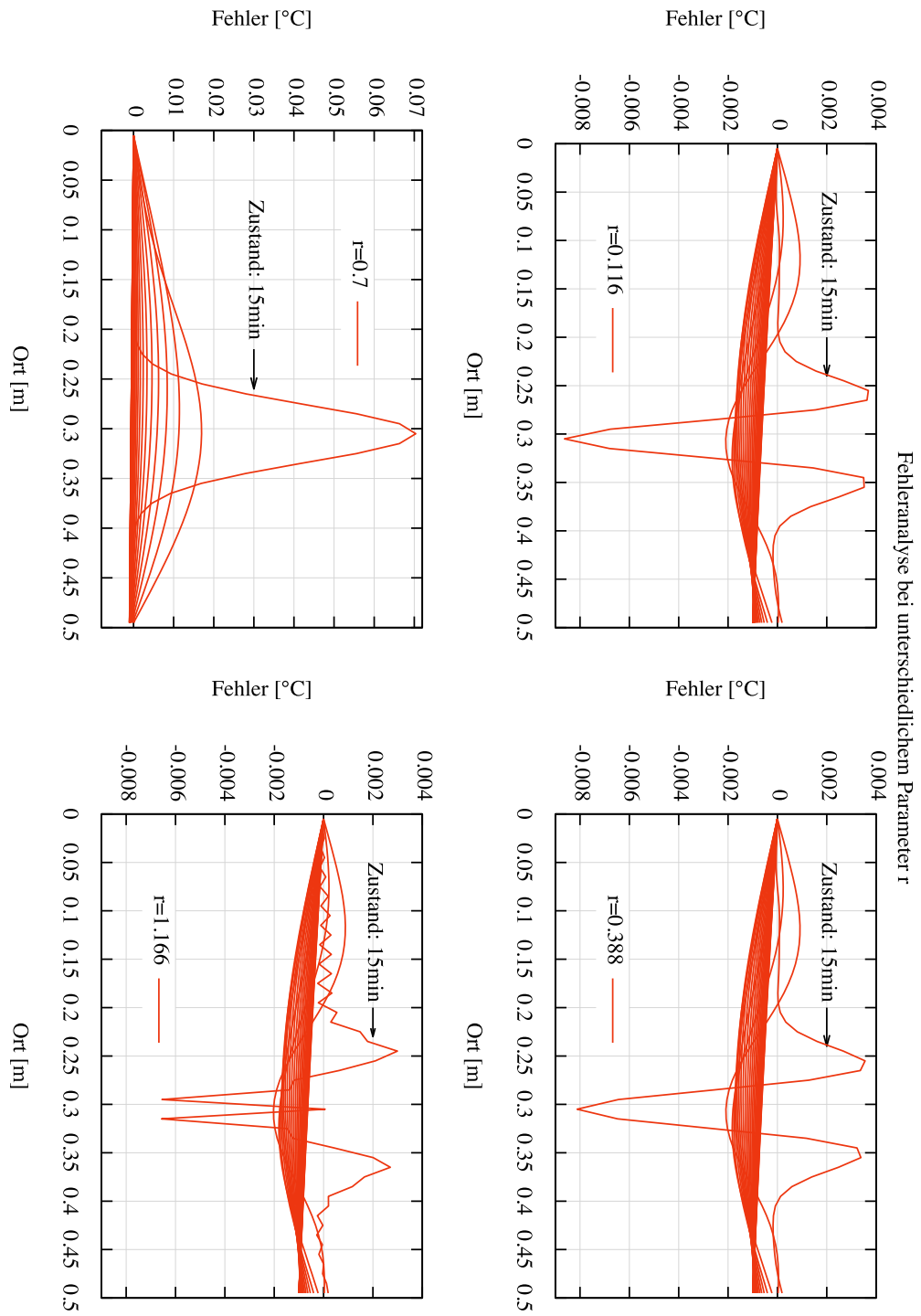


Abbildung 2.13: Fehleranalyse des CN-Verfahrens: $\Delta x = 0.01$ m, $\Delta t =$ variabel

Die erste – zu erwartende – Beobachtung ist, dass mit größer werdendem Δx (also kleinerem Parameter r) der Fehler größer wird (anders als bei variablem Δt), da natürlich die Auflösungsgenauigkeit kleiner wird. Vergleicht man linkes oberes und rechtes unteres Bild, so unterscheidet sich der anfängliche Fehler bei $t = 15$ min rund um den Faktor 100. Ebenso können bei größerem Δx leichte Oszillationen erkannt werden (v.a. bei $r = 0.018$).

Der Fehler geht wieder für $t \rightarrow t_{\text{stat}}$ gegen einen linearen Fehlerverlauf, da wieder alle Moden im Laufe der Zeit zerfallen. Der Fehler ist zwar beim stationären Zustand nicht null, jedoch ist dieser vernachlässigbar klein.

Zusammenfassend kann für die numerischen Simulationen (konstantes D) – CN-Verfahren und explizites Euler-Verfahren – gesagt werden, dass diese weitgehend mit der Reihenentwicklung übereinstimmen (siehe Abb. 2.11). Natürlich ist dieses Testproblem sehr einfach gewählt, wodurch man dieses Verhalten auch hätte erwarten können. Trotz der Einfachheit des Testproblems kann eine deutliche Abhängigkeit vom Parameter r erkannt werden. An Hand von Abb. 2.14 erkennt man deutlich, dass mit geringer Auflösungsgenauigkeit des Ortes die Fehler der Temperaturwerte im instationären Bereich drastisch ansteigen. Dennoch wird auch hier ein „korrekter“ Endzustand erreicht. Bei allen Diagrammen zeigen die numerisch berechneten Temperaturkurven im Vergleich mit der Reihenentwicklung bei kleineren Zeiten den größten Fehler. Dieser Fehler „zerfällt“ im Laufe der Zeit bis sich ein linearer Fehlerverlauf ergibt.

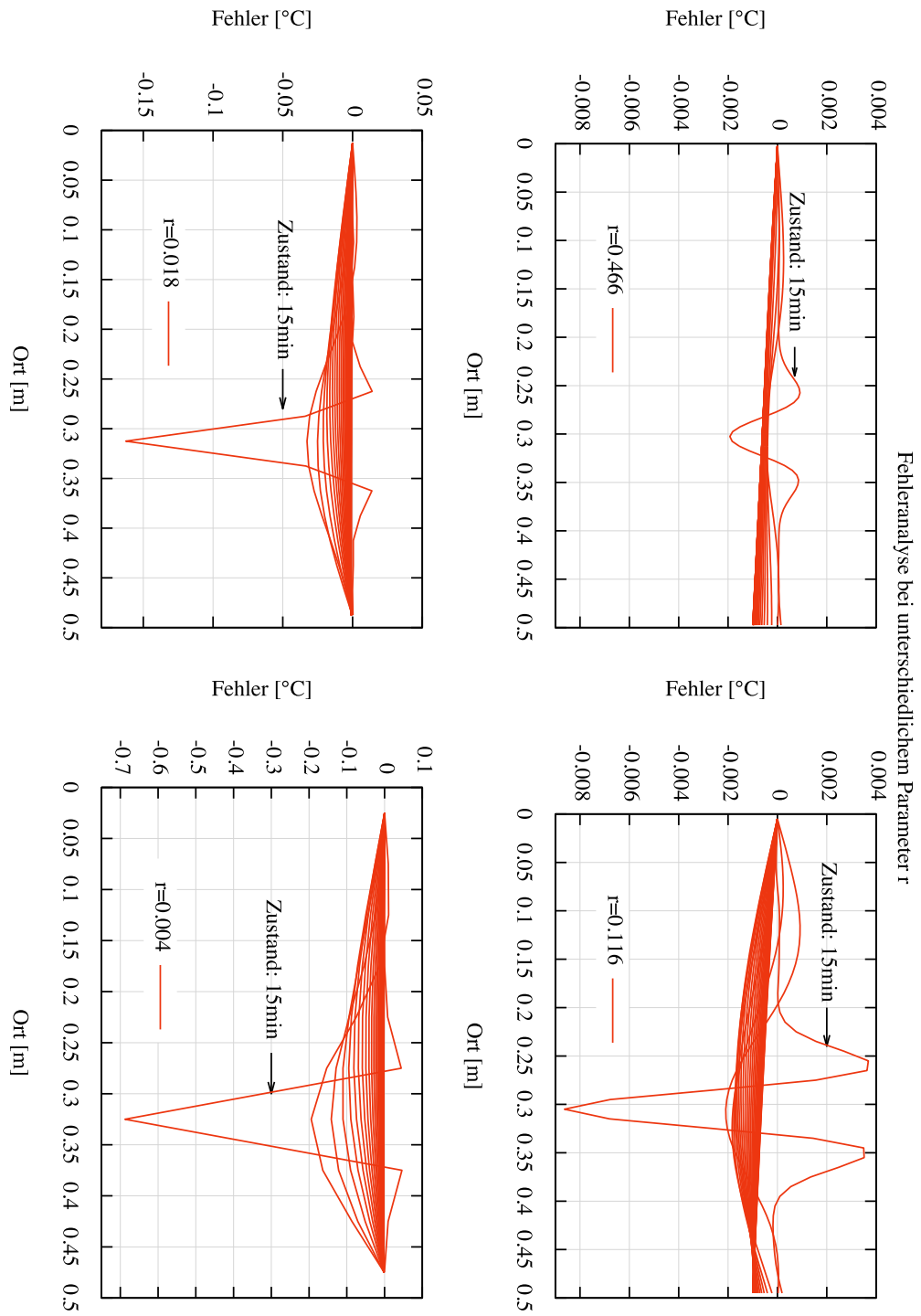


Abbildung 2.14: Fehleranalyse des CN-Verfahrens: $\Delta x = \text{variabel}$, $\Delta t = 30 \text{ s}$

3 Numerische Methoden ($\lambda \neq \text{const.}$)

Da es für die Simulation von bauphysikalischen Fragestellungen nicht ausreichend ist, sich auf einschichtige Bauteile (räumlich konstante Wärmeleitfähigkeit λ) zu beschränken, müssen die Überlegungen für nicht-konstante Wärmeleitfähigkeit erweitert werden.

Ziel ist es ja, ein Programm zu konstruieren, welches den gekoppelten Wärme- und Feuchtetransport in einem beliebigen Mauerwerksaufbau beschreiben kann.

Deswegen werden an dieser Stelle folgende zwei Möglichkeiten besprochen:

- Diskretisierung der allgemeinen Fourier'schen Differentialgleichung
sowie
- die Methode mit Hilfselemente

Bei der ersten Methode handelt es sich sozusagen um den direkten Lösungsversuch der partiellen Differentialgleichung für $\lambda \neq \text{const.}$

Bei der zweiten Methode werden Koppelbedingungen an den Schichtgrenzen benutzt und diese auf mathematischem Wege in die ursprüngliche Wärmeleitungsgleichung implementiert.

Zuerst soll der naheliegende direkte Lösungsversuch diskutiert werden.

3.1 Diskretisierung der Fourier'schen Differentialgleichung

Die allgemeine Form der Wärmeleitungsgleichung wurde bereits in Kapitel 2.5 auf Seite 16 hergeleitet.

Vernachlässigt man innere Wärmequellen $\dot{\omega}$ und beschränkt man sich auf die Wärmeleitung in x -Richtung, so erhält man die für unsere Zwecke relevante Differentialgleichung

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.1)$$

Man sollte sich an dieser Stelle nochmals in Erinnerung rufen, dass bei der Herleitung der Fourier'schen Differentialgleichung eine konstante Dichte ρ und eine konstante Wärmekapazität c angenommen wurden. Dies schränkt die Anwendbarkeit dieser Methode auf ein Material mit z.B. richtungsabhängiger Wärmeleitfähigkeit, aber sonst isotropen Eigenschaften, ein. Eine etwas flexiblere Methode wird in Abschnitt 3.2 diskutiert.

Um die Differentialgleichung leichter zu diskretisieren, wird diese vorab auf folgende Form gebracht (wieder $u \equiv T$, $L \dots$ linearer Differentialoperator)

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{1}{\rho c} (\lambda_x u_x + \lambda u_{xx}) \\ &= (D_x u_x + D u_{xx}) = Lu\end{aligned}$$

$$\text{mit } (Lu)(x, t) = D_x(x)u_x(x, t) + D(x)u_{xx}(x, t)$$

Dieses (Lu) kann nun in ein beliebiges Verfahren (hier explizites Euler-Verfahren) eingesetzt werden. Das Euler-Verfahren wurde auf Grund vorangegangener Simulationen gewählt, da die Genauigkeit, im Vergleich zum CN-Verfahren, keine wesentlichen Unterschiede zeigte. Wird obiges (Lu) nun in Gleichung 2.14 eingesetzt und verwendet man die bereits hergeleiteten Differentialquotienten, so ergibt sich

$$\begin{aligned}u_j^{(n+1)} &= u_j^{(n)} + \Delta t [D_x(x_j)u_x^{(n)}(x_j) + D(x_j)u_{xx}^{(n)}(x_j)] \\ &= u_j^{(n)} + \Delta t \left[\frac{D_{j+1} - D_{j-1}}{2\Delta x} \frac{u_{j+1}^{(n)} - u_{j-1}^{(n)}}{2\Delta x} + D_j \frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{\Delta x^2} \right] \\ &= u_j^{(n)} + \Delta t \left[\frac{(D_{j+1} - D_{j-1}) (u_{j+1}^{(n)} - u_{j-1}^{(n)})}{4\Delta x^2} + D_j \frac{u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}}{\Delta x^2} \right] \\ &= u_j^{(n)} + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \left[\frac{(D_{j+1} - D_{j-1}) (u_{j+1}^{(n)} - u_{j-1}^{(n)})}{4} + D_j (u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}) \right]\end{aligned}\tag{3.2}$$

Um nun die Diskretisierung implementieren zu können, muss noch eine geeignete Funktion für $\lambda(x)$ gefunden werden. Da nach Möglichkeit ein Mauerwerksaufbau, aus verschiedenen isotropen Schichten bestehend, simuliert werden soll, muss die gesuchte Funktion zwei weitestgehend konstante Bereiche aufweisen, welche an den Schichtgrenzen ineinander übergehen. Eine derartige Form weist beispielsweise die Fermi-Funktion auf, die wir uns zunutze machen wollen.

Die Fermi-Formel [14] lautet

$$w(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right) + 1}$$

wobei $w(E) \dots$ Besetzungswahrscheinlichkeit, $E \dots$ Energie, $E_F \dots$ Fermi-Energie, $k_B \dots$ Boltzmann-Konstante und $T \dots$ Temperatur ist.

Multipliziert man dies mit $\lambda_1 - \lambda_2$ und addiert man λ_2 , erhält man die gewünschte Form - mit den Ersetzungen $E \rightarrow x$, $E_F \rightarrow x_0$ und $k_B T \rightarrow \gamma$.

x_0 entspricht der Schichtgrenze und mit γ variiert man den Übergang von $\lambda_1 \rightarrow \lambda_2$.

$$\lambda(x) = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\exp\left(\frac{x-x_0}{\gamma}\right) + 1} + \lambda_2 \quad (3.3)$$

In der folgenden Abbildung soll die Fermi-Funktion schematisch dargestellt werden. Durch Änderung des Parameters γ , kann die Funktion 'aufgeweicht' bzw. 'sprungartiger' gestaltet werden. Da in der Praxis an der Schnittstelle zweier Ma-

Fermi-Funktion

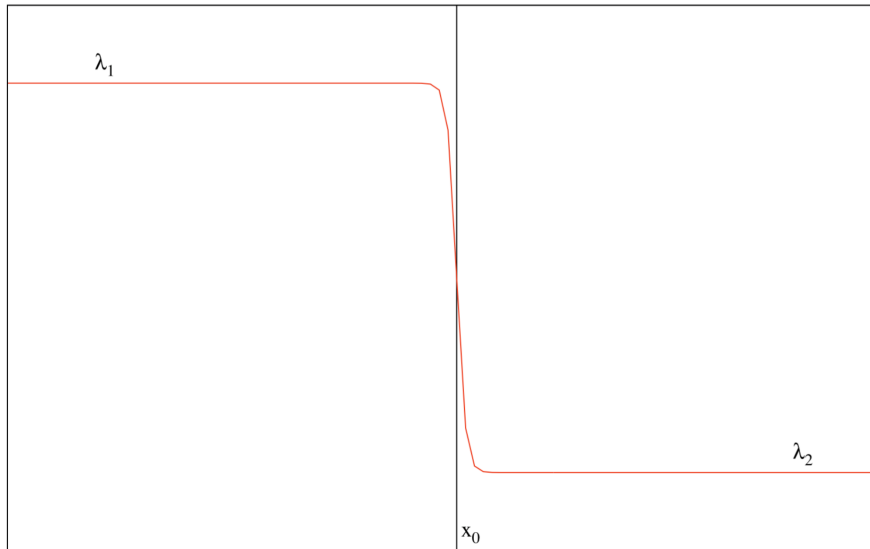


Abbildung 3.1: adaptierte Fermi-Funktion

terialien kein sprungartiger Übergang (z.B. Luftlöcher, etc.) der Diffusionskoeffizienten gegeben ist, zeigt obige Abbildung eine gute Näherung, wobei der Diffusionskoeffizient an der Stelle $x = x_0$ durch den Mittelwert beider λ -Werte gegeben ist.

$$\begin{aligned} \lambda(x = x_0) &= \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{\exp\left(\frac{x_0 - x_0}{c}\right) + 1} + \lambda_2 \\ &= \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \end{aligned}$$

3.1.1 Stabilitätsanalyse

Die Vorgehensweise bzw. der mathematische Hintergrund ist analog wie in Kapitel 2.5.1 auf Seite 26.

Verwendet man nun obige Diskretisierung (Gleichung 3.2) unter Berücksichtigung von $D(x) = \lambda(x)/(\rho c)$, so erhält man

$$u_j^{(n+1)} = u_j^{(n)} + \frac{\Delta t}{\rho c \Delta x^2} \left[\frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) (u_{j+1}^{(n)} - u_{j-1}^{(n)})}{4} + \lambda_j (u_{j+1}^{(n)} - 2u_j^{(n)} + u_{j-1}^{(n)}) \right]$$

Berücksichtigt man, dass der Fehler $\epsilon_j = \exp(ikx_j)$ sich gleich wie die Lösung fortpflanzt, so führt dies auf

$$\begin{aligned} \epsilon_j^{(n+1)} &= \epsilon_j^{(n)} + \underbrace{\frac{\Delta t}{\rho c \Delta x^2}}_w \left[\frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) (\epsilon_{j+1}^{(n)} - \epsilon_{j-1}^{(n)})}{4} + \lambda_j (\epsilon_{j+1}^{(n)} - 2\epsilon_j^{(n)} + \epsilon_{j-1}^{(n)}) \right] \\ &= e^{ikx_j} + w \left[\frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) (e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}})}{4} + \lambda_j (e^{ikx_{j+1}} - 2e^{ikx_j} + e^{ikx_{j-1}}) \right] \\ &= e^{ikx_j} + w \left[\frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) (e^{ik(x_j+\Delta x)} - e^{ik(x_j-\Delta x)})}{4} + \lambda_j (e^{ik(x_j+\Delta x)} - 2e^{ikx_j} + e^{ik(x_j-\Delta x)}) \right] \\ &= e^{ikx_j} \left\{ 1 + w \left[\frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) \overbrace{(e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x})}^{2i \sin(k\Delta x)}}{4} + \lambda_j \overbrace{(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x})}^{2(\cos(k\Delta x)-1)} \right] \right\} \\ &= e^{ikx_j} \left\{ 1 + w \left[\frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) i \sin(k\Delta x)}{2} + 2\lambda_j (\cos(k\Delta x) - 1) \right] \right\} \\ &= e^{ikx_j} \left\{ 1 + w \left[\frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) i \sin(k\Delta x)}{2} - 2\lambda_j \underbrace{(1 - \cos(k\Delta x))}_{2 \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)} \right] \right\} \\ &= e^{ikx_j} \left\{ 1 + w \left[\underbrace{i \frac{(\lambda_{j+1} - \lambda_{j-1}) \sin(k\Delta x)}{2}}_b - 4\lambda_j \underbrace{\sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}_a \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\epsilon_j^{(n+1)} = e^{ikx_j} \left[\underbrace{1 + w(a + ib)}_{g(k)} \right]$$

Bildet man nun den Betrag $|g(k)|$, so führt dies auf

$$\begin{aligned} |g(k)| &= \sqrt{(1 + wa)^2 + (wb)^2} \\ &= \sqrt{1 + w^2a^2 + 2wa + w^2b^2} \end{aligned}$$

Setzt man nun die Werte für a und b ein, so erhält man

$$\begin{aligned} |g(k)| &= \sqrt{1 + 16w^2\lambda_j^2 \sin^4\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) - 8w\lambda_j \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) +} \\ &\quad + \frac{w^2(\lambda_{j+1}^2 + \lambda_{j-1}^2 - 2\lambda_{j+1}\lambda_{j-1}) \sin^2(k\Delta x)}{4} \end{aligned}$$

Damit $|g(k)| \leq 1$ ist, muss die Diskriminante kleiner als 1 sein. Zudem ist die Diskriminante per Konstruktion positiv.

$$\begin{aligned} &1 + 16w^2\lambda_j^2 \sin^4\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) - 8w\lambda_j \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) + \\ &\quad + \frac{w^2(\lambda_{j+1}^2 + \lambda_{j-1}^2 - 2\lambda_{j+1}\lambda_{j-1}) \sin^2(k\Delta x)}{4} \leq 1 \\ &16w^2\lambda_j^2 \sin^4\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) - 8w\lambda_j \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right) + \\ &\quad + \frac{w^2(\lambda_{j+1}^2 + \lambda_{j-1}^2 - 2\lambda_{j+1}\lambda_{j-1}) \sin^2(k\Delta x)}{4} \leq 0 \end{aligned}$$

Da $\sin^4(\cdot)$ und $\sin^2(\cdot)$ maximal 1 werden können, nimmt man diesen 'schlimmsten' Fall an. Dadurch vereinfacht sich obiger Ausdruck zu

$$16w^2\lambda_j^2 - 8w\lambda_j + \frac{w^2(\lambda_{j+1}^2 + \lambda_{j-1}^2 - 2\lambda_{j+1}\lambda_{j-1})}{4} \leq 0$$

Angenommen, dass $w \neq 0$ und $w > 0$, so ergibt sich nach Division mit w

$$16w\lambda_j^2 - 8\lambda_j + \frac{w(\lambda_{j+1}^2 + \lambda_{j-1}^2 - 2\lambda_{j+1}\lambda_{j-1})}{4} \leq 0$$

Setzt man nun für $w = \Delta t/(\rho c \Delta x^2)$ ein, so ergibt sich nach einigen algebraischen Umformungen

$$\Delta t \leq \frac{32\lambda_j \rho c \Delta x^2}{64\lambda_j^2 + \lambda_{j+1}^2 + \lambda_{j-1}^2 - 2\lambda_{j+1}\lambda_{j-1}} \quad (3.4)$$

Gleichung 3.4 stellt die gesuchte Stabilitätsbedingung der Fourier'schen Differentialgleichung dar - diskretisiert mit dem expliziten Euler-Verfahren.

Nimmt man nun an, dass $\lambda_{j-1} = \lambda_{j+1} = \text{const}$ und verwendet die bereits bekannte Beziehung für den Diffusionskoeffizienten $D = \lambda/(\rho c)$, so ergibt sich wieder die ursprüngliche Stabilitätsbedingung aus Gleichung 2.18

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}$$

3.2 Methode mit Hilfselementen

Bei der Diskretisierung der Fourier'schen Differentialgleichung mussten ρ und c als konstant angenommen werden. Dies schränkt natürlich die Verwendbarkeit deutlich ein, da sich in einem realen Schichtaufbau auch die Dichte und die Wärmekapazität örtlich ändern.

Deswegen wird in diesem Kapitel eine Methode [12] hergeleitet, welche auch diese Eigenschaft ermöglicht. Dazu werden zwei Koppelbedingungen an der Schichtgrenze verwendet, um die beiden unterschiedlichen Systeme zusammenführen zu können. Zudem erlaubt es diese Methode, verschiedene Diskretisierungswerte Δx_j zu implementieren.

Ausgehend von der diskretisierten Version der Wärmeleitungsgleichung (für $\lambda = \text{const}$) werden nun Koppelbedingungen in diese eingesetzt, um ein System von Schichten beschreiben zu können. Dazu wird für jedes Element, welches durch die Diskretisierung mit der Breite Δx_j entsteht, ein Hilfselement konstruiert. Diese Hilfselemente existieren realerweise nicht, da sie nur für unsere Betrachtungen notwendig sind. Deswegen haben diese auch keine Wärmekapazität und weisen die gleiche Breite Δx_j auf. Zudem wird, wie bereits erwähnt, immer die Mitte jedes Elementes als Stützpunkt x_j gewählt und dort auch der Wert u_j ausgewertet.

Eigentlich handelt es sich bei dieser Methode um eine spezielle Form des Finite-Volumen-Verfahrens, welches für partielle Differentialgleichungen mit einer zugrunde liegenden Erhaltungsgröße (hier: Energie) geeignet ist.

In diesem Kapitel werden die Stützpunkte von den realen Elementen mit x_j und jene von den Hilfselementen mit $x_{H,j}$ bezeichnet. Die Funktionswerte werden an den jeweiligen Stützpunkten mit u_j beziehungsweise mit H_j bezeichnet.

Nimmt man nun an, dass Wärme vom Stützpunkt $x_j \rightarrow x_{H,j}$ fließt, so ergibt sich in der Mitte der Funktionswert $u_G \equiv u_{\text{Grenzfl.}}$. Für die ersten beiden Elemente ($j = 1$ und $j = 2$) ergibt sich

$$u_{G1} = \frac{u_1 + H_1}{2} \quad (3.5)$$

$$u_{G2} = \frac{u_2 + H_2}{2} \quad (3.6)$$

Abbildung 3.2 soll unsere Betrachtungen schematisch darstellen. Dabei benötigt man das Hilfselement H_1 für die fiktive Fortsetzung des Gitters links der Grenzfläche (mit Schrittweite Δx_1), das Hilfselement H_2 aber zur fiktiven Fortsetzung (mit

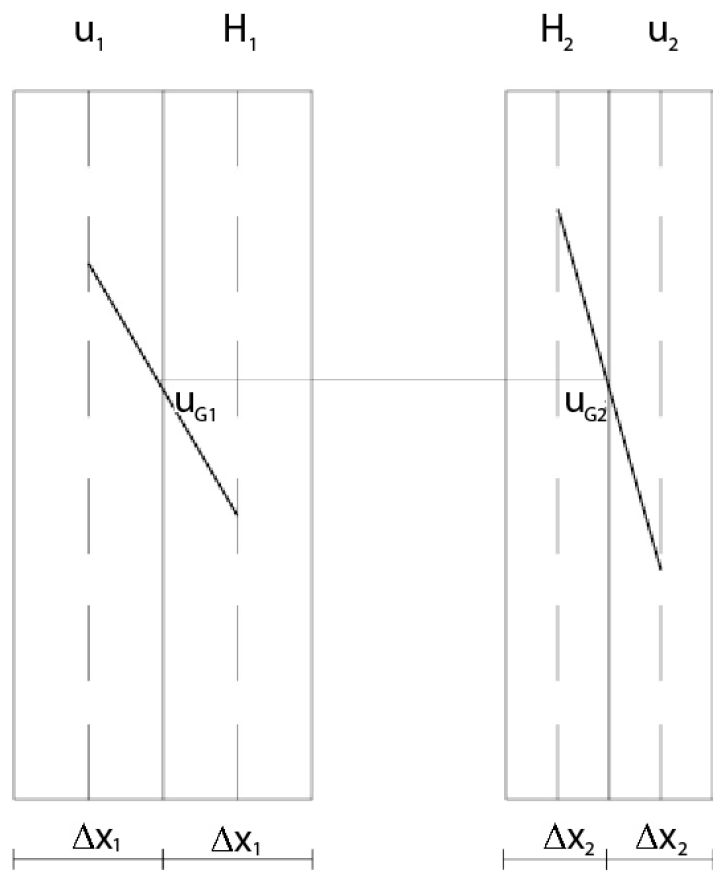


Abbildung 3.2: Konstruktion von Hilfselementen

Schrittweite Δx_2) rechts der Grenzfläche. In dieser Abbildung liegt die Grenzfläche an der Stelle Δx_1 , also zwischen den Gitterpunkten x_1 und x_2 .

Die erste Koppelbedingung, die wir nun anwenden, beschreibt, dass an der Grenzfläche die Funktionswerte gleich sein müssen, also $u_{G1} = u_{G2}$. Anschaulich bedeutet dies, dass zum Beispiel die Temperatur T an der Grenzfläche von zwei Materialien gleich sein muss.

Ersetzt man nun $u_{G2} \rightarrow u_{G1}$ und stellt um, ergibt sich

$$H_2 = 2u_{G1} - u_2$$

Setzt man nun für u_{G1} Gleichung 3.5 ein, erhält man nach Umformung

$$H_1 = H_2 - u_1 + u_2$$

Nun benötigen wir noch die zweite Koppelbedingung. Der Wärmestrom $\dot{q}$ von $x_1 \rightarrow x_{H,1}$ ist gleich dem Strom von $x_{H,2} \rightarrow x_2$. Diese Forderung wird dadurch erfüllt, dass die Hilfselemente keine Speicherkapazität aufweisen. Anhand dieser Koppelbedingung sieht man den typischen Charakter eines Finite-Volumen-Verfahrens. Charakteristisch ist der zu Grunde liegende Erhaltungssatz, welcher für jedes Element (Volumen) gültig ist. Dadurch kann eine Änderung nur durch Abfluss aus einem Element und Zufluss in ein benachbartes Element durch deren gemeinsame Grenzfläche erfolgen.

Im Falle des Wärmestroms stellt diese Bedingung gerade das Fourier-Gesetz dar, $\dot{q} = -\lambda \cdot \nabla T$. Dies entspricht also

$$\lambda_1 \frac{u_1 - H_1}{\Delta x_1} = \lambda_2 \frac{H_2 - u_2}{\Delta x_2} \quad (3.7)$$

Nach Umstellung kann die Differenz $H_2 - u_2$ ausgedrückt werden durch

$$\underbrace{\frac{\lambda_1 \Delta x_2}{\lambda_2 \Delta x_1}}_{K_1} (u_1 - H_1) = H_2 - u_2 \quad (3.8)$$

Hierbei stellt K_1 die Koppelkonstante der Ströme dar.

Ziel ist es nun, die Größe H_2 in Abhängigkeit von u_1 und u_2 zu berechnen. Dazu

setzt man den obigen Ausdruck für H_1 in Gleichung 3.8 ein.

$$\begin{aligned}
K_1 u_1 - K_1 (H_2 - u_1 + u_2) &= H_2 - u_2 \\
H_2 + K_1 H_2 &= 2K_1 u_1 - K_1 u_2 + u_2 \\
(1 + K_1) H_2 &= 2K_1 u_1 + (1 - K_1) u_2 \\
H_2 &= \frac{2K_1 u_1 + (1 - K_1) u_2}{1 + K_1} \equiv H_{2,l}
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Mit der Schreibweise $H_{2,l}$ soll angedeutet werden, dass es sich um den Wert des Hilfselements links von u_2 handelt. Für die Kopplung des Funktionswertes u_2 mit dem Funktionswert u_3 wird nun auch rechts von u_2 ein Hilfselement mit Wert $H_{2,r}$ angefügt und wieder versucht, einen Ausdruck für $H_{2,r}$ in Abhängigkeit von u_2 und u_3 abzuleiten.

Mit analoger Vorgehensweise wird wieder eine Koppelkonstante K_2 gefunden, welche den Proportionalitätsfaktor zwischen den Strömen $(u_2 - H_{2,r})$ und $(H_{3,l} - u_3)$ darstellt.

$$\underbrace{\frac{\lambda_2 \Delta x_3}{\lambda_3 \Delta x_2}}_{K_2} (u_2 - H_{2,r}) = H_{3,l} - u_3$$

Setzt man nun den Ausdruck für $H_{3,l} = u_2 + H_{2,r} - u_3$ ein, ergibt sich

$$\begin{aligned}
K_2 u_2 - K_2 H_{2,r} &= u_2 + H_{2,r} - 2u_3 \\
H_{2,r} + K_2 H_{2,r} &= K_2 u_2 - u_2 + 2u_3 \\
(1 + K_2) H_{2,r} &= (K_2 - 1) u_2 + 2u_3 \\
H_{2,r} &= \frac{2u_3 - (1 - K_2) u_2}{1 + K_2}
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Verallgemeinert man nun dies auf alle Werte u_j , so erhält man als linken bzw. rechten Wert des jeweiligen Hilfselementes

$$\begin{aligned}
H_{j,l} &= \frac{2K_{j-1} u_{j-1} + (1 - K_{j-1}) u_j}{1 + K_{j-1}} \\
H_{j,r} &= \frac{2u_2 - (1 - K_j) u_j}{1 + K_j} \\
\text{mit } K_j &= \frac{\lambda_j \Delta x_{j+1}}{\lambda_{j+1} \Delta x_j}
\end{aligned}$$

(3.11)

Im Falle von äquidistanter Diskretisierung vereinfachen sich die Koppelkonstanten einfach auf das Verhältnis der benachbarten Wärmeleitkoeffizienten bzw. wenn zusätzlich die benachbarten Wärmeleitkoeffizienten gleich sind, werden alle $K_j = 1$.

Die hergeleiteten Ausdrücke $H_{j,l}$ und $H_{j,r}$ (Gleichung 3.11) ersetzen letztlich die Werte u_{j-1} und u_{j+1} . Nun erfüllen die Werte der Hilfselemente aber auch immer die Koppelbedingungen, für den Fall, dass Materialien mit unterschiedlicher Wärmeleitzahl λ zusammenstoßen.

Man sieht, dass für zwei benachbarte Stützpunkte mit gleicher Wärmeleitzahl λ

$$H_{j,l} \longrightarrow u_{j-1}$$

sowie

$$H_{j,r} \longrightarrow u_{j+1}$$

wieder übergeht.

Diese allgemeine Herleitung, ohne Berücksichtigung eines speziellen Verfahrens, ermöglicht es nun, diese Methode sowohl auf das CN-Verfahren als auch auf das explizite Euler-Verfahren anzuwenden.

Es wurde lediglich vorausgesetzt, dass z.B. der Wärmestrom sich linear zwischen den einzelnen Stützpunkten ändert.

Anwendung auf das explizite Euler-Verfahren

Setzt man nun Gleichung 3.11 in die Wärmeleitungsgleichung 2.6 ein, so führt dies auf (wieder mit $r = D\Delta t/\Delta x^2$)

$$\begin{aligned} u_j^{(n+1)} &= u_j^{(n)} + r \left[\frac{2K_{j-1}u_{j-1}^{(n)} + (1 - K_{j-1})u_j^{(n)}}{1 + K_{j-1}} - 2u_j^{(n)} + \frac{2u_{j+1}^{(n)} - (1 - K_j)u_j^{(n)}}{1 + K_j} \right] \\ &= \frac{2rK_{j-1}}{1 + K_{j-1}}u_{j-1}^{(n)} + \left(1 - \underbrace{\frac{r(1 - K_j)}{1 + K_j}}_{G_j} - 2r + \underbrace{\frac{r(1 - K_{j-1})}{1 + K_{j-1}}}_{G_{j-1}} \right) u_j^{(n)} + \frac{2r}{1 + K_j}u_{j+1}^{(n)} \\ &= (r - G_{j-1})u_{j-1}^{(n)} + (1 - 2r - G_j + G_{j-1})u_j^{(n)} + \frac{2r}{1 + K_j}u_{j+1}^{(n)} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Die letzte Gleichung stellt somit die diskretisierte Form der Wärmeleitungsgleichung für ein System aus mehreren Schichten mit unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten dar. Die Koppelkonstanten K_j sind meistens 1 (ausgenommen an der

Grenzschicht von zwei Materialien), wodurch $G_j = 0$.

Anwendung auf das CN-Verfahren

Eine analoge Vorgehensweise gilt auch bei diesem Verfahren. Setzt man die Hilfselemente in Gleichung 2.20 auf der linken Seite ein und bezeichnet die rechte Seite wieder mit y_j , so erhält man

$$\begin{aligned} y_j &= -r \frac{2K_{j-1}u_{j-1}^{(n+1)} + (1 - K_{j-1})u_j^{(n+1)}}{1 + K_{j-1}} + (2 + 2r)u_j^{(n+1)} - r \frac{2u_{j+1}^{(n+1)} - (1 - K_j)u_j^{(n+1)}}{1 + K_j} \\ &= \frac{-2K_{j-1}r}{1 + K_{j-1}}u_{j-1}^{(n+1)} + \left[2 + 2r - \underbrace{\frac{r(1 - K_{j-1})}{1 + K_{j-1}}}_{G_{j-1}} + \underbrace{\frac{r(1 - K_j)}{1 + K_j}}_{G_j} \right] u_j^{(n+1)} - \frac{2r}{1 + K_j}u_{j+1}^{(n+1)} \end{aligned}$$

Die Koeffizient vor $u_{j-1}^{(n+1)}$ kann noch vereinfacht werden.

$$\begin{aligned} \frac{-2K_{j-1}r}{1 + K_{j-1}} &= \frac{r - r - rK_{j-1} - rK_{j-1}}{1 + K_{j-1}} = \frac{-r(1 + K_{j-1}) + r(1 - K_{j-1})}{1 + K_{j-1}} \\ &= \frac{-r(1 + K_{j-1})}{1 + K_{j-1}} + \frac{r(1 - K_{j-1})}{1 + K_{j-1}} = -(r - G_{j-1}) \end{aligned}$$

Eine weitere Vereinfachung ist beim Koeffizient vor $u_{j+1}^{(n+1)}$ möglich.

$$\begin{aligned} -\frac{2r}{1 + K_j} &= \frac{-r - r - rK_j + rK_j}{1 + K_j} = \frac{-r(1 + K_j) - r(1 - K_j)}{1 + K_j} \\ &= \frac{-r(1 + K_j)}{1 + K_j} - \frac{r(1 - K_j)}{1 + K_j} = -(r + G_j) \end{aligned}$$

Werden diese Vereinfachungen wieder eingesetzt, so erhält man das zu lösende Gleichungssystem.

$$-(r - G_{j-1})u_{j-1}^{(n+1)} + (2 + 2r - G_{j-1} + G_j)u_j^{(n+1)} - (r + G_j)u_{j+1}^{(n+1)} = y_j \quad (3.13)$$

3.2.1 Stabilitätsanalyse

Da bei der Methode mit Hilfselementen die verschiedenen Schichten gekoppelt werden, muss für jeden Bereich die Stabilitätsbedingung eigens erfüllt sein.

Für ein System aus n Schichten muss, im Falle des expliziten Euler-Verfahrens, die 'strengste' Bedingung der n Schichten erfüllt sein, damit das gesamte Verfahren stabil ist.

Da das CN-Verfahren für konstantes D stabil ist und, wie erwähnt, diese Bedingung für jeden Bereich (jede Schicht) zutrifft, ist das gesamte Verfahren numerisch stabil. Allerdings wäre der optimale Zeitschritt (bei fixem Δx) für jeden Bereich ein anderer.

3.3 Simulationen mit nicht-konstantem λ , ρ und c

3.3.1 Simulation mit Hilfselementen

In diesem Abschnitt sollen nun die Unterschiede für die verschiedenen Methoden bei nicht-konstanter Wärmeleitfähigkeit λ , Dichte ρ und Wärmekapazität c aufgezeigt werden. Zuerst werden wieder das CN-Verfahren (mit Hilfselementen) sowie das explizite Euler-Verfahren (mit Hilfselementen) miteinander verglichen. Dabei soll in dieser Simulationsreihe ein gekoppeltes System aus verschiedenen Materialien simuliert werden.

In diesem Fall wird ein vereinfachtes Wärmedämmverbundsystem – bestehend aus 36 cm Ziegel und 14 cm Dämmschicht (expandiertes Polystyrol EPS) – herangezogen.

Die relevanten Materialparameter wurden schon in Tabelle 2.8 angegeben. Die folgende Tabelle zeigt die in der Simulation verwendeten Parameter.

Tabelle 3.1: Parameter zu Abbildung 3.3

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	Δt_{plot} [h]	t_{stat} [h]
CN - Verfahren	0.01	20	5	825.5
exp. Euler	0.01	20	5	827.5

Zu beachten ist allerdings, dass das explizite Euler-Verfahren bei einem Zeitschritt von 30 s, wie bei den vorangegangenen Simulationen, jedoch diesmal nicht mehr stabil wäre

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D_{\text{HLZ}}} = 128.57 \text{ s}$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D_{\text{EPS}}} = 26.25 \text{ s}$$

Die 'strengere' Bedingung ist in diesem Falle jene der Dämmschicht (EPS). Das heißt, damit das Verfahren numerisch stabil ist, muss $\Delta t \leq 26.25 \text{ s}$ gewählt werden.

Ausgangssituation

Die Ausgangssituation ist ein 2-Schichtensystem (Ziegel und EPS) mit konstanten Randbedingungen ($T_i = 20^\circ\text{C}$ bzw. $T_a = -5^\circ\text{C}$) und Schichtgrenze an Position $x_0 = 36 \text{ cm}$. Die Anfangsbedingung ist ein stückweiser linearer Temperaturverlauf mit Knick bei 40 cm. Erwartet wird ($t \rightarrow \infty$) ein stationärer Endzustand mit jeweils linearem Temperaturverlauf in den Teilgebieten.

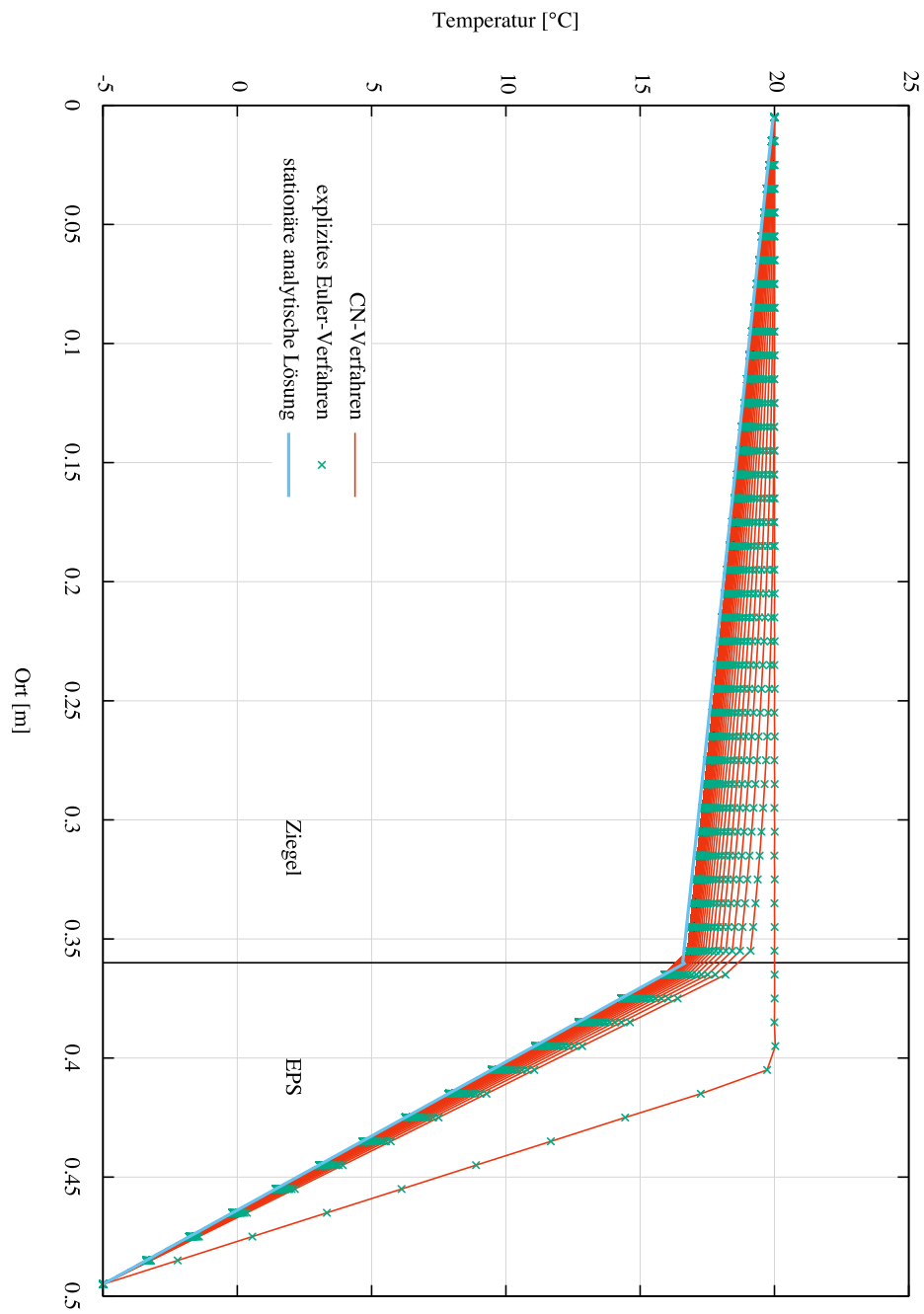


Abbildung 3.3: qualitative Analyse der Verfahren mit Hilfelementen: 36 cm Ziegel, 14 cm EPS

Die stationäre analytische Lösung ($u \equiv T$) für ein 2-Schichtensystem kann folgendermaßen berechnet werden. Für die stationäre Lösung gilt $\partial u / \partial t = 0$. Dadurch vereinfacht sich die Wärmeleitungsgleichung auf

$$D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

mit

$$D = \begin{cases} D_1 \dots 0 \leq x \leq x_0 \\ D_2 \dots x_0 < x \leq L \end{cases}$$

Bezeichnet man nun die Lösungen der beiden verschiedenen Bereiche (Schichten) mit u_1 und u_2 , erhält man nach zweimaliger Integration jeweils eine lineare Funktion

$$u_1 = c_1 x + c_2$$

$$u_2 = c_3 x + c_4$$

Durch Einsetzen der ersten Randbedingung $u_1(x = 0) = T_i$ erhält man $c_2 = T_i$. Die zweite Randbedingung $u_2(x = L) = T_a$ liefert $c_4 = T_a - c_3 L$.

Die verbleibenden Konstanten c_1 und c_3 können durch 2 Koppelbedingungen bestimmt werden. Die erste Koppelbedingung $u_1(x = x_0) = u_2(x = x_0)$ liefert als Ergebnis $c_1 = (c_3(x_0 - L) + T_a - T_i) / x_0$.

Die zweite Koppelbedingung setzt die beiden Wärmeströme $\dot{q}_1$ und $\dot{q}_2$ an der Schichtgrenze gleich

$$-\lambda_1 \left. \frac{\partial u_1}{\partial x} \right|_{x=x_0} = -\lambda_2 \left. \frac{\partial u_2}{\partial x} \right|_{x=x_0}$$

Man erhält für c_3 die Beziehung $c_3 = (T_i - T_a) / (x_0(1 - \lambda_2/\lambda_1) - L)$. Setzt man nun alle Konstanten c_i ($i = 1, \dots, 4$) ein und vereinfacht die Ausdrücke für u_1 und u_2 liefert das

$$\boxed{\begin{aligned} u_1 &= \frac{\lambda_2(T_i - T_a)}{-L\lambda_1 + \lambda_1 x_0 - \lambda_2 x_0} x + T_i & 0 \leq x \leq x_0 \\ u_2 &= \frac{T_i - T_a}{x_0 \left(1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right) - L} (x - L) + T_a & x_0 < x \leq L \end{aligned}} \quad (3.14)$$

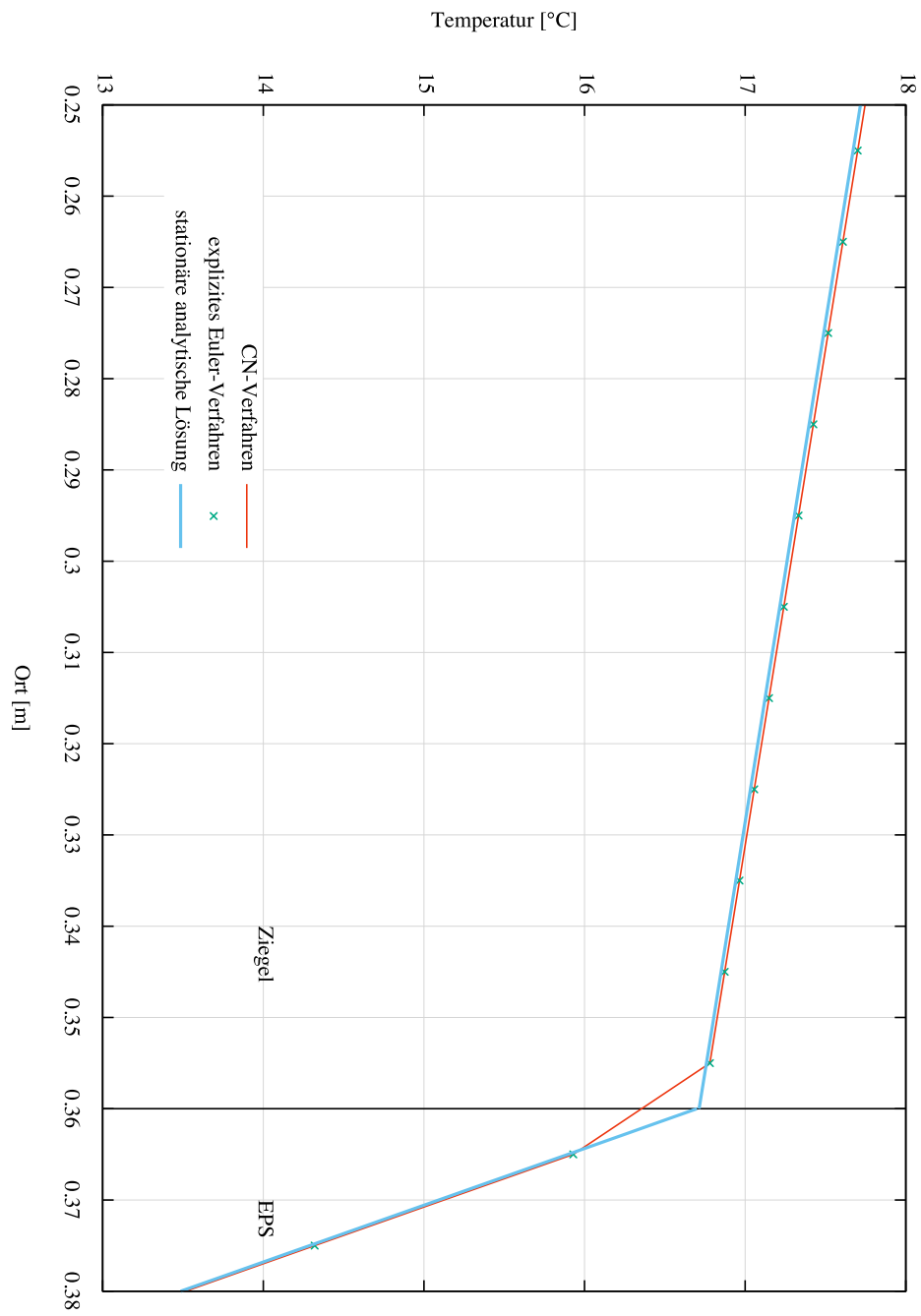


Abbildung 3.4: qualitative Analyse der Verfahren mit Hilfselementen: 36 cm Ziegel, 14 cm EPS, vergrößerter Ausschnitt

Die Abb. 3.4 zeigt einen vergrößerten Ausschnitt von Abb. 3.3, um die Genauigkeit der numerischen Verfahren im Vergleich zur stationären analytischen Lösung besser betrachten zu können. Die größte Abweichung liegt im Bereich der Grenzschicht $x \in [0.355 \text{ m}, 0.365 \text{ m}]$. Man kann jedoch erkennen, dass dieser Fehler auf Grund der Wahl der Diskretisierungsweite $\Delta x = 0.01 \text{ m}$ zustande kommt. Durch eine geringere Diskretisierungsweite können die numerischen Lösungsfunktionen die exakte stationäre Lösung, speziell im Bereich der Grenzschicht, besser darstellen.

Interpretation

Man sieht in Abbildung 3.3 deutlich, dass sowohl das CN-Verfahren als auch das explizite Euler-Verfahren bei der zeitlichen Entwicklung der Lösung, bis hin zum Erreichen des stationären Zustandes (Abb. 3.4), nahezu identische Ergebnisse liefern. Diese Tatsache liegt auch nahe, da bei der qualitativen Analyse mit konstanter Wärmeleitfähigkeit (siehe Abb. 2.11) ein ähnliches Ergebnis erzielt wurde. Die nun verwendeten Verfahren (mit Hilfselementen) sind an sich ja identisch mit den 'originalen' Verfahren, mit Ausnahme an jenen Stellen wo sich D_j und D_{j+1} unterscheiden. An diesen Stellen werden auf algebraische Weise die Koppelbedingungen integriert. In dieser Simulation entspricht dies der Stelle $x = 0.36 \text{ m}$.

Das Verhalten beider Verfahren, hinsichtlich Genauigkeit, ist somit ähnlich dem bei konstantem Diffusionskoeffizienten D .

Die folgende Abbildung soll noch den Unterschied zwischen dem CN-Verfahren und dem expliziten Euler-Verfahren darstellen. Dabei wird zu verschiedenen Zeitpunkten $T_{j,\text{CN}}^{(n)} - T_{j,\text{Euler}}^{(n)}$ gegen x aufgetragen.

Wie die Abbildung 3.5 erkennen lässt, zerfallen die für den Knick in der Anfangsbedingung notwendigen hochfrequenten Anteile unterschiedlich schnell. Die einzelnen Kurven sind durch $\Delta t_{\text{plot}} = 15 \text{ min}$ voneinander getrennt.

Nach ungefähr 8 bis 10 solcher Zeitintervalle, also ca. 2.5 h, zeigen die beiden Verfahren kaum noch einen Unterschied.

In Summe betrachtet eignen sich sowohl das CN-Verfahren als auch das explizite Euler-Verfahren bestens, um den stationären Endzustand zu approximieren. Für eine bessere Genauigkeit, speziell im Bereich der Grenzschicht, muss die Diskretisierungsweite Δx verkleinert werden.

Bei der zeitlichen Entwicklung der numerischen Lösungen gibt es anfänglich kleine Unterschiede (Größenordnung 10^{-2}°C) im Temperaturverhalten, welche jedoch sehr schnell verschwinden. Danach liefern das CN-Verfahren und das explizite Euler-Verfahren (mit Hilfselementen) nahezu gleiche Ergebnisse, siehe Abb. 3.5,

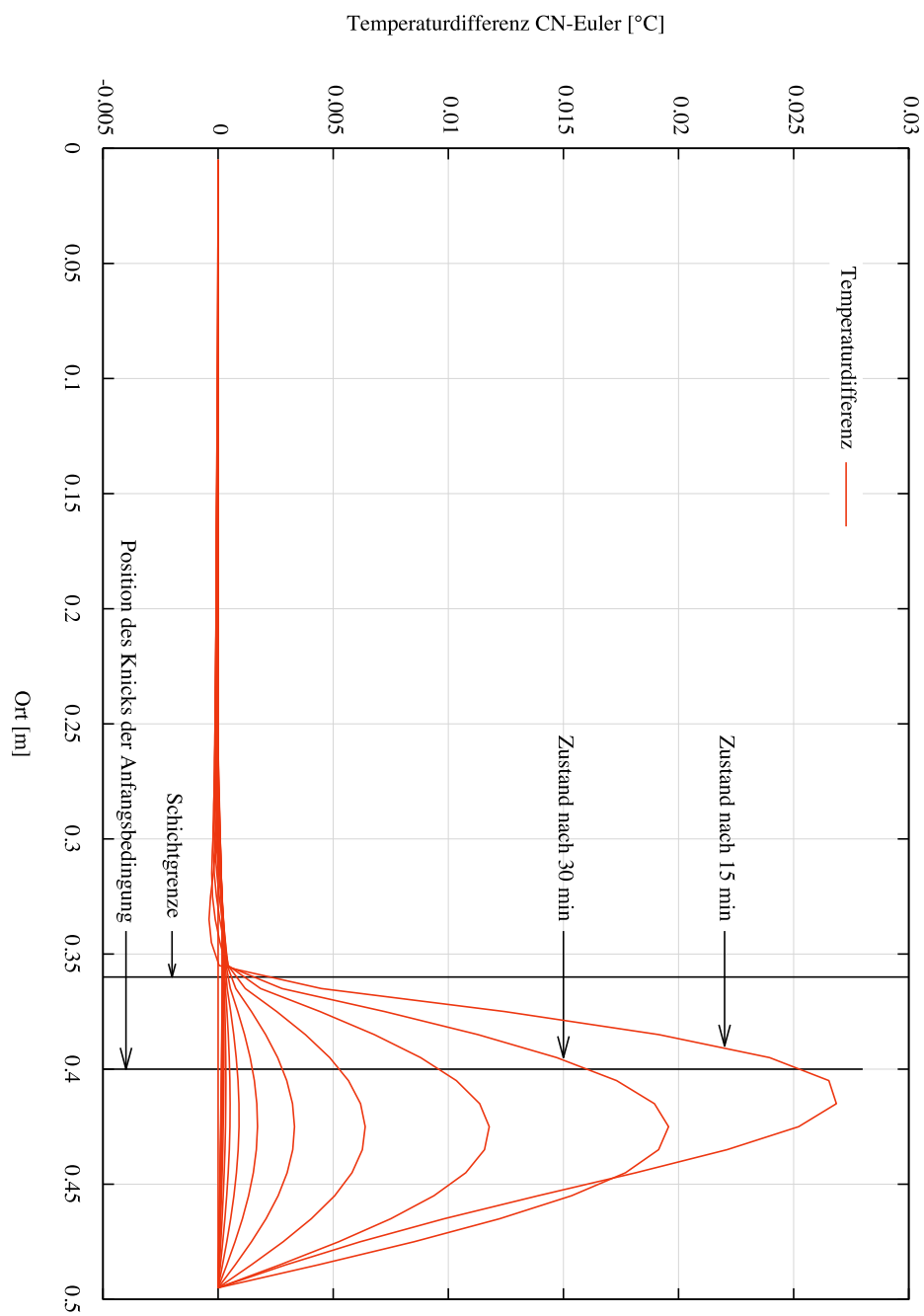


Abbildung 3.5: Unterschied zwischen CN-Verfahren und Euler-Verfahren

wobei hier das CN-Verfahren zu bevorzugen ist, da es bei der zeitlichen Entwicklung der Lösung von 2. Ordnung ist - das explizite Euler-Verfahren hingegen von 1. Ordnung.

3.3.2 Simulation mit Fourier'scher Differentialgleichung

In den nun folgenden Simulationen soll nun auch noch die Methode der Diskretisierung der Fourier'schen Differentialgleichung betrachtet werden.

Es wird ein 2-Schichtensystem mit konstantem ρ und c , aber verschiedenem λ in den Teilbereichen, betrachtet. Für ρ und c werden die Werte für den Ziegel verwendet, für λ einerseits der Wert für den Ziegel und andererseits der für die Dämmschicht EPS (Bedingungen für die Fourier'sche Differentialgleichung). Die Dicken der einzelnen Teilbereiche sind 36 cm und 14 cm.

Die Anfangsbedingung ist wieder eine stückweise lineare Funktion mit Knick an der Stelle $x = 0.40$ m.

Anhand der Simulationen soll die Lösung der Fourier'schen DGL mit explizitem Euler-Verfahren und der Lösung der Wärmeleitungsgleichung mit der Methode der Hilfselemente und dem CN-Verfahren beurteilt werden.

Wie bereits erwähnt wird nun $\rho = 1800 \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$ und $c = 1000 \left[\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \right]$ gesetzt. Für $\lambda(x)$ wird $\lambda_1 = 0.7 \left[\frac{\text{W}}{\text{mK}} \right]$ und $\lambda_2 = 0.04 \left[\frac{\text{W}}{\text{mK}} \right]$ fixiert. Über den Parameter γ , welcher die Breite des Abfalls der Fermi-Funktion steuert, kann noch verfügt werden. Zudem wird wieder die gleiche Abbruchbedingung wie in den vorherigen Simulationen verwendet.

Die folgende Tabelle fasst die verwendeten Parameter zusammen

Tabelle 3.2: Parameter zu Abbildung 3.6

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	Δt_{plot} [h]	t_{stat} [h]	γ [m]
Hilfselemente (CN)	0.01	30	7	1271.5	-
Fourier'sche DGL	0.01	30	7	1255	0.01

Interpretation

Im unteren Bild der Abbildung 3.6 ist deutlich zu erkennen, dass zwischen den Ergebnissen der beiden Methoden starke Unterschiede vorherrschen. Diese Abweichungen können jedoch einfach erklärt werden – eigentlich wurden zwei verschiedene physikalische Situationen für die Methoden verwendet. Bei den Hilfselementen

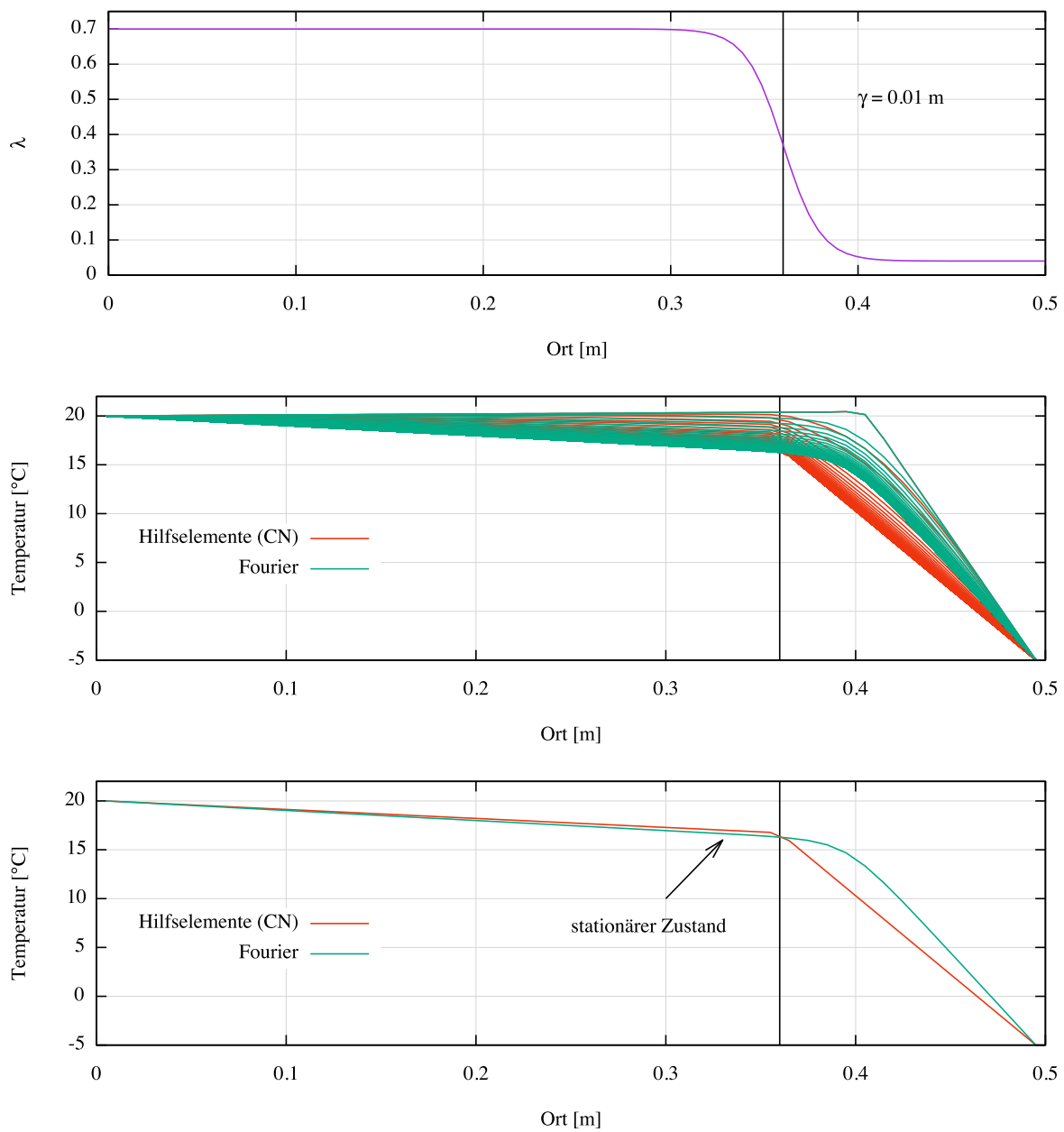


Abbildung 3.6: Diskretisierung der Fourier'schen DGL bzw. Lösung der Wärmeleitungsgleichung mit Methode der Hilfselementen

wurde eine 'scharfe' Grenzfläche für λ_1 und λ_2 gewählt (Stufenfunktion), für die Fourier'sche DGL hingegen eine 'verschmierte' Grenze.

Hier sieht man schon das erste kleinere Problem der direkten Methode für die Fourier'sche Differentialgleichung, da es nicht möglich sein wird, eine exakte Stufenfunktion für $\lambda(x)$ zu implementieren (dafür müsste der Parameter $\gamma = 0$ sein). Eine Möglichkeit besteht darin γ immer kleiner zu wählen (natürlich gibt es hier eine Grenze). Oder man probiert verschiedene Fermi-Breiten aus und wählt die Ortsauflösung so fein, dass die Stützpunkte im Bereich des Übergangs hinreichend dicht liegen. Wenn der Übergangsbereich schmaler ist als die Ortsauflösung bei der Methode der Hilfselemente, sollte dann auf den Stützpunkten der letzteren bei beiden Methoden dasselbe herauskommen (ausgenommen innerhalb des Übergangsbereichs).

Bei der folgenden Simulation wird nun der Parameter γ kleiner gewählt, um eine bessere Ähnlichkeit der Fermi-Funktion mit der Stufenfunktion zu erreichen. Es wird die Fermi-Breite auf $\gamma = 0.001$ m gesetzt und die räumliche Diskretisierung systematisch variiert. Dabei wird die Diskretisierungsbreite Δx so gewählt, dass die Stützpunkte im Bereich des Abfalls der Fermi-Funktion hinreichend dicht liegen.

Die folgende Tabelle zeigt die wichtigsten Parameter der Simulationsreihe

Tabelle 3.3: Parameter zu Abbildung 3.7

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	Δt_{plot} [h]	$t_{\text{stat.}}$ [h]	γ [m]	t_{CPU} [s]
Hilfselemente (CN)	0.00025	0.25	7	1083.5	-	1004
Hilfselemente (CN)	0.0005	1	7	1153.5	-	131.5
Hilfselemente (CN)	0.001	10	7	1258.5	-	11.9
Fourier'sche DGL	0.00025	0.05 ($\Delta t_{\text{max}}=0.08$)	7	1039	0.001	18925.5
Fourier'sche DGL	0.0005	0.25 ($\Delta t_{\text{max}}=0.32$)	7	1109.5	0.001	1182.1
Fourier'sche DGL	0.001	1 ($\Delta t_{\text{max}}=1.28$)	7	1149.5	0.001	169.9

In Tabelle 3.3 wurde ein neuer Parameter t_{CPU} zur Charakterisierung der Performance eingeführt. Dieser beschreibt die Rechenzeit für den Simulationsprozess, in Abhängigkeit der gewählten Parameter. Allerdings gilt zu beachten, dass diese Größe systemabhängig ist. Dabei wurde das Betriebssystem OS X Version 10.11.4, die Architektur 2.3GHz Intel Core i7 und ein Arbeitsspeicher 16GB 1600MHz DDR3 benutzt.

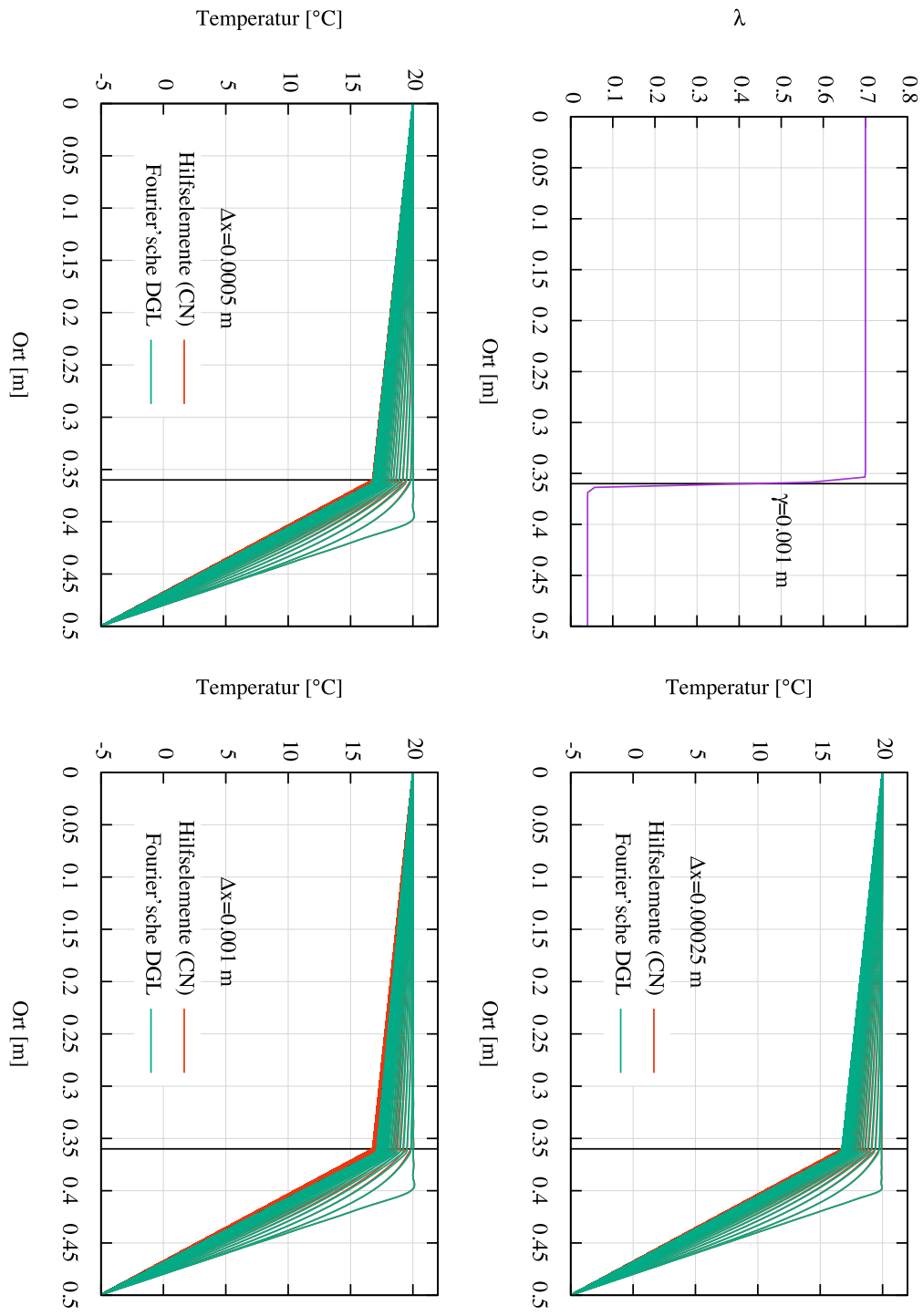


Abbildung 3.7: Simulation Fourier'sche DGL, variables Δx , $\gamma = 0.001$ m

Um die einzelnen Kurven besser betrachten zu können, wird in Abbildung 3.8 der Bereich der Grenzfläche der Materialien vergrößert und $t_{\text{plot}} = 10 \text{ h}$ gesetzt. Die gestrichelte Linie stellt dabei den Bereich des Abfalls der Fermi-Funktion dar.

Interpretation

Die Funktion $\lambda(x)$ stellt in der vorliegenden Simulationsreihe eine gute Näherung der Stufenfunktion dar (siehe linkes oberes Bild).

Die Verkleinerung des Parameters γ hat jedoch zur Folge, dass auch die Diskretisierungsweite Δx verringert werden muss. Erinnt man sich an die Stabilitätsanalyse der Fourier'schen DGL zurück, so muss bei Verringerung des Ortschaftes, zwangsläufig auch der Zeitschritt Δt verkleinert werden, damit das Verfahren numerisch stabil bleibt. Dieses Verhalten verschlechtert die Performance des Simulationsprogrammes drastisch, da bei Halbierung des Ortschaftes der maximale Zeitschritt auf ein Viertel abfällt, wodurch die Rechenzeit deutlich steigt.

Dementsprechend sind starke Unterschiede bei t_{CPU} zu erkennen, wobei die Methode mit Hilfselementen (CN) deutlich besser abschneidet als die direkte Methode (Diskretisierung der Fourier'schen DGL). Die einzelnen Rechenzeiten t_{CPU} sind bei der Fourier'schen DGL bei gleicher Diskretisierungsweite Δx mindestens um den Faktor 10 größer als bei der Methode mit Hilfselementen. Bei der Fourier'schen DGL wurde der zeitliche Diskretisierungsschritt Δt möglichst 'groß' gewählt, unter Berücksichtigung der Stabilitätsbedingung (Δt_{max}), um nicht unnötig lange Rechenzeiten zu erzeugen.

Bei dieser Simulationsreihe zeigen sowohl die Methode mit Hilfselementen und die Diskretisierung der Fourier'schen DGL ähnliche Ergebnisse bei allen drei Diskretisierungsweiten. Erwartungsgemäß stimmen dennoch die Ergebnisse bei $\Delta x = 0.00025 \text{ m}$ am besten überein.

Man sieht, dass bei hinreichend kleiner Wahl von Δx und Δt die Ergebnisse der direkten Methode, sowohl die zeitliche Entwicklung der Lösung bis hin zum stationären Zustand, in die Ergebnisse der Methode mit Hilfselementen übergehen (ausgenommen Bereich des Abfalls der Fermi-Funktion).

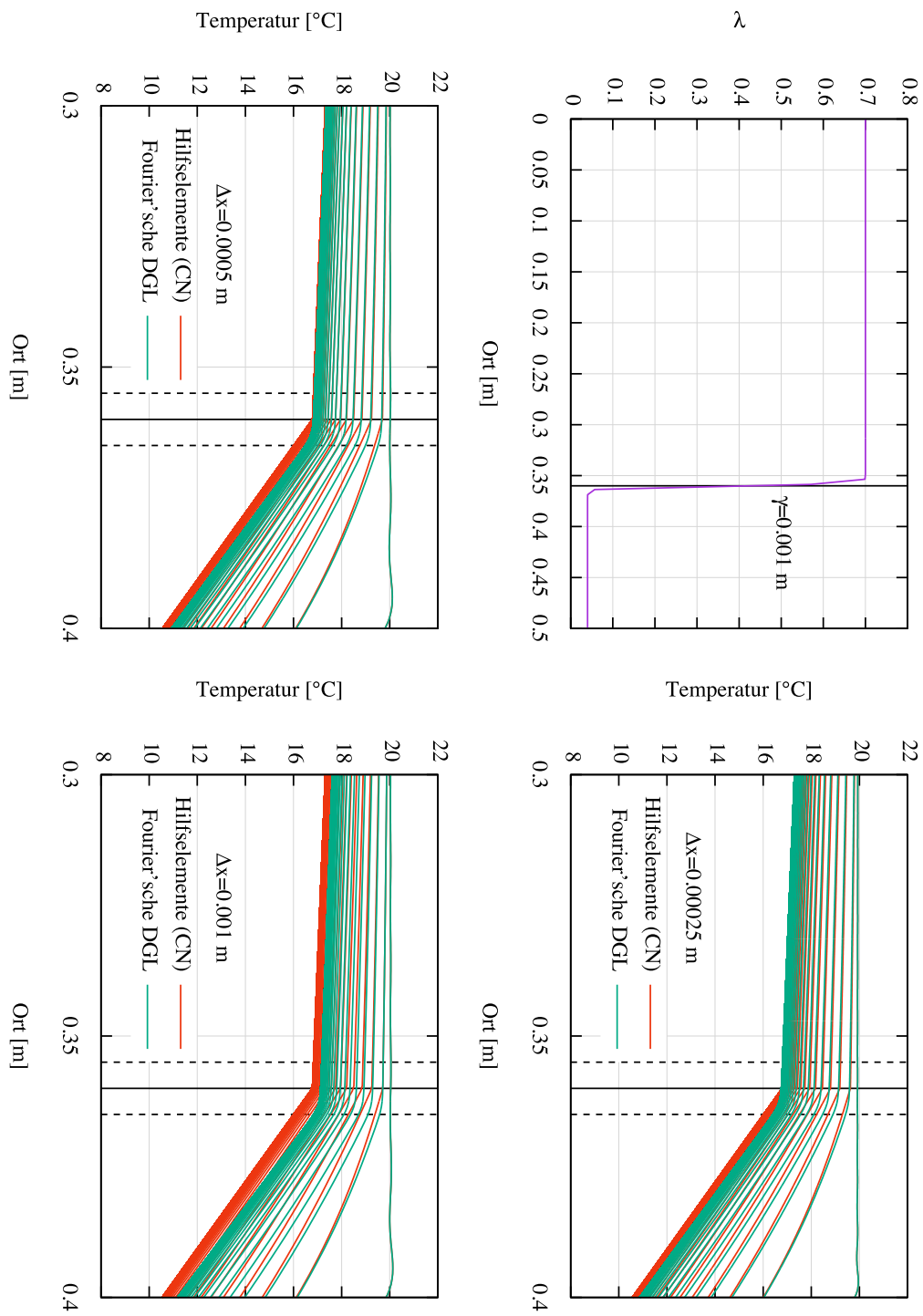


Abbildung 3.8: Simulation der Fourier'schen DGL, variables Δx , $\gamma = 0.001$ m, vergrößerter Bereich der Grenzfläche

3.4 Gegenüberstellung

An dieser Stelle sollen kurz die Unterschiede beziehungsweise Vor- und Nachteile der verschiedenen Methoden zusammengefasst werden.

Für die Methode mit Hilfselementen (CN) gilt:

- variable Wärmekapazität λ , Dichte ρ und Wärmekapazität c möglich
- die Funktion des Diffusionskoeffizienten stellt eine exakte Stufenfunktion dar
- algebraische Kopplung an der Schichtgrenze durch physikalische Koppelbedingungen
- gleiches Verhalten wie bei konstantem Diffusionskoeffizienten (Stabilität, Fehler)

Für die direkte Methode (Diskretisierung der Fourier'schen Differentialgleichung) gilt:

- variable Wärmekapazität λ möglich, jedoch konstante Dichte ρ und Wärmekapazität c
- die Funktion des Diffusionskoeffizienten kann nur näherungsweise eine Stufenfunktion darstellen
- je nach Wahl des Parameters γ ergibt sich ein sinnvolles Δx und daraus ein Δt
- durch die Abhängigkeit von Δt vom Parameter γ , folgt ein deutlich höherer Rechenaufwand bei Annäherung an eine Stufenfunktion

Die Verwendung der Methode mit Hilfselementen (CN) ist deutlich ökonomischer als die Diskretisierung der Fourier'schen DGL. Zudem können beliebig viele Schichten, mit unterschiedlichen λ , ρ und c , gekoppelt werden. Dies erlaubt Simulationen, hinsichtlich Wärme- und Feuchteströme, durch einen beliebigen Mauerwerksaufbau.

Die direkte Methode erlaubt zwar eine beliebige Funktion für $\lambda(x)$ (im Vgl. Methode der Hilfselemente: nur Stufenfunktion), jedoch kann kein beliebiger Wandaufbau simuliert werden, da die Dichte ρ und Wärmekapazität c konstant sein müssen.

4 Anwendung

In diesem Kapitel wird nun versucht, praxisorientierte Simulationen bauphysikalisch relevanter Größen (gekoppelte Temperatur- und Wasserdampfströme sowie Kondensatbildung) durchzuführen. Dabei werden zwei unterschiedliche Situationen betrachtet - konstante Randbedingungen und zeitabhängige Randbedingungen. Bei den konstanten Randbedingungen ist es sinnvoll, sich auf Temperatur- und Luftfeuchtheitswerte in der Winterperiode zu beschränken, da in der Sommerperiode, bedingt durch die durchschnittlich wärmere Temperatur, kein bzw. kaum Kondensatwasser anfallen wird.

Um nun sinnvolle durchschnittliche Temperatur- und Feuchtheitsrandwerte⁷ zu verwenden, werden folgende konservative⁸ Näherungen angenommen:

- Innenbereich: 20°C und 50% r.F. (r.F. $\equiv$ relative Luftfeuchtigkeit)
- Außenbereich: -5°C und 80% r.F.

(Die relative Luftfeuchtigkeit stellt das Verhältnis von der tatsächlichen Wasserdampfkonzentration c_w in der Luft zur maximal möglichen Wasserdampfkonzentration c_s bei einer bestimmten Temperatur T dar.) Diese Annahmen stellen ungünstige klimatische Verhältnisse dar und sollen so einem 'worst-case'-Szenario Rechnung tragen.

Für die Simulationen bei zeitlich veränderlichen äußeren Randbedingungen wird zusätzlich auf selbstgemessene Werte zurückgegriffen.

4.1 physikalisch-mathematischer Hintergrund

Das CN-Verfahren mit Hilfselementen lässt sich auch für Feuchteströme (Wasserdampfströme) anwenden, da sowohl Wärme- als auch Konzentrationsströme mit der gleichen Differentialgleichung beschrieben werden können. Das heißt, die relevanten Größen mit denen sich dieses Kapitel beschäftigt sind die Temperatur T und die Wasserdampfkonzentration c_w .

Wie auch in den vorherigen Kapiteln und Simulationen werden die Wärmeleitfähigkeit λ , die Dichte ρ und die Wärmekapazität c als temperaturunabhängig angenommen. Der Diffusionskoeffizient D_w , welcher die Wasserdampfkonzentrationsverteilung steuert, wird jedoch als temperaturabhängig angenommen.

⁷Quelle: [17]

⁸Eine auf Sicherheit bedachte Hypothese, basierend auf Erfahrungen oder Intuitionen [15]

Bei der Beschreibung von Feuchteströmen wird nur jener Teil berücksichtigt, welcher in Form von Wasserdampf durch ein Material diffundiert. Dies stellt aber zugleich auch den wichtigen Hauptanteil dar. Jener Teil, welcher in flüssiger Form ein Material durchwandert, wird vernachlässigt, da es mitunter zu monatelangen Transportvorgängen kommen kann, bis sich ein stationärer Zustand einstellt.

4.1.1 Diffusionskoeffizient

Grundsätzlich beeinflussen einander Wärme- und Feuchteströme gegenseitig, man spricht von gekoppelten Strömen. Die Art und Weise wie Feuchtigkeit den Wärmetransport (also die Wärmeleitfähigkeit λ) ändert, kann nur empirisch festgestellt werden. Zudem müsste der funktionale Zusammenhang noch an das jeweilige Material angepasst werden. Daher wird hier vereinfachend angenommen, dass die Wärmeleitfähigkeit λ überhaupt nicht von der Wasserdampfkonzentration c_w abhängt.

Was die Temperaturabhängigkeit des Wasserdampfdiffusionskoeffizienten D_w betrifft, liegt der Fall einfacher. Die folgende Formel aus DIN 52 615 'Bestimmung der Wasserdampfdurchlässigkeit von Bau- und Dämmstoffen' ist zwar ebenso empirisch und stellt zunächst nur den Wasserdampfdiffusionskoeffizienten $D_{w,L}$ in Luft dar

$$D_{w,L} = 0.083 \cdot \frac{p_0}{p} \left(\frac{T}{273.15} \right)^{1.81} \quad [\text{m}^2/\text{h}] \quad (4.1)$$

wobei T in Kelvin ausgedrückt wird.

Der Faktor p_0/p kann auf 1 gesetzt werden, da im gegenständlichen Fall der Druck p gleich dem Normaldruck p_0 ist.

Da wir jedoch unsere Betrachtungen der Wasserdampfdiffusion auf ein beliebiges Material ausweiten möchten, muss aus $D_{w,L}$ ein dementsprechender Wasserdampfdiffusionskoeffizient D_w konstruiert werden.

Dazu behilft man sich mit dem Wasserdampfdiffusionswiderstand μ , welcher ausdrückt, um wieviel die Diffusion in einem jeweiligen Material, im Vergleich zu Luft, reduziert ist. Der Wasserdampfdiffusionswiderstand μ ist dimensionslos.

$$D_w = \frac{D_{w,L}}{\mu} \quad (4.2)$$

Die folgende Tabelle gibt eine kurze Auflistung wichtiger μ -Werte. Der dabei verwendete Ausdruck 'trocken' bezieht sich auf eine Umgebungstemperatur von 23°C und eine relative Luftfeuchtigkeit von 50%. Unter 'feucht' versteht man eine Umgebungstemperatur von 23°C und eine relative Luftfeuchtigkeit von 80%.

Tabelle 4.1: Wasserdampfdiffusionswiderstände μ [11]

Material	μ -Wert (trocken)	μ -Wert (feucht)
Luft	1	1
Beton	100	60
Polystyrol (EPS)	60	60
Vollziegel	16	10
Putzmörtel	20	10

4.1.2 Sättigungsdampfdruck

Unter Sättigungsdampfdruck⁹ p_s versteht man jenen Druck, welcher sich über einem flüssigen oder festen Reinstoff in einer sonst leeren Kammer bei gegebener Temperatur einstellt. Dabei befinden sich die gasförmige Phase und die flüssige/feste Phase gänzlich im Gleichgewicht. Das heißt Verdunstungs- bzw. Sublimationsrate ist gleich der Kondensations- bzw. Resublimationsrate.

Diese Definition impliziert, dass durch Erhöhung der Temperatur eine erhöhte Wasserdampfkonzentration in der Luft zu finden sein wird und dadurch der Sättigungsdampfdruck steigt.

Physikalisch kann dies durch die Boltzmann-verteilte kinetische Energie der Wasserdampfmoleküle erklärt werden. Um vom flüssigen in den gasförmigen Zustand überzugehen, müssen sowohl die inneren Anziehungskräfte als auch die Oberflächenspannung überwunden werden. Da mit zunehmender Temperatur die mittlere kinetische Energie steigt, können mehr Moleküle den flüssigen Verbund verlassen und in den gasförmigen übergehen.

Diese Tatsache legt folgende Beziehung nahe

$$p_s \propto \exp\left(\frac{E_D}{k_B T}\right)$$

mit $E_D \dots$ Verdampfungsenergie eines Moleküls oder Atoms

Beschränkt man sich auf den Sättigungsdampfdruck von Wasserdampf in Luft, kann dies zwischen -45°C und $+60^\circ\text{C}$ mit der Magnus-Formel [9] wiedergegeben werden

$$p_s = k_1 \exp\left(\frac{k_2 T}{k_3 + T}\right) \quad [\text{hPa}] \quad (4.3)$$

⁹Quelle: [9], [10]

wobei T in $^{\circ}\text{C}$ ausgedrückt wird.

Je nach Temperatur T gelten für k_1, k_2 und k_3 die folgenden Werte

$$T \leq 0 \rightarrow \begin{cases} k_1 = 6.112 \text{ hPa} \\ k_2 = 22.46 \\ k_3 = 272.62 \text{ }^{\circ}\text{C} \end{cases} \quad T > 0 \rightarrow \begin{cases} k_1 = 6.112 \text{ hPa} \\ k_2 = 17.62 \\ k_3 = 243.12 \text{ }^{\circ}\text{C} \end{cases}$$

Der Grund, warum an dieser Stelle lediglich immer von Dampfdrücken und nicht von Konzentrationen gesprochen wird, besteht darin, dass gerade in der Bauphysik sich dies als Konvention eingebürgert hat.

Dies stellt aber kein Hindernis dar, da die Konzentration durch die ideale Gasgleichung [12] bestimmt werden kann

$$c_s[\text{kg}/\text{m}^3] = \frac{p_s[\text{Pa}]}{T[\text{K}] \cdot R_w[\text{J}/\text{kgK}]} \quad (4.4)$$

Hierbei entspricht c_s der Sättigungskonzentration und $R_w = 461.52 \text{ J}/(\text{kgK})$ der speziellen Gaskonstante von Wasser. Die spezielle Gaskonstante R_w entspricht einfach der allgemeinen Gaskonstante R geteilt durch die molare Masse von Wasserdampf.

4.1.3 Taupunkt und Kondensation

Stellt man sich ein Gemisch aus Luft und Wasserdampf vor, so entspricht der Taupunkt jener Temperatur, welche bei unverändertem Druck unterschritten werden muss, damit sich daraus Wasser in flüssiger Form abscheiden (kondensieren) kann.

Diese Temperatur stellt somit jenen Punkt dar, an dem beide Phasen (flüssig und gasförmig) gleichzeitig existieren. Das heißt, es besteht ein Gleichgewicht aus Kondensationsrate und Verdunstungsrate.

Am Taupunkt entspricht der Wasserdampfpartialdruck somit dem Sättigungsdampfdruck (bzw. Sättigungskonzentration).

Jeder derartige Gleichgewichtszustand entspricht einem Punkt im Phasendiagramm (p - T -Diagramm), wodurch die Taupunktkurve als Phasengrenzlinie gegeben ist.

Da Luft als nicht kondensierbarer Anteil den 'Dampf' nicht beeinflusst, hängt das gesamte Verhalten vom Wasserdampfpartialdruck ab.

Ist der Taupunkt erreicht, entspricht dies einer relativen Luftfeuchtigkeit $\varphi = 1$. Nimmt man vereinfachend an, dass es sich um ein ideales Gas handelt, so gilt der Ausdruck

$$\varphi = \frac{p}{p_s} = \frac{c_w}{c_s} \quad (4.5)$$

4.2 Umsetzung

Bevor mit den eigentlichen Simulationen begonnen werden kann, sollen an dieser Stelle noch kurz die wichtigsten Prozessschritte, die während der Simulation ablaufen, erläutert werden.

Bei den folgenden Simulationen werden immer zwei Differentialgleichungen parallel integriert (Methode der Hilfselemente + CN): die Wärmeleitungsgleichung für die Temperaturverteilung und die Diffusionsgleichung für die Wasserdampfkonzentrationen. Die beiden Gleichungen sind nur insofern gekoppelt, als die letztere (über $D_w(x, t)$) von der ersteren abhängt. Es gibt also keine Rückwirkung der Wasserdampfkonzentrationen auf die Parameter der Wärmeleitungsgleichung (bzw. wird das vernachlässigt).

Im Grunde könnte man somit zuerst die Wärmeleitungsgleichung für alle Zeiten lösen und mit der kompletten zeit- und ortsabhängigen Temperaturverteilung danach die Gleichung für die Wasserdampfkonzentrationen integrieren (wird aus speichertechnischen Gründen nicht umgesetzt).

Daraus folgt für das Simulationsprogramm, dass im ersten Schritt, ausgehend vom jeweiligen Anfangszustand $T(x, t_0)$, die Temperaturverteilung $T(x, t_0 + \Delta t)$ berechnet wird. Diese Temperaturdaten stellen somit die Eingangsdaten für den Wasserdampfdiffusionskoeffizienten dar.

Für jeden Zeitpunkt t_n wird diese Prozedur in analoger Weise durchgeführt und jeweils $T(x, t_0 + n\Delta t)$ berechnet, wodurch sich $D_w(t = t_n) = D_w^{(n)}$ ergibt.

Man sieht, dass die Berechnung der Dampfdruckverteilung, der Temperaturberechnung immer einen Zeitschritt Δt hinterher hinkt. Desweiteren stellt sich die Frage, wie die zeitlich veränderlichen Randbedingungen $RB(t)$ implementiert beziehungsweise dargestellt werden.

In den folgenden Simulationen wird der stationäre Zustand (welcher sich bei konstanten Randbedingungen ergibt) als Anfangsbedingung für die Simulationen bei zeitlich veränderlichen (zeitlich periodischen) Dirichlet-Randbedingungen verwendet. Aber auch in diesem Fall (zeitlich veränderliche Randbedingung) ist die Anfangsbedingung – wie auch bei konstanten Randbedingungen – irrelevant, da man auch hier warten muss, bis sich das System eingeschwungen hat.

Das heißt, man könnte auch mit der Knick-Anfangsbedingung (wie bei konstanten Randbedingungen) starten.

Zum besseren Verständnis soll eine schematische Darstellung (Abb. 4.1) des Simulationsprozesses Abhilfe leisten.

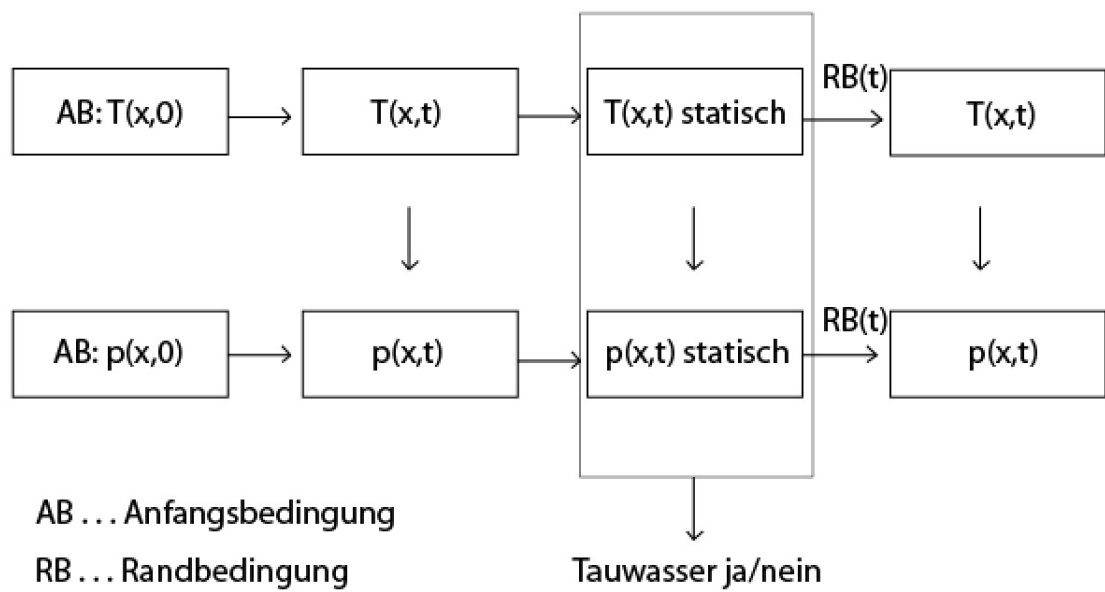


Abbildung 4.1: schematische Darstellung der Integration der parallelen Differentialgleichungen für Temperatur- und Dampfdruckverteilung

4.3 Simulationen

4.3.1 Zeitlich veränderliche Randbedingungen

Diese erste Simulationsreihe beschäftigt sich mit dem Verhalten der Lösung bei zeitlich veränderlichen äußeren Randbedingungen. Vorerst wird nur die Wärmeleitungsgleichung betrachtet (in späterer Folge dann auch noch die zeitabhängige Dampfdruckverteilung $p(x, t)$). Dabei sollen, ausgehend von einem stationären Zustand, die wichtigsten Eigenschaften des Temperaturverhaltens erkannt und erklärt werden.

Wie bereits erwähnt, wird bei den folgenden Simulationen die Methode mit Hilfselementen (mit CN) verwendet.

Tabelle 4.2 zeigt die verwendeten Parameter

Tabelle 4.2: Parameter zu Abbildung 4.2

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	Δt_{plot} [h]	$t_{\text{stat.}}$ [h]	t_{CPU} [s]
Methode der Hilfselemente (CN)	0.01	30	4	843	0.51

Die Diskretisierungsweiten Δx und Δt haben sich bereits bewährt und werden künftig als Standardeinstellung verwendet.

Begonnen wird mit einem 2-schichtigen Mauerwerksaufbau, bestehend aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS. Die verwendete Anfangsbedingung (stückweise lineare Funktion) ist dabei nicht weiter relevant, da wir lediglich am stationären Zustand interessiert sind, welcher dann als 'neue' Anfangsbedingung dienen soll.

Der letzte berechnete Zustand $t_{\text{stat}} = 843 \text{ h}$ (siehe obige Tabelle) gibt uns die 'neue' Anfangsbedingung für das zu Grunde liegende System an.

Die Randbedingungen sind 20°C im Innenraum und -5°C außen zum Erreichen des stationären Zustands. Danach werden reale Messdaten an der Außenseite verwendet, die sich dann über einen Tag erstrecken und bei -5°C beginnen.

Bei den realen Messdaten [19] wurden die Oberflächentemperaturen einer nach Süden gerichteten Wand, welche einen ähnlichen Aufbau wie unser Simulationsmauerwerk hatte, gemessen. Diese Daten stammen aus einer laboratorischen Übung an der HTL Baden (Kolleg für Bautechnik). Dabei wurden AREXX- Temperaturfühler für einen Messbereich von $-55^\circ\text{C} \leq T \leq 125^\circ\text{C}$ samt Datenlogger benutzt.

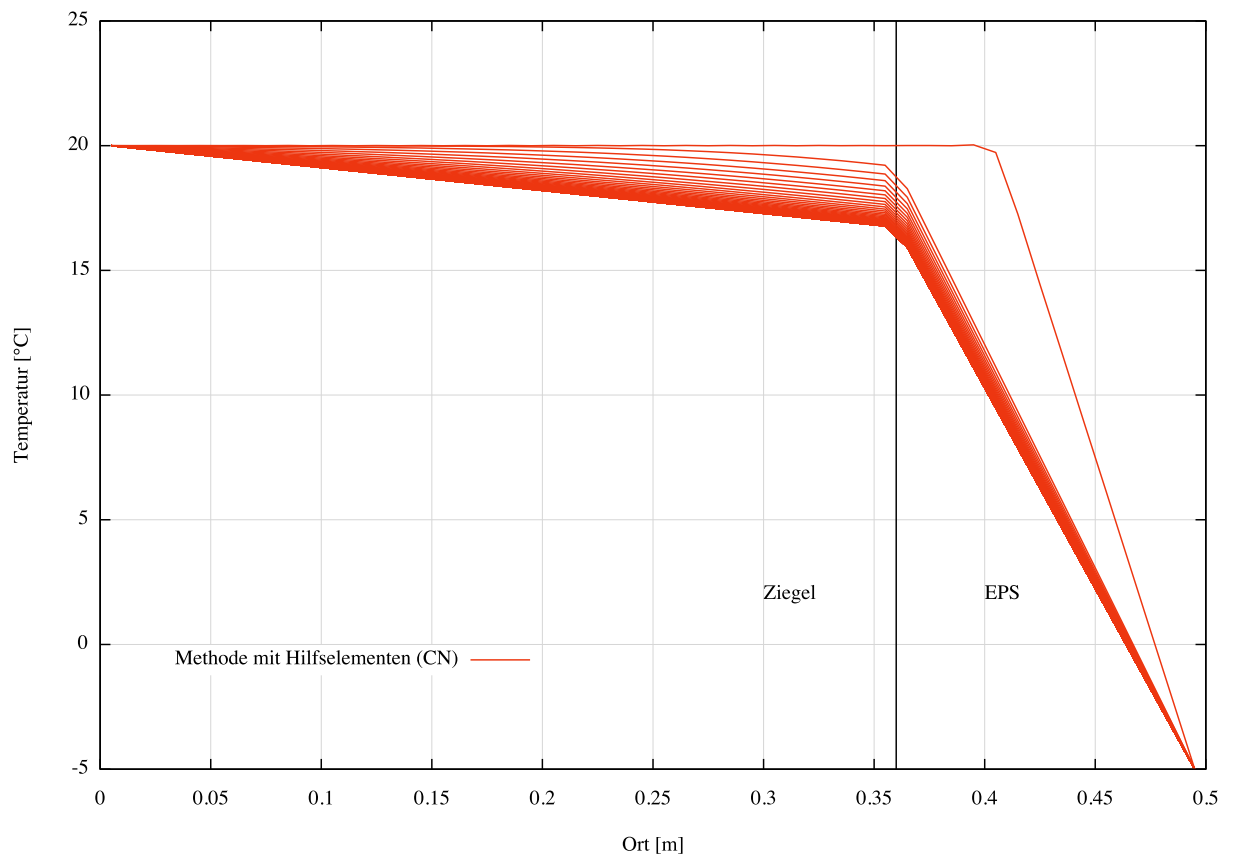


Abbildung 4.2: Temperaturverlauf in 2-schichtigem Mauerwerksaufbau: 36 cm Ziegel, 14 cm EPS

Es wurden automatisierte minütliche Messungen vorgenommen (Fehlertoleranz: $\pm 1^\circ\text{C}$). Für die gemessenen Oberflächentemperaturen betrachte man Abb. 4.4 (rote Kurve).

Die Abbildung 4.2 zeigt lediglich das Ergebnis der Wärmeleitungsgleichung zum Erreichen des stationären Zustandes bei konstanten Randbedingungen. Folglich gehen hier noch keine realen Messdaten ein.

Die folgende Tabelle zeigt die wichtigsten Parameter der realen Messdaten

Tabelle 4.3: Parameter zu Abbildung 4.3

Beginn	Ende	Messinterv. [s]	Anz. Werte	T_{min} [°C]	T_{max} [°C]
3.2.2015, 6 ⁰⁰	4.2.2015, ca. 10 ⁰⁰	60	1672	-7.5	18.0

In Abb. 4.3 wurde der Anfangszustand als schwarze Kurve dargestellt. Allgemein erweist sich eine übersichtliche Darstellung als schwierig, da die zeitlich veränderlichen Randbedingungen starken Schwankungen unterworfen sind. Deswegen sind zur besseren Übersicht verschiedene Plotintervalle t_{plot} gewählt worden (1/4 h, 1/2 h, 1 h und 2 h).

In Abbildung 4.3 handelt es sich um simulierte Ergebnisse, und zwar wurden, ausgehend vom berechneten stationären Zustand (siehe Abb. 4.2), die gemessenen Oberflächentemperaturen benutzt, um die Wärmeleitungsgleichung etwa über einen Tag zu integrieren. Die einzelnen roten Kurven in Abb. 4.3 stellen den berechneten Temperaturverlauf im Mauerwerk zu verschiedenen Zeitpunkten dar.

Hier stellt sich die Frage wie realistisch die Ergebnisse zu deuten sind, denn das Mauerwerk würde ja immer verschieden auf die Außentemperaturen reagieren, je nachdem, ob es 'gestern' kalt oder warm war.

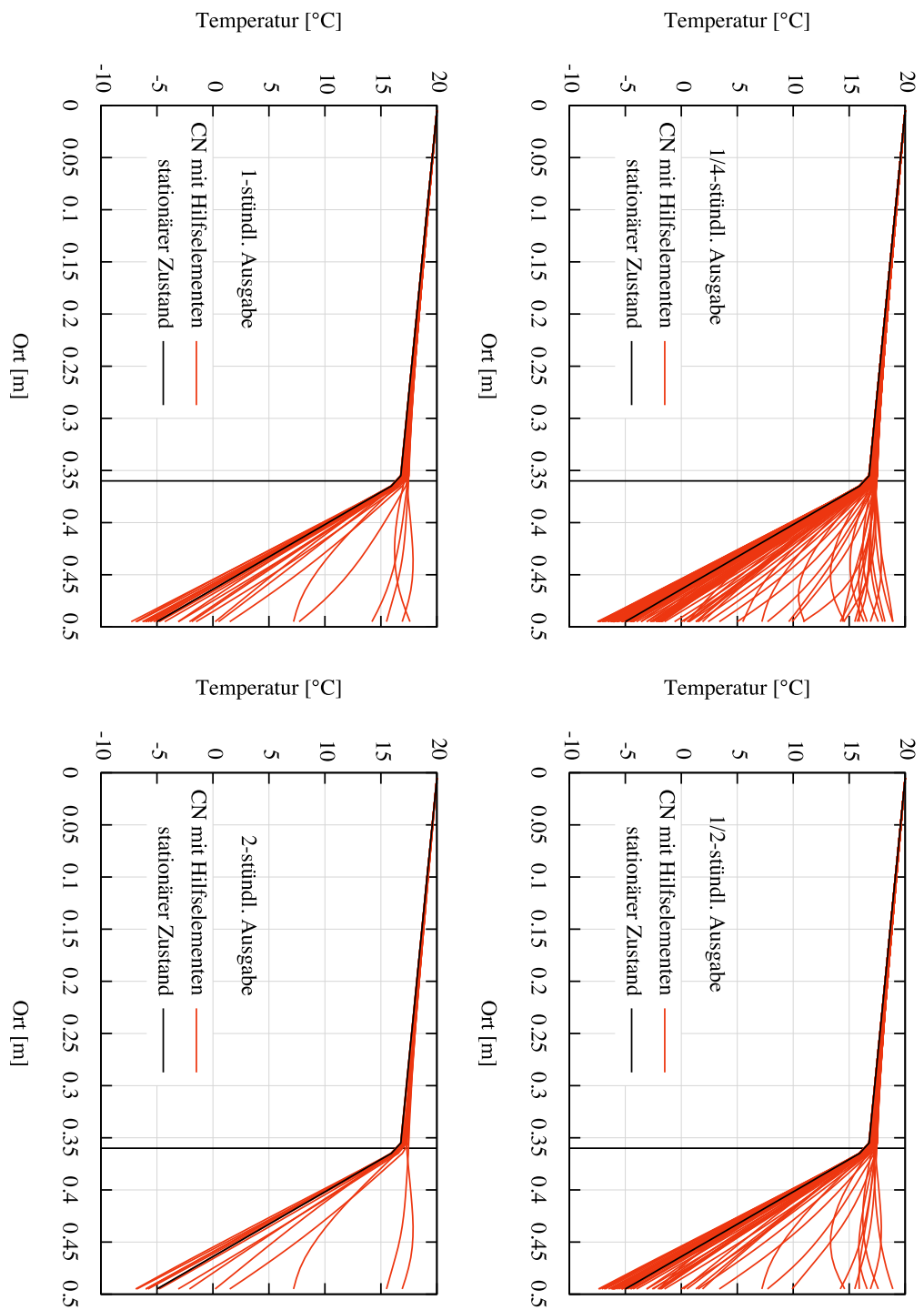


Abbildung 4.3: zeitlich veränderliche äußere Randbedingungen; Temperaturverlauf in 2-schichtigem Mauerwerk mit 36 cm Ziegel und 14 cm Außendämmung (EPS)

Zusätzlich wird durch Abbildung 4.4 noch das zeitliche Temperaturverhalten an bestimmten Positionen im Mauerwerk dargestellt. In dieser Abbildung entspricht die gelbe Kurve dem zeitlichen Temperaturverhalten im Ziegel an der Position $x = 0.355\text{ m}$ (also nahe der Grenzschicht). Die anderen (schwarz, grün und rot) Kurven beschreiben das zeitliche Verhalten im EPS (Außendämmung), wobei die rote Kurve die gemessenen äußeren Randbedingungen angibt. Wie man durch die beiden Abbildungen 4.3 und 4.4 sehr deutlich sehen kann, finden die gesamten Temperaturschwankungen nahezu ausschließlich in der äußeren EPS-Schicht statt. Im Ziegel herrscht nahezu eine konstante Temperaturverteilung vor (lediglich kleine Schwankungen $\pm 1^\circ\text{C}$). Der Ziegelanteil des Mauerwerks (mit seiner großen Wärmekapazität) wirkt hierbei als Puffer, welcher diesen erwünschten Effekt bringt.

Ebenso wird durch Abbildung 4.4 ersichtlich, dass das Temperaturverhalten an verschiedenen Punkten im EPS zwar gleich ist (bei verschiedener Amplitude), jedoch ein kleiner zeitlicher Phasenverschub (vernachlässigbar¹⁰ im Vgl. zu: siehe Innendämmung) auftritt. Dieser Effekt basiert auf der Wärmespeicherfähigkeit des jeweiligen Materials, wodurch es nicht instantan zu Temperaturänderungen im gesamten Mauerwerk kommt.

Um die Temperaturschwankungen sowohl im Ziegel als auch im EPS energetisch quantifizieren zu können, wird für jedes Material, separat, die enthaltene thermische Energie Q (bezogen auf 1 m^2 und die jeweilige Dicke) berechnet. Die thermische Energie Q ist näherungsweise proportional zur Temperatur T und Masse m . Daraus ergibt sich folgender Zusammenhang¹¹ $\Delta Q = mc\Delta T$ ($c \dots$ spezifische Wärmekapazität).

Die folgende Tabelle 4.4 stellt die Energiewerte in zeitlicher Abfolge dar – unter der Annahme $c = \text{const.}$ Diese Annahme sollte gerechtfertigt sein, da auch bei der Herleitung der Fourier’schen Differentialgleichung eine konstante Wärmekapazität c angenommen wurde.

An Hand der Energiewerte ist erkennbar, dass nicht zwangsläufig der Energiegehalt in beiden Materialien gleichzeitig steigen oder fallen muss. Offensichtlich ist auch ein energetischer Anstieg in einen und ein Abfall im anderen Material möglich. Erwartungsgemäß schwanken die Energiewerte im EPS deutlich mehr als im Ziegel.

¹⁰Je nach Mauerwerksaufbau bzw. Anordnung/Lage der jeweiligen Schichten tritt ein unterschiedlich ausgeprägter Phasenverschub auf

¹¹Quelle: [16]

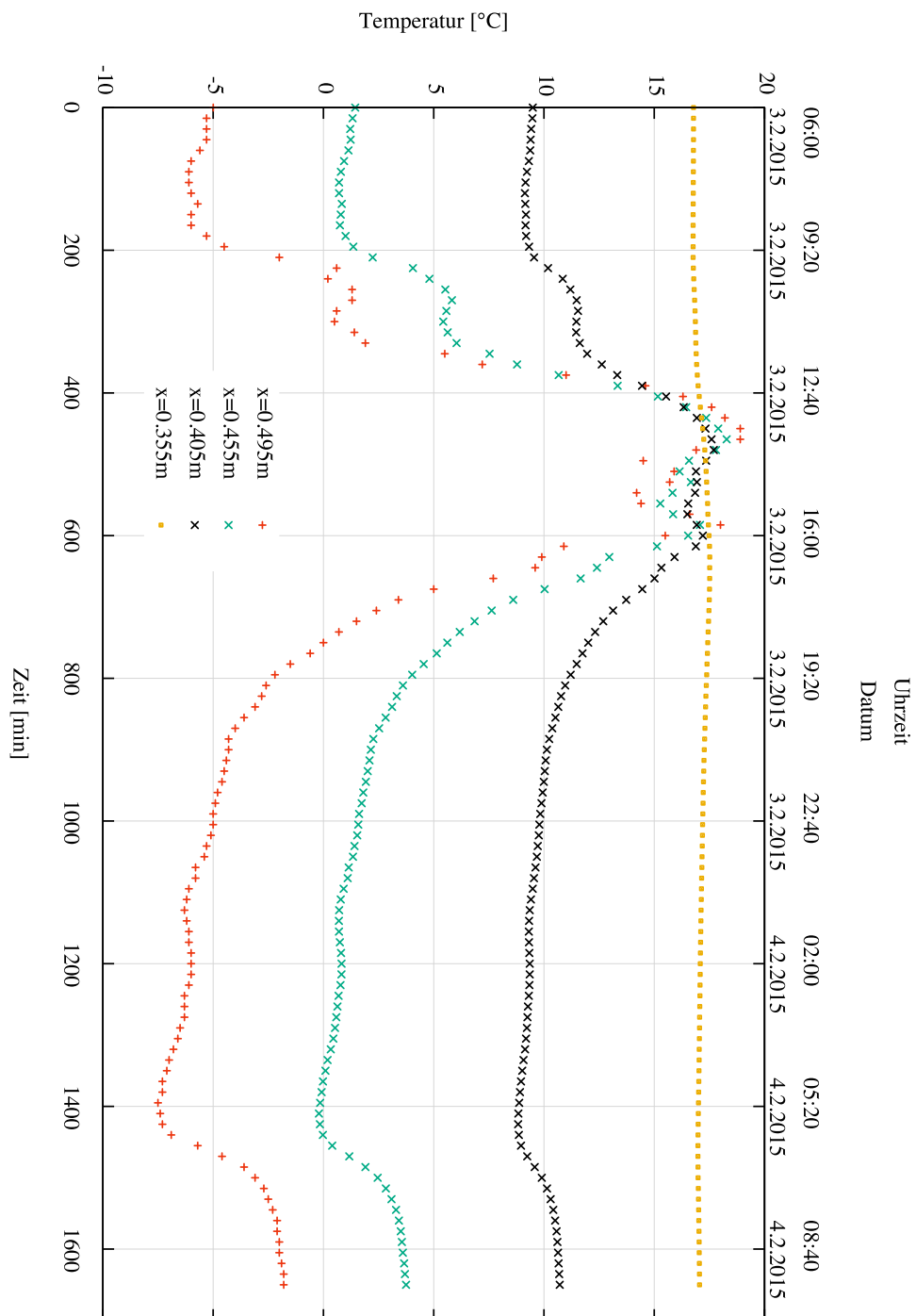


Abbildung 4.4: zeitliche Änderung der Temperatur an ausgewählten Stellen in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm Außendämmung (EPS)

Tabelle 4.4: Energiewerte bei einem System aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS (Außendämmung)

Zeit [h]	Energie Ziegel [J]	Energie EPS [J]	Änderung Ziegel	Änderung EPS
0	183670354.7	5971460.5		
4	183669982.7	5982059.5	−0.0002%	+0.1774%
8	183720011.6	6020027.0	+0.0272%	+0.6340%
12	183788487.1	5996043.4	+0.0372%	−0.3983%
16	183795785.4	5980342.2	+0.0039%	−0.2618%
20	183784640.6	5975619.3	−0.0060%	−0.0789%
24	183766722.3	5972657.1	−0.0097%	−0.0495%

Aus dem Temperaturverhalten des Mauerwerkaufbaus kann man folgern

- starke thermische Spannungen im EPS (expandiertes Polystyrol)
- und
- Funktion des Ziegels als Wärmespeicher

Desweiteren muss noch berücksichtigt werden, dass diese Simulationen nicht ganz realistisch sind, da die Anfangsbedingung (stationäre Lösung) nicht dem typischen Temperaturverlauf um 6⁰⁰ Uhr früh entspricht. Genau wegen der endlichen Wärmekapazität (insbesondere des Ziegels) hängt die Anfangsbedingung von der 'Vorgeschichte' ab. Deshalb wird auch später ein System mit zeitlich periodischen Randbedingungen simuliert und die Lösung nach vielen Perioden betrachtet (wenn das 'Einschwingverhalten' vorbei ist).

Mauerwerk mit Innendämmung

In dieser zweiten Versuchsreihe soll noch als Vergleich ein Mauerwerk mit innenliegender¹² Dämmung simuliert werden. Um einen 'faireren' Vergleich zu ermöglichen, bleiben die Schichtdicken jedoch in der gleichen Dimension wie bei der letzten Simulation. Die zeitabhängigen Randbedingungen entsprechen wieder jenen aus Tabelle 4.3. Hier wurde darauf verzichtet, das transiente Temperaturverhalten bis hin zum stationären Zustand darzustellen. Stattdessen wurde der

¹²Standardmäßig werden innen dünnere Dämmschichten verwendet, z.B. 6 cm.

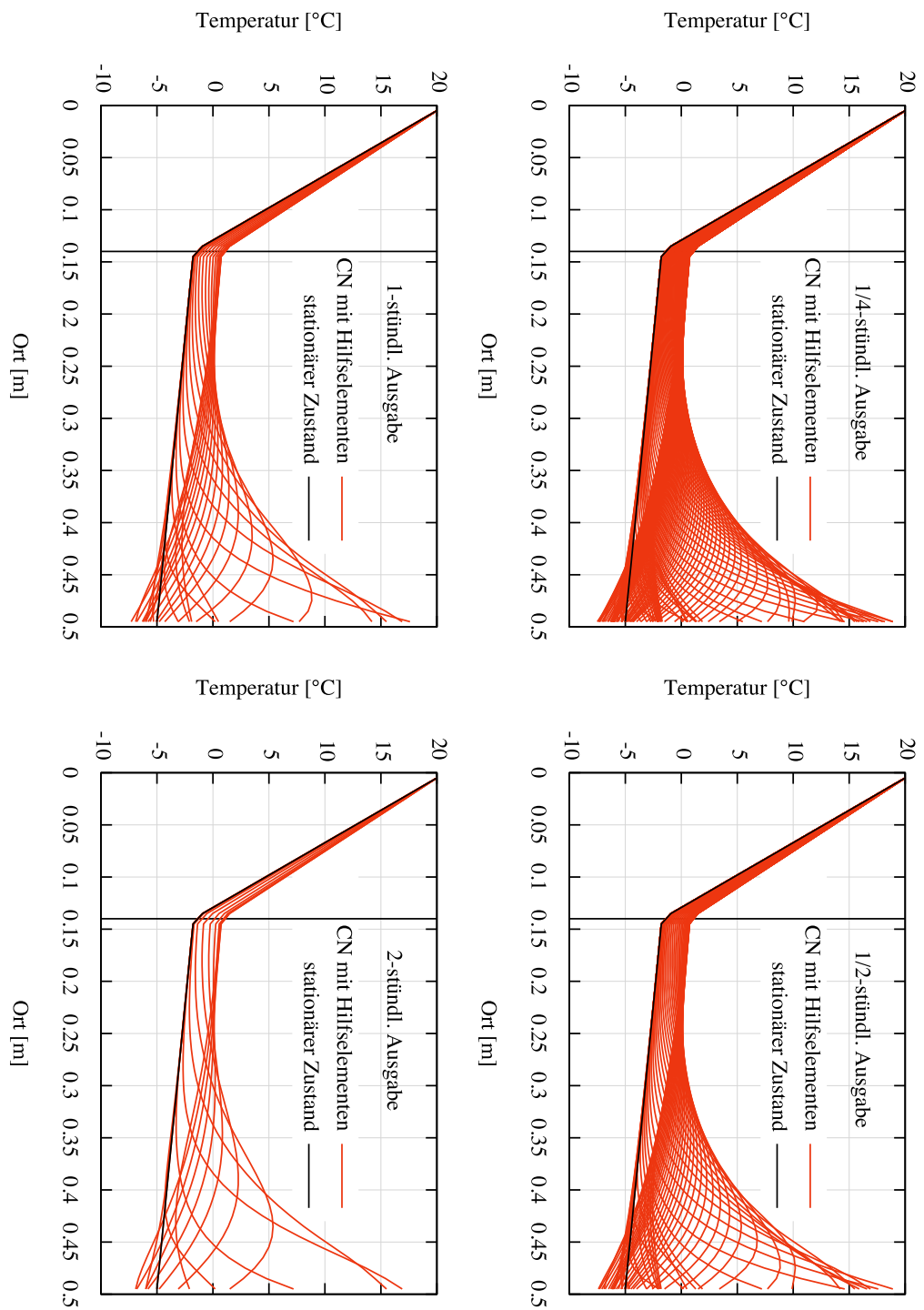


Abbildung 4.5: zeitlich veränderliche äußere Randbedingungen; Temperaturverlauf in 2-schichtigem Mauerwerk mit 14 cm EPS (Innendämmung) und 36 cm Ziegel

Tabelle 4.5: Parameter zu Abbildung 4.5

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	$t_{\text{stat.}}$ [h]	t_{CPU} [s]
CN - Verfahren (Hilfselemente)	0.01	30	991.5	0.59

stationäre Zustand (schwarze Linie) wieder in Abb. 4.5 eingezeichnet. Man sieht bei diesem Mauerwerksaufbau sehr deutlich, dass sich die Temperaturschwankungen von außen bis zur Schichtgrenze, also bis nahe dem Innenbereich, ausbreiten. Das heißt, der Bereich in dem die Schwankungen stattfinden ist viel breiter als bei einer außenliegenden Dämmung.

Selbst direkt an der Schichtgrenze finden, im Vergleich zur Außendämmung, noch deutliche Temperaturschwankungen statt.

Wie aus dem stationären Zustand ersichtlich ist, verliert das Mauerwerk bei diesem Systemaufbau die Funktion als Wärmespeicher. Nahezu der gesamte Temperaturabfall findet in der Innendämmung statt.

Um etwaige Phasenverschiebungen (siehe Abb. 4.6) erkennen zu können, wird der zeitabhängige Temperaturverlauf an bestimmten Positionen im Ziegel dargestellt.

Bei diesem Systemaufbau (EPS innen, Ziegel außen) ist ein deutlich ausgeprägter zeitlicher Phasenverschub erkennbar. Zusätzlich nimmt auch noch die Höhe der maximalen Temperaturschlenkung nach innen hin ab. Der Grund für dieses Verhalten kann durch die innenliegende Dämmung erklärt werden, wodurch der hauptsächliche Temperaturabfall eben in dieser Schicht stattfindet.

Um das Temperaturverhalten wieder energetisch zu quantifizieren, wird (wie beim System mit Außendämmung) folgende Tabelle 4.6 dargestellt.

Analog wie beim System mit Außendämmung, ist die energetische Schwankungsbreite in der äußeren Schicht teilweise um Größenordnungen mehr als in der inneren Schicht.

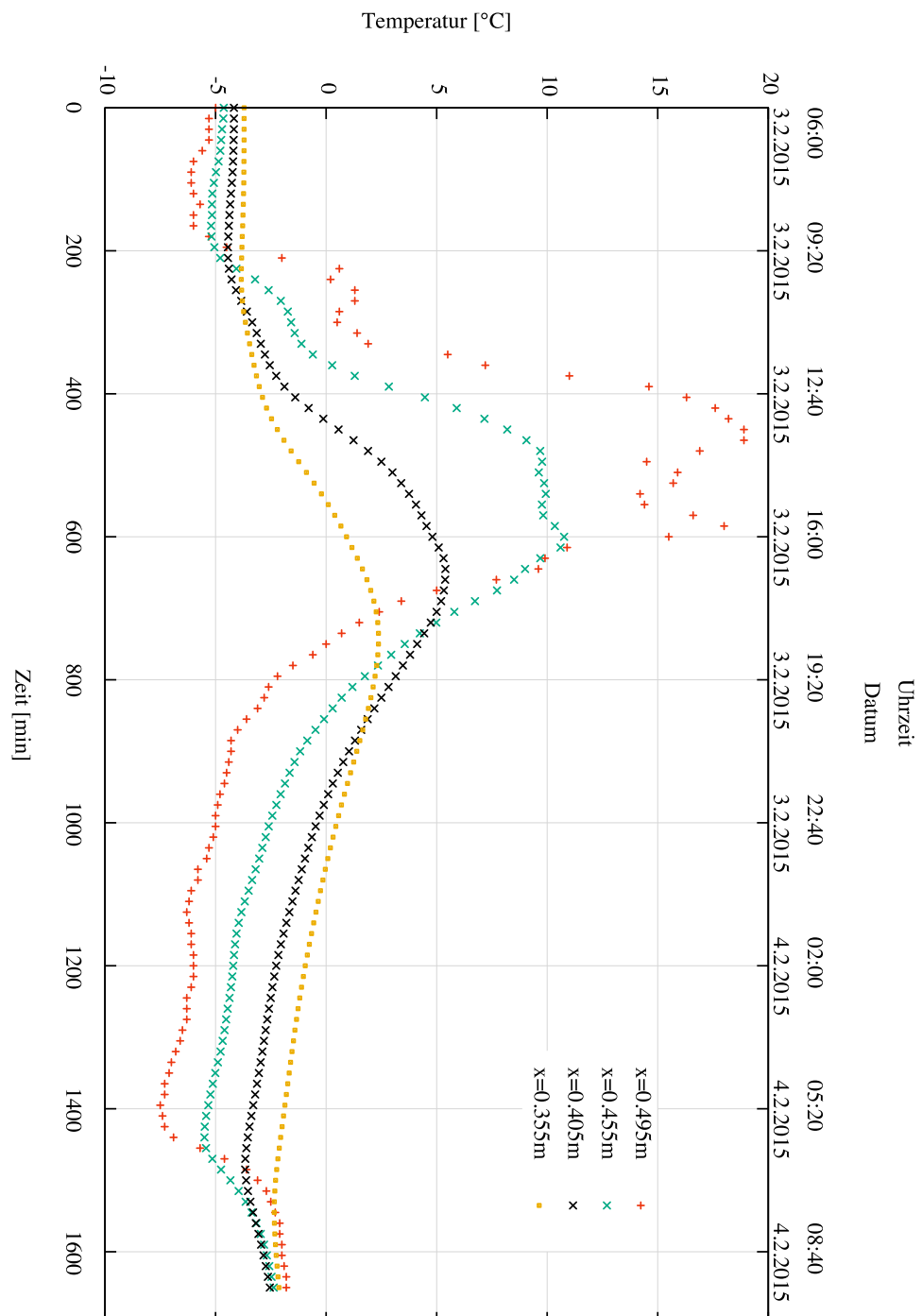


Abbildung 4.6: zeitliche Änderung der Temperatur an ausgewählten Stellen in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 14 cm EPS (Innendämmung) und 36 cm Ziegel

Tabelle 4.6: Energiewerte bei einem System aus 14 cm EPS (Innendämmung) und 36 cm Ziegel

Zeit [h]	Energie EPS [J]	Energie Ziegel [J]	Änderung EPS	Änderung Ziegel
0	771734.6	169997955.6		
4	771733.6	170352543.6	−0.0001%	+0.2085%
8	771735.4	172759254.7	+0.0002%	+1.4127%
12	772205.2	172951952.8	+0.0608%	+0.1115%
16	773756.0	171879388.3	+0.2008%	−0.6201%
20	774806.5	171322110.0	+0.1357%	−0.3242%
24	775024.8	170907289.8	+0.0281%	−0.2421%

Um den zeitlichen Phasenverschub (bzw. das 'Ausbreitungsverhalten') besser charakterisieren zu können, betrachte man die folgende Abbildung 4.7. Dabei soll die Tatsache, dass es außen wärmer wird, demonstriert werden. Dazu wird nicht nur an den ausgewählten Positionen von Abbildung 4.6, sondern auf einem räumlichen Gitter mit Auflösung 2 cm im Mauerwerk (Ziegel) bestimmt, wann am jeweiligen Ort das Temperaturmaximum auftritt. Dies soll einen Eindruck von der Ausbreitungsgeschwindigkeit der von außen nach innen laufenden 'Temperaturwelle' geben. Das Verhalten kann näherungsweise durch einen Ausdruck der Form

$$T(t) = A + Be^{-(t-t_0)/\tau}$$

beschrieben werden. Hier entspricht t_0 dem Zeitpunkt an dem im Außenraum (Randbedingung) das Maximum auftritt und τ (e-folding time) beschreibt das Zeitintervall in dem der Anfangszustand ($t = t_0$) auf $1/e \approx 37\%$ abgefallen ist. B beschreibt die Amplitude, also die anfängliche Auslenkung und A verschiebt die Kurve entlang der Temperaturachse.

Der Fit wurde mit Gnuplot erzeugt und gibt als Fitparameter folgende Werte aus

$$A = (-0.97 \pm 1.89)^\circ\text{C}$$

$$B = (17.32 \pm 1.88)^\circ\text{C}$$

$$\tau = (190.93 \pm 55.65) \text{ min}$$

Das etwas unregelmäßige Verhalten zwischen 500 min und 600 min erklärt sich vielleicht dadurch, dass sich von außen nach innen die Form der Kurven von Abbildung 4.6 ändert und dadurch das Maximum zu springen scheint.

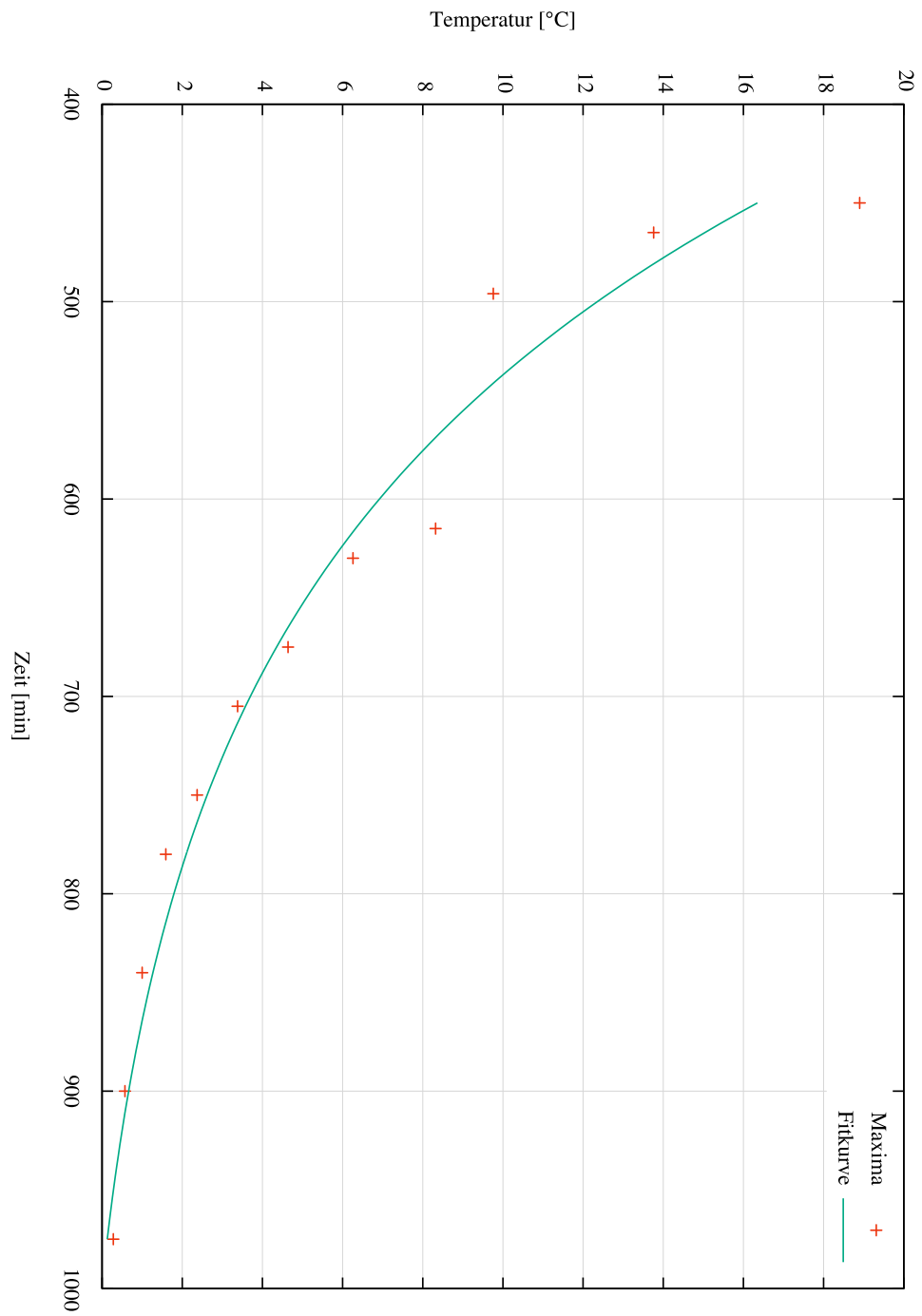


Abbildung 4.7: zeitliches Ausbreitungsverhalten der Temperaturmaxima im Ziegel von außen nach innen bei einer örtlichen Auflösung von 2 cm

4.3.2 Periodische, zeitlich veränderliche Randbedingungen

Wie bereits erwähnt, hinkt auf Grund der endlichen Wärmekapazität die Temperaturentwicklung den veränderlichen Randbedingungen hinterher.

In den folgenden Simulationen (Methode der Hilfselemente mit CN) wird nun ein Mauerwerk bestehend aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS (System mit Außendämmung) betrachtet. Durch die zeitlich periodischen Randbedingungen wird der Tatsache Rechnung getragen, dass das Mauerwerk eine gewisse Trägheit (endliche 'Reaktionszeit') hat. (Die Außentemperaturen von 'gestern' können noch einen Einfluss auf das System von 'heute' haben.) Dazu werden die gemessenen Außentemperaturen von Tabelle 4.3 periodisch fortgesetzt und das System, ausgehend vom stationären Anfangszustand, über mehrere identische Tage (betreffend des Außentemperaturverlaufs) integriert.

Man würde erwarten, dass nach einem Einschwingvorgang die Temperaturverteilungen im Mauerwerk strikt zeitlich periodisch sind. Das heißt aufeinander folgende spätere Perioden sollten sich nicht unterscheiden.

Eine solche Periode beginnt bei -5°C und endet nach 24 h zufällig wieder bei der gleichen Temperatur.

Die Abbildungen 4.8 und 4.9 zeigen je sieben aufeinander folgende Perioden (mit je 24 h Dauer), beginnend mit dem ersten Tag. Die Abbildung 4.9 zeigt dabei einen vergrößerten Ausschnitt vom Ziegel (oben) und vom EPS (unten). Jede Kurve entspricht dem ausgewählten Temperaturverlauf zum Zeitpunkt $t = 600 \text{ min} = 10 \text{ h}$ eines jeden Tages. In den ersten vier Perioden (Tagen) tritt noch ein erkennbarer Temperaturunterschied auf, der dann ab der fünften Periode annähernd verschwindet. Das heißt der 'Einschwingvorgang' dauert bei diesem System ungefähr bis Ende der fünften Periode ($\approx 120 \text{ h}$).

Die Abbildung 4.10 soll den zeitlich periodischen Temperaturverlauf an ausgewählten Stellen im Mauerwerk zeigen. Der Zeitverlauf erstreckt sich dabei über sieben Perioden, also 168 h. Jede Periode wurde im Diagramm durch eine senkrechte Linie markiert. Die Positionen im Mauerwerk wurden analog zu jener aus Abbildung 4.4 gewählt. Dabei beschreibt die gelb gepunktete Linie den zeitlichen Temperaturverlauf im Ziegel (am letzten Gitterpunkt vor der Grenzschrift), alle anderen Linien beziehen sich auf Positionen im EPS, wobei die rote Linie den vorgegebenen Randbedingungen entspricht.

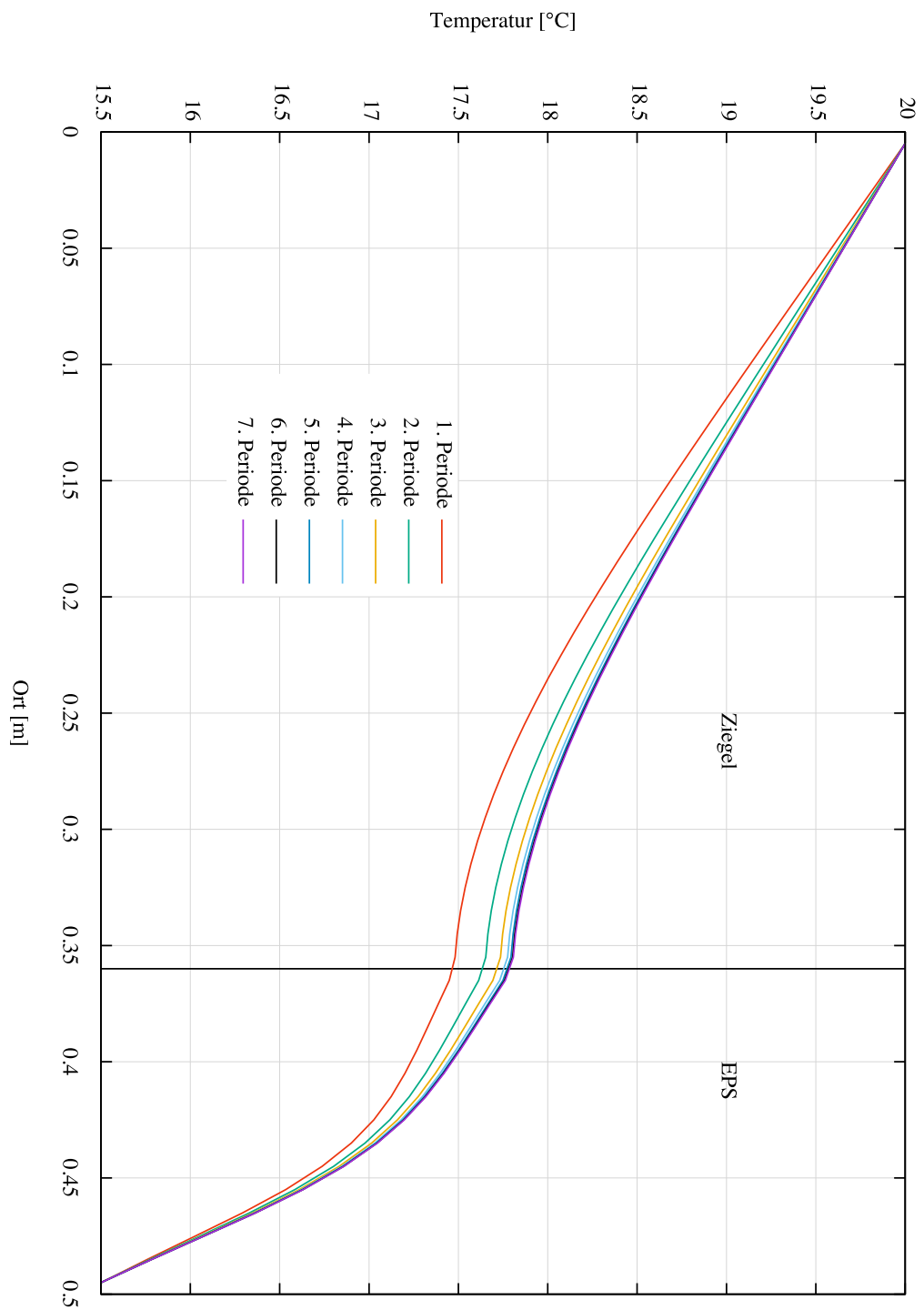


Abbildung 4.8: zeitlich periodische Randbedingungen bei einem System aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS, Temperaturverlauf jeder Periode zum Zeitpunkt $t = 600 \text{ min} = 10 \text{ h}$

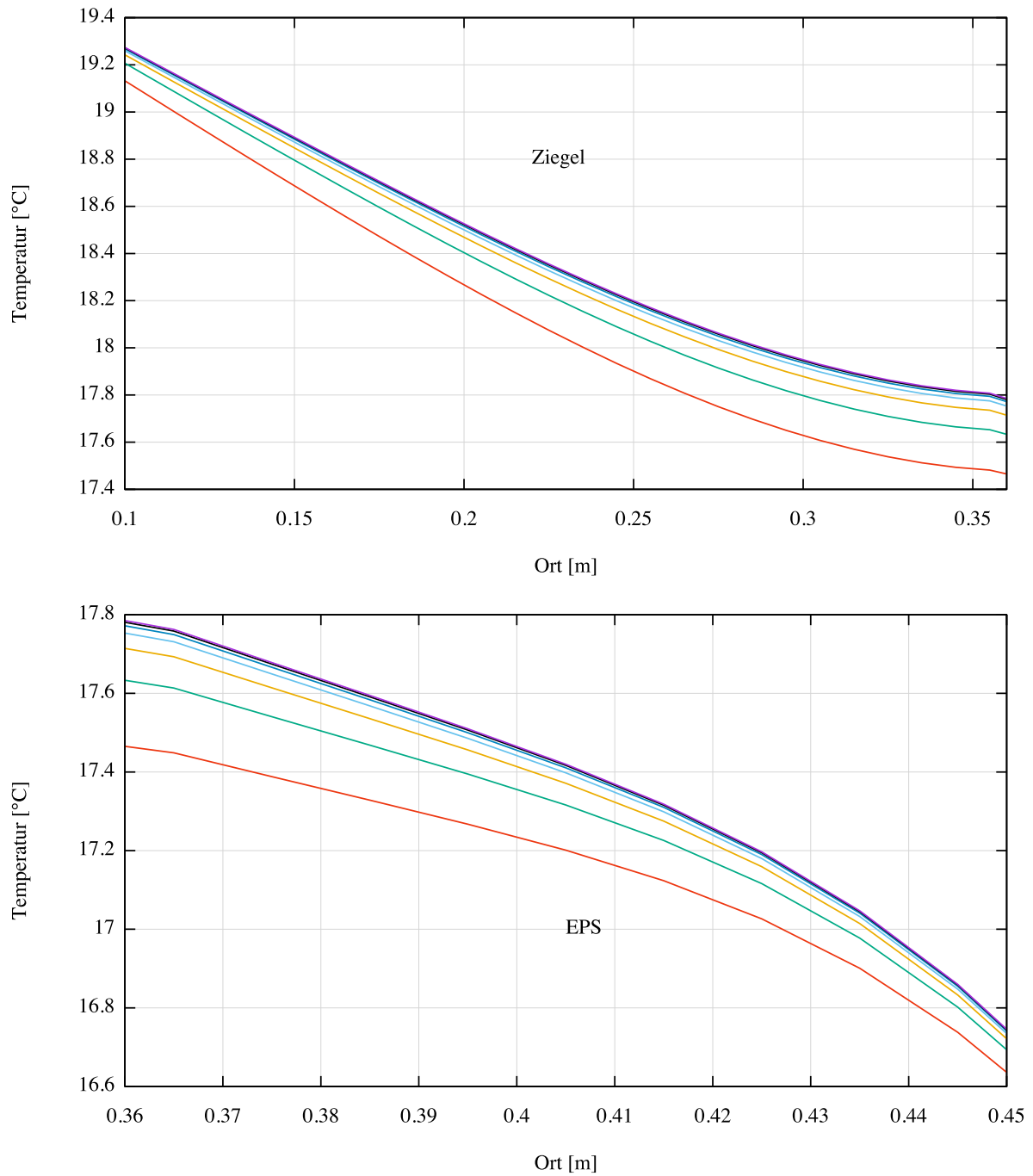


Abbildung 4.9: vergrößerter Ausschnitt des Temperaturverlaufs vom Ziegel und EPS bei zeitlich periodischen Randbedingungen zum Zeitpunkt $t = 600 \text{ min} = 10 \text{ h}$ einer jeden Periode

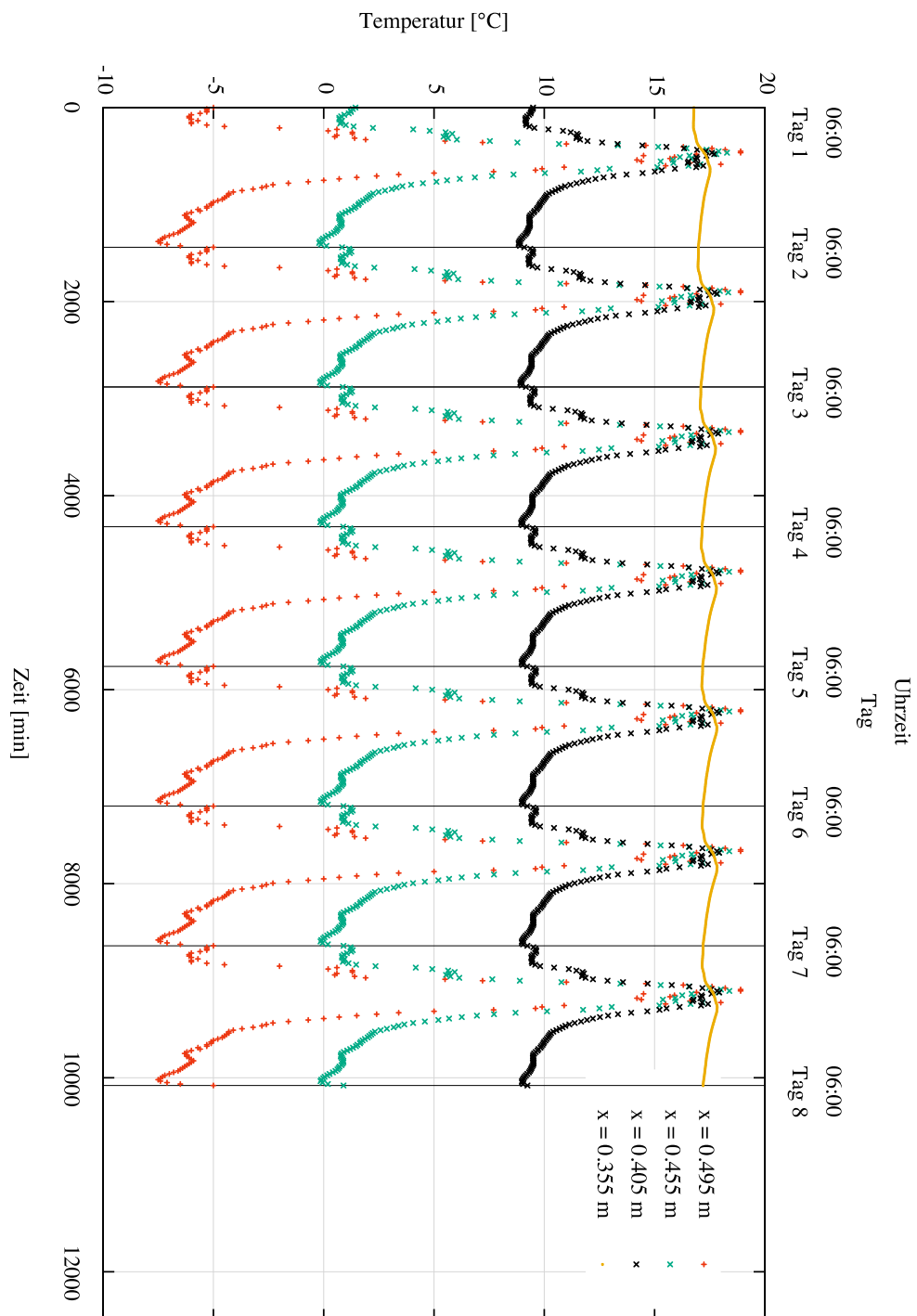


Abbildung 4.10: zeitlich periodische Änderung der Temperatur an ausgewählten Stellen in einem 2-schichtigem Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm Außendämmung (EPS)

4.3.3 Tauwasserausfall

Der Tauwasserausfall ist ein bauphysikalisches Problem und tritt dann auf, wenn der tatsächliche Wasserdampfpartialdruck der Luft den Sättigungsdampfdruck bei der aktuellen Temperatur erreicht oder übersteigt. Das Tauwasser durchfeuchtet dann das Mauerwerk bzw. Teile davon und sorgt im Falle des Ausfalls in der Dämmung (z.B. EPS) für ein schlechteres Wärmedämmverhalten. Zudem kann dauerhafte Durchfeuchtung von Bauteilen zum 'Zerfall' bzw. zur Vermoderung des jeweiligen Bauteils führen. Dieser Abschnitt soll sich somit der Simulation von Tauwasserausfall bei verschiedenen Mauerwerksaufbauten – System mit Außendämmung und System mit Innendämmung – widmen.

Im ersten Schritt wird für die vorgegebenen Randbedingungen von Seite 81 die Temperatur T und der Wasserdampfpartialdruck (kurz: Dampfdruck) p (oder Wasserdampfkonzentration c_w) der gekoppelte stationäre Zustand berechnet. Als Anfangsbedingung wird wieder eine stückweise lineare Funktion gewählt, wobei die Anfangsbedingung willkürlich gewählt werden kann, da in diesem Schritt nur der stationäre Zustand gebraucht wird. Aus dem stationären Temperaturverlauf lässt sich sodann der dazugehörige Sättigungsdampfdruck p_s (bzw. Tauwasserausfall zum stationären Zeitpunkt) errechnen. Es soll hier nochmals explizit erwähnt werden, dass die Wärmeleitfähigkeit λ , die Dichte ρ und die Wärmekapazität c für die Temperaturberechnung als konzentrationsunabhängig, jedoch der Diffusionskoeffizient für die Konzentrationsberechnung als temperaturabhängig angenommen wird, $D_w = D_w(T)$.

Im zweiten Schritt wird dann der zeitabhängige Tauwasserausfall, ausgehend vom errechneten stationären Zustand des ersten Schritts, bei zeitlich veränderlichen Randbedingungen aus Tabelle 4.3 simuliert.

Zur besseren Übersicht sollen hier nochmals die Randbedingungen in detaillierter Form dargestellt werden.

Tabelle 4.7: Randbedingungen (φ = relative Luftfeuchtigkeit, c_w = Wasserdampfkonzentration und p = Wasserdampfpartialdruck)

Lage	Temperatur [°C]	φ [%]	c_w [kg/m ³]	p [Pa]
Innenseite	20	50	0.00865	1166.10
Außenseite	-5	80	0.00256	321.5

Simulation mit außenliegender Dämmung

Die erste Simulationsreihe beschäftigt sich mit einem 2-schichtigen Mauerwerksaufbau, bestehend aus 36 cm Ziegel und 14 cm außenliegender Dämmung (EPS). Zunächst wird, wie bereits erwähnt, ausgehend von einem 'Knickprofil' der stationäre Zustand betrachtet. Zur Integration der Wärmeleitungs- und Diffusionsgleichung werden wieder die Standardeinstellungen verwendet, da sich diese auch für die Diffusionsgleichung eignen.

Der in Tabelle 4.11 vorkommende Parameter t_{stat} beschreibt die Zeitdauer, damit das gekoppelte System aus Wärme- und Konzentrationsströmen den stationären Zustand erreicht.

Tabelle 4.8: Parameter zu Abbildung 4.11

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	t_{stat} [h]	t_{plot} [h]	t_{CPU} [s]
Methode der Hilfselemente (CN)	0.01	30	843	4	1.05

In den beiden obigen Abbildungen von 4.11 sind die transienten Temperatur- und Dampfdruckentwicklungen für die gegebenen fixen Randbedingungen bis zum Erreichen des stationären Zustandes dargestellt.

Hierbei ist zu erkennen, dass beim Dampfdruckprofil der hauptsächliche Abfall wieder in der EPS-Schicht auftritt, nur nicht mehr in so extremer Weise wie beim Temperaturprofil. Während für den stationären Temperaturverlauf die Profile stückweise linear sind, sind sie für den Dampfdruck gekrümmt, weil $D_w = D_w(T)$.

Das linke untere Bild zeigt das Sättigungsdampfdruckprofil, bezugnehmend auf den stationären Temperaturverlauf. Das rechte untere Bild zeigt die Gegenüberstellung des Sättigungsdampfdrucks mit dem tatsächlichen Dampfdruck. Da es an keiner Stelle zu einer Überschneidung kommt, bleibt das Mauerwerk **tauwasserfrei**.

Nun stellt sich noch die Frage, ob es bei diesem Mauerwerk mit Außendämmung bei zeitlich veränderlichen äußeren Randbedingungen zu Tauwasserausfall kommt. Dazu wird die Temperatur im Innenraum konstant auf 20°C gehalten, während für die Zeitabhängigkeit der Temperatur im Außenraum die auf Seite 89 erwähnten realen Messwerte verwendet werden. Unter der Annahme, dass die relative Luftfeuchtigkeit innen 50% betragen soll, ergibt sich damit ein konstanter Wasserdampfpartialdruck von $p = 1166.1$ [Pa]. Für den Außenraum wird (nicht ganz realistisch) eine konstante relative Luftfeuchtigkeit von 80% angenommen. Da sich

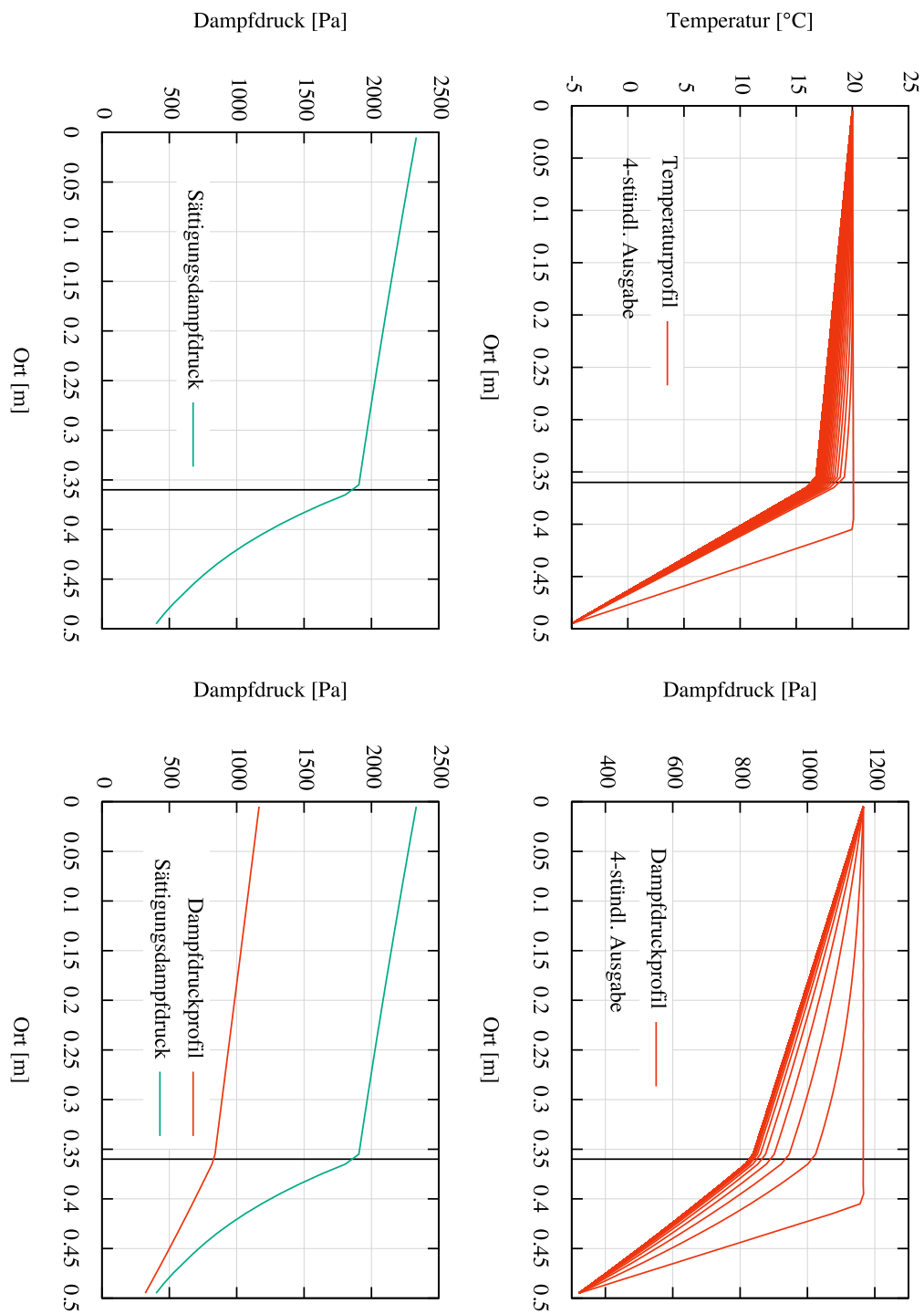


Abbildung 4.11: Temperatur- und Dampfdruckprofile in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS

jedoch außen die Temperaturwerte ändern, ergibt sich ein zeitabhängiger Wasserdampfpartialdruck. Ausgehend von der stationären Lösung wurde in der Simulation über eine Periode (24 h) integriert.

In Abbildung 4.12 wurden tatsächlicher Dampfdruck und Sättigungsdampfdruck in 4-Stundenschritten aufgetragen. Dabei entspricht die durchgezogene Linie immer dem jeweiligen Sättigungsdampfdruck und die punktierte Kurve dem tatsächlichen Dampfdruck.

Wie aus der Grafik ersichtlich ist, überschneidet keine Dampfdrucklinie die Sättigungsdampfdrucklinie derselben Farbe, wodurch auch in diesem Fall das Mauerwerk stets **tauwasserfrei** bleibt. Zudem sieht man, dass die Schwankungen in den Dampfdrücken wieder hauptsächlich in der EPS-Schicht stattfinden.

Speziell bei den Sättigungsdampfdrucklinien ist es anschaulich klar, da die zu Grunde liegenden Temperaturschwankungen ebenso in der EPS-Schicht erfolgen. Bei den tatsächlichen Dampfdrücken sind der Diffusionskoeffizient D_w und die äußere Randbedingung temperaturabhängig, wodurch auch etwas größere Schwankungen im Ziegelbereich möglich sind.

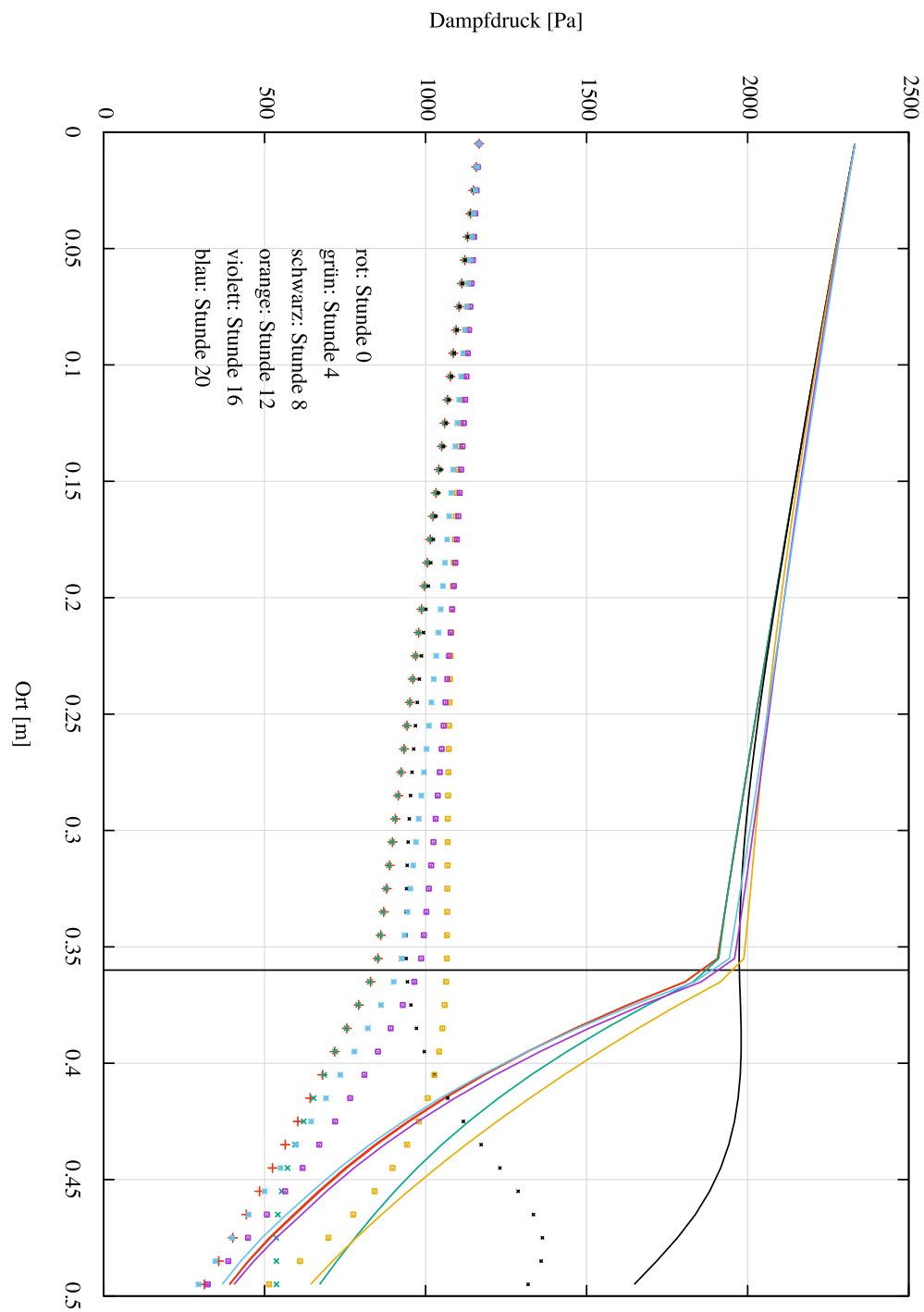


Abbildung 4.12: zeitabhängige Dampfdruckprofile (Symbole) und Sättigungsdampfdrücke (Linien) in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 36 cm Ziegel und 14 cm EPS

Simulation mit innenliegender Dämmung

Die Dämmung kann sowohl außen als auch innen angebracht werden (wurde schon in Kapitel 4.3.1 angesprochen). Es fragt sich, ob das bezüglich Tauwasserbildung 'vernünftig' ist. Dazu wird in dieser zweiten Versuchsreihe nun das gleiche System, nur mit vertauschten Positionen (14 cm EPS und 36 cm Ziegel), untersucht werden. Es werden wieder die Randbedingungen von Tabelle 4.7 angenommen.

Tabelle 4.9: Parameter zu Abbildung 4.13

Verfahren	Δx [m]	Δt [s]	t_{stat} [h]	Δt_{plot} [h]	t_{CPU} [s]
Methode der Hilfselemente (CN)	0.01	30	991.5	4	1.24

Ausgehend von der üblichen 'Knick'- Anfangsbedingung zeigen die in Abbildung 4.13 beiden oberen Grafiken wieder den transienten Verlauf von Temperatur und Dampfdruck, bis hin zum Erreichen deren stationären 'Knick'- Zustands. Der stationäre Zustand des Dampfdruckprofils ist wieder leicht gekrümmt, weil $D_w = D_w(T)$.

Bedingt dadurch, dass der hauptsächliche Temperaturabfall in der Innenschicht (EPS) stattfindet, fällt auch die Sättigungsdampfdruckkurve in diesem Bereich stark ab. Dies führt dazu, dass sich tatsächliche Dampfdruckkurve und Sättigungsdampfdruckkurve bereits in der EPS-Schicht überschneiden. Der Überschneidungsbereich (hier: 10 – 36 cm) stellt den Bereich dar, in welchem es zu Tauwasserausfall kommt.

Unter der Annahme, dass die vorgegebenen fixen Randbedingungen über eine größeren Zeitraum (z.B. 1 Jahr) hinweg bestehen, ist das Mauerwerk **nicht tauwasserfrei**. Diese Annahme ist jedoch unrealistisch, da kaum über einen längeren Zeitraum konstante Randbedingungen herrschen. Das heißt, falls nur kurz- bzw. mittelfristige Überschneidungen von tatsächlicher Dampfdruckkurve und Sättigungsdampfdruckkurve auftreten, ist nicht sofort mit bauphysikalisch problematischer Tauwasserbildung zu rechnen. In diesem Kontext ist wichtig, dass kondensiertes Tauwasser (z.B. während der Winterperiode) wieder verdunsten kann (z.B. während der Sommerperiode). Ist die Verdunstung jedoch nicht möglich, kommt es zu einer dauerhaften Durchfeuchtung des Mauerwerks und folglich zu bauphysikalischen Problemen.

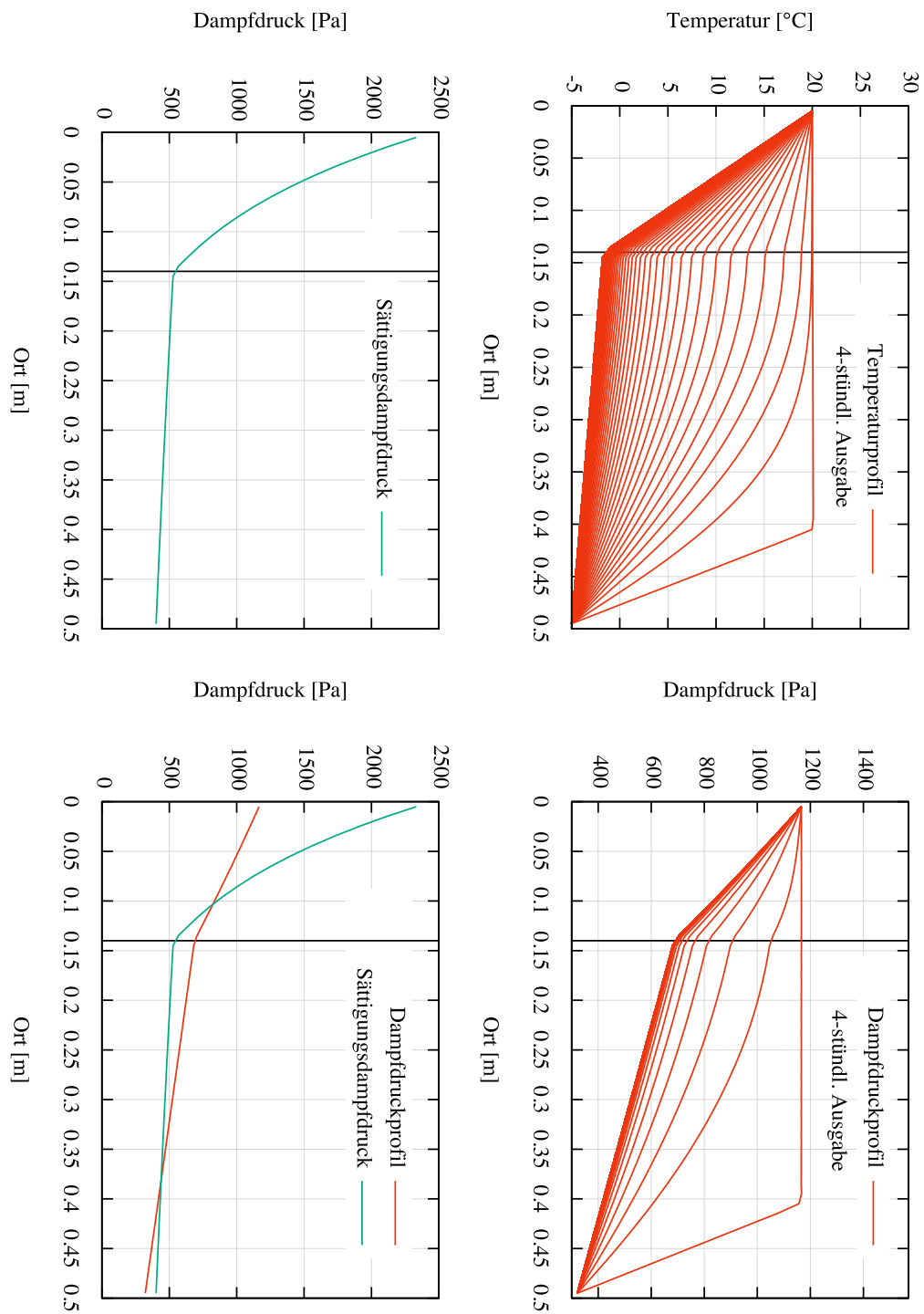


Abbildung 4.13: Temperatur- und Dampfdruckprofile in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 14 cm EPS und 36 cm Ziegel

Unter der Verwendung von den gleichen (wie bei der Simulation vom System mit Außendämmung) zeitlich veränderlichen Randbedingungen ergibt sich Abbildung 4.14 (gleiche grafische Darstellung wie in Abb. 4.12). Dabei wurden, ausgehend vom stationären Zustand, die Wärmeleitungs- und Diffusionsgleichung wieder über eine Periode (24 h) integriert.

Aus der Abbildung ist ersichtlich, dass zu jedem dargestellten Zeitpunkt ein gewisser Tauwasserbereich existiert. Unter Annahme der gemachten Randbedingungen ist dieser Mauerwerksaufbau also **nicht tauwasserfrei**. Wie jedoch bereits zuvor erwähnt, ist dies nicht zwangsläufig gleichbedeutend mit einem bauphysikalischen Problem.

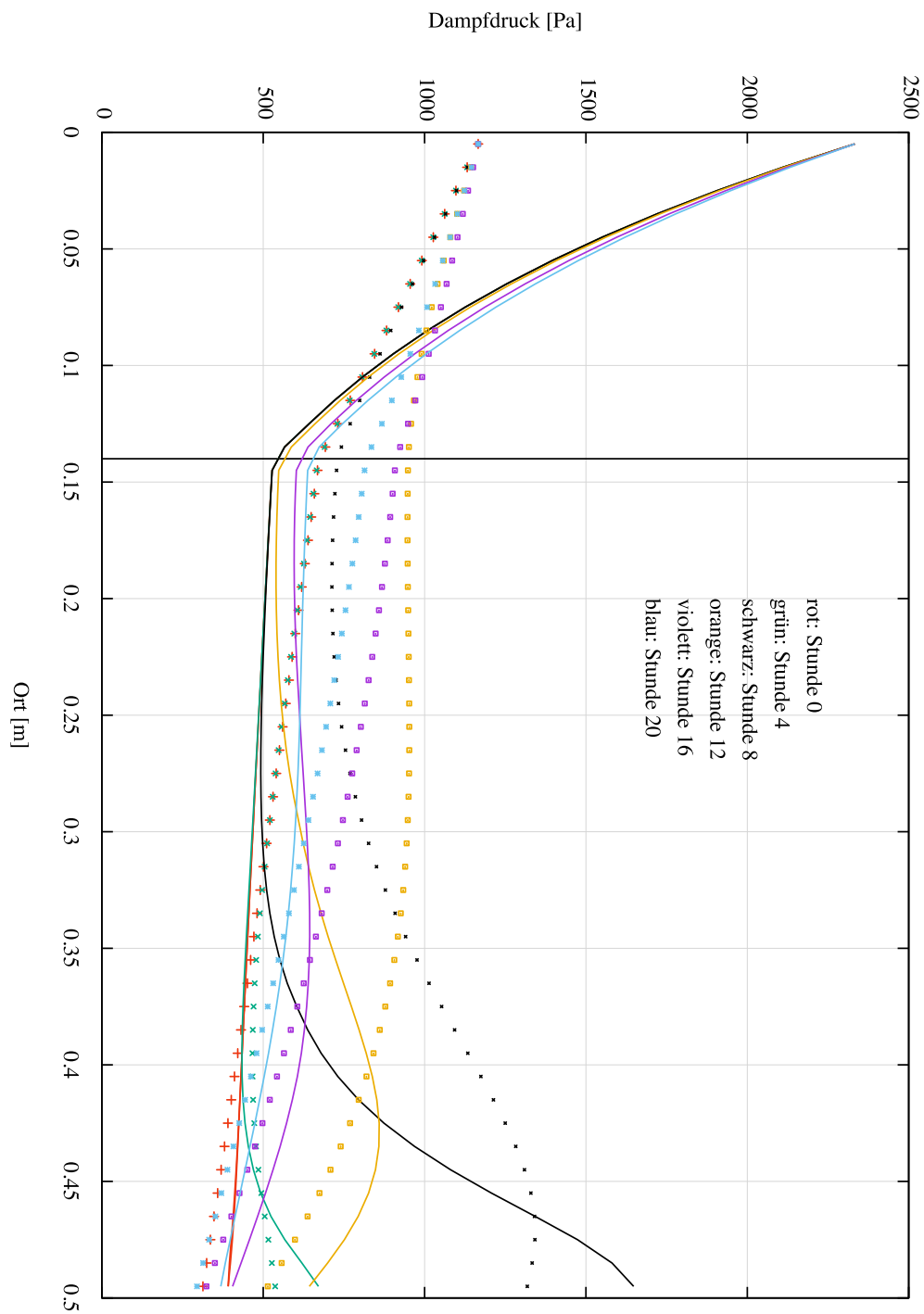


Abbildung 4.14: zeitabhängige Dampfdruckprofile (Symbole) und Sättigungsdampfdrücke (Linien) in einem 2-schichtigen Mauerwerk aus 14 cm EPS und 36 cm Ziegel

4.3.4 Zusammenfassung der Simulationen

Dieser Abschnitt soll eine kurze und übersichtliche Zusammenstellung bzw. Gegenüberstellung der Ergebnisse von Kapitel 4.3 liefern.

Für den stationären Zustand von Temperatur und tatsächlicher Dampfdruckkurve hat sich ergeben:

- der Temperaturabfall, aber auch der Dampfdruckabfall, erfolgt primär in der EPS-Schicht
- System mit Außendämmung: tauwasserfrei
- System mit Innendämmung: nicht tauwasserfrei

Aus den Simulationen mit den zeitlich veränderlichen Randbedingungen hat sich ergeben:

- die Temperaturvariationen nehmen von außen nach innen ab, wobei beim System mit Außendämmung die Temperatur im Ziegel annähernd konstant ist
- Dampfdruckschwankungen auch vorwiegend in der äußeren Schicht
- System mit Außendämmung: tauwasserfrei
- System mit Innendämmung: nicht tauwasserfrei
- bei Simulationen mit zeitlich periodischen äußeren Randbedingungen dauert das 'Einschwingverhalten' nicht länger als 5 Perioden (also 5 Tage zu je 24 h). Das heißt, das System 'erinnert sich' nicht an 'Wetterbedingungen', die mehr als 5 Tage zurück liegen.

Die Ursache für den Tauwasserausfall, primär bei Systemen mit Innendämmung, liegt daran, dass der hauptsächliche Temperaturabfall in der inneren Schicht (EPS) erfolgt. Als Folge fällt auch die Sättigungsdampfdruckkurve in diesem Bereich sehr stark ab, wodurch der Taupunkt weiter nach innen verlagert wird.

5 Diskussion

Für die Analyse von physikalischen Problemen bzw. von Differentialgleichungen steht eine Vielzahl von finiten Differenzen und Integrationsmethoden zur Verfügung. Dementsprechend wichtig ist die 'richtige' Wahl des Verfahrens. Ist man an der stationären Lösung der Wärmeleitungsgleichung mit der Methode der Hilfselemente interessiert, so liefern sowohl das explizite Euler-Verfahren (1. Ordnung) als auch das Crank-Nicholson-Verfahren (2. Ordnung) annähernd gleiche Ergebnisse, während bei der Beschreibung des transienten Verhaltens geringe Abweichungen auftreten. Da bei den beiden Verfahren kaum ein Performance-Unterschied bei der Ausführung des Computerprogramms bemerkbar ist, ist es empfehlenswert die Berechnungen mit dem Crank-Nicholson-Verfahren durchzuführen.

Bei der Auswahl einer geeigneten Methode für praktisch relevante Anwendungen ist man jedoch nicht so flexibel. Verwendet man die Diskretisierung der Fourier'schen DGL, ist man zwangsläufig auf eine konstante Wärmekapazität c und MasSENDICHTE ρ beschränkt, während bei der Methode mit Hilfselementen diese Einschränkungen entfallen.

Beschränkt man sich auf eine ortsabhängige Wärmeleitfähigkeit λ (in einer Dimension), während die Wärmekapazität und die Dichte konstant sind, welche einem mehrschichtigen Bauteil Rechnung tragen soll (dann ist die Wärmeleitfähigkeit annähernd eine Stufenfunktion), so sind deutliche Unterschiede in der Performance der Computerprogramme erkennbar. Dabei ist die Methode mit Hilfselementen viel ökonomischer als die Diskretisierung der Fourier'schen DGL. Würde man 2- bzw. 3- dimensionale Probleme betrachten, wäre mit einem weiteren drastischen Performanceverlust zu rechnen.

Natürlich sind die Ergebnisse der Arbeit kritisch zu betrachten, da einige Idealisierungen gemacht wurden. Beispielsweise ist natürlich auch die Temperatur im Innenbereich nicht konstant, weshalb auch hier zeitabhängige Randbedingungen nötig wären. Auch bei der Beschreibung der gekoppelten Wärme- und Konzentrationsströme wurde vereinfachend angenommen, dass nur der Konzentrationsstrom temperaturabhängig ist. Tatsächlich ist jedoch auch die Wärmeleitfähigkeit konzentrationsabhängig. Diese letzte Abhängigkeit ist jedoch für jedes Material empirisch zu ermitteln. Für weiterführende Untersuchungen wäre womöglich ein System mit beidseitig gekoppelten Wärme- und Konzentrationsströmen von Interesse.

Um die Simulationen noch praxisnaher zu gestalten, könnte man die Diffusion von Wasser in flüssiger Form durch das Mauerwerk berücksichtigen. Dies würde der Tatsache Rechnung tragen, dass bei Regen die äußere Oberfläche des Mauerwerks durchfeuchtet wird.

6 Anhang

6.1 Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit numerischen, computergestützten Methoden zur Lösung der Wärmeleitungs- bzw. Diffusionsgleichung mit Fokus auf bauphysikalischen Fragestellungen.

Einerseits soll die Genauigkeit beziehungsweise das Fehlerverhalten bei unterschiedlichen Diskretisierungen untersucht werden und andererseits sollen die verschiedenen Methoden auf deren Anwendbarkeit, aber auch auf deren Beschränkungen geprüft werden.

Der erste Teil dieser Arbeit befasst sich hauptsächlich mit den mathematischen Methoden, welche als Werkzeug für die darauffolgenden Anwendungen dienen.

Im zweiten Teil wird versucht, mit Hilfe von computergestützten Simulationen ein besseres Verständnis für das Lösungsverhalten zu erlangen - dabei kommen verschiedene kleine Programme (Programmiersprache FORTRAN 90/95) zur Anwendung. Ein weiterer Aspekt beschäftigt sich mit anwendungsbezogenen Fragestellungen wie gekoppeltes, transientes Verhalten von Wärme- und Feuchteströmen unter Einbeziehung veränderlicher Randbedingungen. Mit Hilfe der Simulationsprogramme kann auch die zeitabhängige Tauwasserbildung erkannt und erklärt werden.

Natürlich wurden für die Simulationen gewisse Annahmen und Idealisierungen getroffen, wodurch es im Vergleich zu realistischen Prozessen zu Abweichungen kommen kann. Nichtsdestotrotz können durch Simulationen grundlegende Eigenschaften und Verhaltensweisen nachgestellt werden. Beispielsweise tendieren Systeme mit Innendämmung zu Tauwasserbildung, während dieses Verhalten bei Systemen mit Außendämmung nicht beobachtet werden kann.

6.2 Abstract

The present paper is about numerical and computer-based methods for solving the heat-equation, in respect to issues of building physics.

On the one hand the accuracy and the error behavior should be investigated, depending on the different discretizations. On the other hand the applicability, but also the restrictions, are of importance.

The first section of this paper mainly investigates mathematical methods, which provide the understanding for the following applications.

In the second part simulations of basic systems take place to obtain a fundamental understanding of the error behavior. Different small applications (programmed in FORTRAN 90/95) are constituents of the entire simulation. Another topic deals with application-oriented issues, as coupled, unsteady heat- and moisture currents, involving time-dependent boundary conditions. On the basis of the simulations dependencies of the dew-point can be recognized and explained.

Of course, for the implementation some idealizations were made. So, certain deviations can occur in comparison with realistic systems. Nevertheless, simulations allow the investigation of fundamental properties and behaviors. For instance, systems with insulation layer on the inside tend to form condensation water, but systems with insulation layer on the outside don't show this behavior.

Literatur

- [1] https://www.google.at/url?sa=i&rct=j&q=&esrc=s&source=images&cd=&ved=0ahUKEwj7vPXJjsHPAhWGtxQKHSwgB44QjRwIBQ&url=http%3A%2F%2Fbeuchler.ins.uni-bonn.de%2Fteaching%2FSeminarS1G1_SS12%2Fdvd.pdf&bvm=bv.134495766,d.d24&psig=AFQjCNEaJbYX8aSX_Nv9-Ln0bmWiZRBulA&ust=1475669274523461&cad=rjt (aufgerufen am 14.04.2016)
- [2] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing. Third Edition, Cambridge University Press, New York 2007
- [3] Dr. M. Neumann, Skript. Differenzengleichungen, Partielle Differentialgleichungen. Kapitel 2,3 o.J o.O
- [4] D. E. Potter, Computational Physics, John Wiley & Sons Ltd, New York 1973
- [5] W. Polifke, J. Kopitz, Wärmeübertragung. Grundlagen, analytische und numerische Methoden. 2. aktualisierte Auflage. Pearson, München 2009
- [6] P. v. Böckh, T. Wetzel, Wärmeübertragung. Grundlagen und Praxis. 6. Auflage, Springer Verlag 2015 Berlin/Heidelberg
- [7] A. Klein, A. Godunov, Introductory Computational Physics, Cambridge University Press 2006
- [8] Bruno Klingen, Fouriertransformation für Ingenieur- und Naturwissenschaftler, Springer Verlag, Berlin Heidelberg 2013
- [9] D. Sonntag, Important new Values of the Physical Constants of 1986, Vapour Pressure Formulations based on ITS-90, and Psychrometer Formulae. In: Meteorol. 40, 5, S. 340-344, 1990
- [10] L. A. Guildner, D. P. Johnson und F. E. Jones: Vapor pressure of Water at Its Triple Point. In: J. Res. NBS - A, Vol. 80A, No. 3, S. 505-521, 1976
- [11] DIN EN 12524: Wärme- und feuchteschutztechnische Eigenschaften - TABELLIerte Bemessungswerte. Sept. 2001, Beuth Verlag, Berlin
- [12] Dr. Engin Bagda, Berechnen instationärer Wärme- und Feuchteströme, Herausgeber Dr. Ing. H. J. Scheibl, o.O, o.J
- [13] <https://de.wikipedia.org/wiki/W%C3%A4rmeleitf%C3%A4higkeit> (aufgerufen am 23.04.2016)

- [14] <https://de.wikipedia.org/wiki/Fermi-Dirac-Statistik> (aufgerufen am 29.04.2016)
- [15] https://de.wikipedia.org/wiki/Konservative_Annahme (aufgerufen am 03.05.2016)
- [16] <https://de.wikipedia.org/wiki/W%C3%A4rme> (aufgerufen am 22.10.2016)
- [17] ÖNORM B 8110 des ON-Komitees 175 „Wärmeschutz im Hochbau“, Stand Jänner 2012
- [18] DIN 52 615 „Bestimmung der Wasserdampfdurchlässigkeit von Bau- und Dämmstoffen“
- [19] Paul Wagner, Laboratorische Übung an der HTL Baden, Kolleg für Bautechnik, 2015 Baden bei Wien