

ALTERNATING DIRECTION IMPLICIT METHODEN FÜR DIE BAUTEILSIMULATION: CHANCEN UND HERAUSFORDERUNGEN

Anne Paepcke¹, Andreas Nicolai¹

¹Institut für Bauklimatik, Fakultät Architektur, TU Dresden

KURZFASSUNG

Die Simulation komplexer baukonstruktiver Details stellt hohe Anforderungen an numerische Lösungsverfahren. In dem Artikel wird sich auf das Alternating Direction Implicit (ADI) Verfahren als Alternative zum klassischen Impliziten Euler-Verfahren konzentriert. Neben der direkten Anwendung wird eine Block-Variante eingeführt und mit zwei verschiedenen Lösungsstrategien kombiniert: als ADI-Zeitschrittverfahren und als ADI-Vorkonditionierer für ein Krylov-Unterraum-Verfahren innerhalb einer impliziten Euler-Zeitschrittintegration. Die numerischen Verfahren werden an zwei repräsentativen Beispielen getestet: der Trocknungsprozess einer Ziegelwand und ein Wärmebrückenproblem. Die Ergebnisse geben Aufschluss über die Anwendbarkeit der numerischen Methoden auf hochgradig nichtlineare Problemstellungen unter dem Einfluss unstetiger Materialeigenschaften.

ABSTRACT

The simulation of complex details of building constructions imposes high demands on the numerical solution method. The article focuses on the Alternating Direction Implicit (ADI) method. We introduce the direct solution technique and a block variant of this method and combine it with different numerical strategies: an ADI time stepping procedure and an ADI preconditioned Krylov subspace method combined with an implicit Euler time integration. In order to check capability of the different numerical methods we design two representative examples: the drying of a brick wall and a thermal bridge simulation. The results give an indication about the applicability of the numerical methods to highly nonlinear problems combined with discontinuous material properties.

KEYWORDS: Simulation, Numerical Methods, Iterative Methods, Heat and Moisture Transport

EINLEITUNG

Im Feld der Bauteilsimulation ist die Abbildung möglichst detailgetreuer konstruktiver Details ein

häufiger Anwendungsfall. Dies führt zu raum- und zeitabhängigen Problemen hoher Komplexität. Die Entwicklung leistungsfähiger numerischer Lösungsmethoden, welche akzeptable Rechenzeiten bei genügender Lösungsgenauigkeit garantieren können, stellt daher nach wie vor ein aktuelles Forschungsfeld dar.

Grundlage der vorliegenden Bauteilsimulationen bilden die kontinuumsphysikalischen Gleichungen nach Grunewald (Grunewald, 1997) und Nicolai (Nicolai, 2008). Das Material wird von beiden Autoren als poröses Medium aufgefasst, welches sowohl Flüssigwasser- und Dampftransport als auch den daran gebundenen Wärmetransport durch den Porenkörper zulässt. Die Bilanzen für den Wärme- und Feuchtetransport berücksichtigen die gekoppelten Masse- und Enthalpiebilanzen für Flüssigwasser, Wasserdampf und Luft:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho^E = - \frac{\partial}{\partial x_k} (j_{k,conv}^E + j_{k,diff}^E) + \sigma^E \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u = - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(q_k + \sum_E h_E (j_{k,conv}^E + j_{k,diff}^E) \right) \quad (2)$$

(vgl. Nicolai, 1997, Kap 3.2). Die Änderungen der Massendichte ρ^E der Komponente E wird hervorgerufen durch konvektive Masseströme $j_{k,conv}^E$ und Transport durch Stoffdiffusion $j_{k,diff}^E$, sowie Quellen und Senken σ^E , zum Beispiel bei Kondensation von Wasserdampf. Die gesamte innere Energiedichte des Porenkörpers u steht durch die thermische Speichermasse des Porenkörpers $\rho^m c_T^m$ mit der Temperatur T des homogenisierten Materials in Verbindung:

$$u = \rho^m c_T^m (T - T_{ref}) + \sum_E \rho^E h_E \quad (3)$$

Sie ändert sich durch konvektiven Transport der spezifischen Enthalpie h_E aller Komponenten und Wärmestrom durch Wärmeleitung

$$q_k = -\lambda \frac{\partial}{\partial x_k} T. \quad (4)$$

Hierbei bezeichnet λ die zusammengesetzte Wärmeleitfähigkeit aus Porenkörper, Wasser- und Luftmengen innerhalb des Porensystems.

Diese Gleichungen sind aufgrund der Temperaturabhängigkeit von Verdunstung und Kondensation, sowie dem Einfluss des Feuchtegehalt in den Poren auf das thermische Verhalten des gesamten porösen Körpers hochgradig nichtlinear miteinander gekoppelt. Zudem können die Materialeigenschaften der einzelnen Bauteilkomponenten stark variieren. Die Anforderungen an Stabilität und Rechengenauigkeit schränkt daher die Auswahl an möglichen numerischen Lösungsverfahren stark ein.

ALTERNATING DIRECTION IMPLICIT

Die Alternating Direction Implicit (ADI) Methode wurde parallel von Peaceman und Racheford (Peaceman et al., 1955) und Douglas (Douglas, 1955) als Zeitintegrationsmethode für lineare partielle Differentialgleichungen eingeführt. Für ein allgemeines zweidimensionales Problem der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} v = Av \quad (5)$$

führt die Zeitdiskretisierung durch ein Einschrittverfahren mit Zeitschrittweite Δt zu einer Beziehung zwischen der bekannten Lösung des alten Zeitschrittes v^n und der unbekannt Lösung des neuen Zeitschrittes v^{n+1} . Beim expliziten Einschrittverfahren ergibt sich:

$$v^{n+1} - v^n = \Delta t Av^n \quad (6)$$

und beim impliziten Einschrittverfahren:

$$v^{n+1} - v^n = \Delta t Av^{n+1}. \quad (7)$$

Die unbeschränkte zeitschrittunabhängige Stabilität ist nur für das implizite Einschrittverfahren gegeben. Allerdings ist die Lösung nach der Unbekannten v^{n+1} um Wesentliches komplexer. Das ADI nach Peaceman-Racheford liefert eine Zerlegung des Operators A in zwei richtungsabhängige Komponenten A_x und A_y , die durch zwei miteinander kombinierte explizite und implizite Lösungsschritte verbunden sind:

$$v^{n+\frac{1}{2}} - v^n = \frac{\Delta t}{2} \left(A_x v^{n+\frac{1}{2}} + A_y v^n \right) \quad (8)$$

$$v^{n+1} - v^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\Delta t}{2} \left(A_x v^{n+\frac{1}{2}} + A_y v^{n+1} \right) \quad (9)$$

Hierbei kann der Operator A_x mit den Ableitungen

$$-\frac{\partial}{\partial x} (\bullet_x)$$

und entsprechend Operator A_y mit

$$-\frac{\partial}{\partial y} (\bullet_y)$$

identifiziert werden. In jedem der beiden Teilschritte wird demnach die Lösung einer eindimensionalen Differentialgleichung verlangt. Die Einfachheit dieses Rechenschrittes macht die Effizienz der ADI-Methode aus und begründet ihre Popularität. Des Weiteren wurde im Gegensatz zum expliziten Einschrittverfahren die unbeschränkte Stabilität für die Peaceman-Racheford-Methode bewiesen (Craig et al., 1988). Das sichert jedoch nicht die genügende numerische Genauigkeit der erzeugten Lösung (vgl. Thibault, 1985). Die Gegenwart von Splitting-Fehlern erzeugt beispielsweise Schwierigkeiten bei der Anwendung der Methode auf gemischte Ableitungen (vgl. Douglas et al., 1964, McKee, 1970).

Verstärkten Einsatz erlangten modifizierte ADI-Methoden im Bereich der Strömung durch poröse Medien (z.B. Hayes et al., 1981, Celia et al., 1985).

IMPLEMENTIERUNG

Die Lösung der Wärme- und Feuchtetransportgleichungen innerhalb eines porösen Bauteiles erfordert die Abstraktion eines nichtlinearen gekoppelten Differentialgleichungssystems auf die vorgestellten Zeitintegrationsmethoden. Die Analyse beschränkt sich auf das implizite Euler-Verfahren und das ADI-Verfahren. Die Wärme- und Feuchte-transportterme sind hochgradig nichtlinear von den gekoppelten Lösungsgrößen abhängig. Daher wird aus der Sicht der numerischen Stabilität ein Splitting der einzelnen Transportgleichungen als ungünstig gewertet.

Die Block-Implementierung fasst die Variable v als Vektor von Massendichten und Energiedichten auf. In den Ausführungen von Nicolai gehen die Gesamtfeuchtemassendichte als Summe von Flüssigwasser (Index w) und Wasserdampf (Index v), sowie die Energiedichte als Lösungsvariablen in die Simulation ein:

$$v = \begin{pmatrix} \rho^{v+w} \\ \rho^m c_T^m (T - T_{ref}) + \rho^w h_w + \rho^v h_v \end{pmatrix} \quad (10)$$

Das Richtungssplitting wird auf einen Vektor von Operatoren angewendet, also

$$f_x = -\frac{\partial}{\partial x} \left(q_x + j_{x,conv}^w h_w + (j_{x,conv}^v + j_{x,diff}^v) h_v \right) \quad (11)$$

und

$$f_y = -\frac{\partial}{\partial y} \left(q_y + j_{y,conv}^w h_w + (j_{y,conv}^v + j_{y,diff}^v) h_v \right) \quad (12)$$

Als nichtlineares Lösungsverfahren wird ein modifiziertes Newton-Raphson-Verfahren gewählt. Diese Methode löst nichtlineare Gleichungen des Typs

$$F^{n+1} := F(v^{n+1}) = 0. \quad (13)$$

Für die implizite Euler-Integrationsmethode ergibt sich der nichtlineare Ausdruck:

$$F^{n+1} = v^{n+1} - v^n - \Delta t (f_x^{n+1} + f_y^{n+1}) \quad (14)$$

Die modifizierte Newton-Raphson-Methode erzeugt nun als Ersatz für die nichtlineare Gleichung eine Sequenz linearer Differentialgleichungssysteme, die räumlich durch eine Finite-Volumen-Methode diskretisiert und durch ein Gauß-Verfahren mit kombinierter LU-Faktorisierung gelöst werden. Dieser Lösungsschritt ist beim impliziten Euler-Verfahren sehr aufwendig. Im Gegensatz zum klassischen Newton-Raphson-Verfahren wird daher beim modifizierten Verfahren die Aktualisierung der Lösungsmatrizen nur im Bedarfsfall erzwungen.

Für das ADI-Verfahren ergibt sich eine Folge nichtlinearer Gleichungen:

$$F^{n+\frac{1}{2}} = v^{n+\frac{1}{2}} - v^n - \frac{\Delta t}{2} (f_x^{n+\frac{1}{2}} + f_y^n) \quad (15)$$

$$F^{n+1} = v^{n+1} - v^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} (f_x^{n+\frac{1}{2}} + f_y^{n+1}). \quad (16)$$

Die Folge eindimensionaler Probleme, die das ADI-Verfahren erzeugt, erfordert nur einen geringen Rechenaufwand. Allerdings ist die Sicherung der numerischen Genauigkeit für die errechnete Lösung notwendig. Zu diesem Zweck ist eine Fehlerkontrolle Teil des Zeitintegrationsverfahrens. Auf zu große numerische Ungenauigkeit wird mit einer Verkleinerung der aktuellen Zeitschrittweite Δt reagiert (vgl. Paepcke et al., 2011).

ADI-VORKONDITIONIERER

Eine Kombination der Vorteile von implizitem Euler-Verfahren und ADI-Verfahren führt zur Idee der ADI-Vorkonditionierung. Das Erstellen und Lösen der linearen Gleichungssysteme durch das Gauß-Verfahren benötigt bei der impliziten Zeitschrittintegration eine hohe Rechenkapazität. Aus diesem Grund haben sich seit geraumer Zeit iterative Lösungsmethoden für schwachbesetzte lineare Gleichungssysteme etabliert (vgl. Meister 2008, Kap. 4.3, Saad, 2003). Ein bekannter Vertreter sind die Krylov-Unterraum-Methoden. Diese Verfahren sind als numerisch robuste Projektionsmethoden bekannt und erzeugen eine Näherungslösung des linearen Gleichungssystems.

Die Konvergenzgeschwindigkeit der Krylov-Unterraum-Methoden ist bei alleiniger Anwendung in der Regel allerdings ungenügend. Deshalb werden Vorkonditionierungstechniken eingesetzt, welche das Gleichungssystem modifizieren und die Konvergenz der Verfahren beschleunigen sollen. Dabei ist der Vorkonditionierer meist eine Approximation der

Gleichungssystemmatrix, die leicht invertiert werden kann. Der Einsatz von ADI-Methoden als Splitting-Vorkonditionierer wird daher in der aktuellen Literatur vorgeschlagen (z.B. Ma et al., 1993, Farago et al., 2002, Deghan et al., 2007).

Konkret erzeugt das Newton-Raphson-Verfahren für das Implizite Euler-Verfahren eine Folge linearer Probleme mit Iterationsindex m :

$$0 = F^{n+1,m} + \underbrace{\left(I - \Delta t (A_x^m + A_y^m) \right)}_{\text{Jacobi Matrix}} \Delta v^{m+1} \quad (17)$$

bei

$$A_x^m = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \rho^{V+W}} f_{x,1}^m & \frac{1}{\frac{\partial u}{\partial T}} \frac{\partial}{\partial T} f_{x,1}^m \\ \frac{\partial}{\partial \rho^{V+W}} f_{x,2}^m & \frac{1}{\frac{\partial u}{\partial T}} \frac{\partial}{\partial T} f_{x,2}^m \end{pmatrix} \quad (18)$$

und

$$A_y^m = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \rho^{V+W}} f_{y,1}^m & \frac{1}{\frac{\partial u}{\partial T}} \frac{\partial}{\partial T} f_{y,1}^m \\ \frac{\partial}{\partial \rho^{V+W}} f_{y,2}^m & \frac{1}{\frac{\partial u}{\partial T}} \frac{\partial}{\partial T} f_{y,2}^m \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Das Konzept der Vorkonditionierung sieht eine Umformung des Gleichungssystems (17) vor, so dass die originale Lösung erhalten bleibt:

$$P_L \left(I - \Delta t (A_x^m + A_y^m) \right) P_R w = -P_L F^{n+1,m} \quad (20)$$

Dabei ist P_L ein linksseitiger und P_R ein rechtsseitiger Vorkonditionierer, w eine Substitution der Lösungsgröße mit

$$P_R w = \Delta v^{m+1}. \quad (21)$$

Es wird deutlich, dass eine gute Approximation der Inversen von $I - \Delta t (A_x^m + A_y^m)$ durch den linksseitigen Vorkonditionierer auf einen der Einheitsmatrix ähnlichen Operator führt. Die Inversion der durch Diskretisierung erhaltenen Matrix ist Aufgabe des Krylov-Unterraum-Verfahrens.

In Anlehnung an Farago (Farago et al., 2002, Kap. 2.3.3) wird ein parametrisierter ADI-Vorkonditionierer eingesetzt. Anstelle der originalen Zerlegung findet das bereits vorgestellte räumliche Splitting Verwendung:

$$P_L^{-1} = \frac{1}{\omega} (I - \omega \Delta t A_x) (I - \omega \Delta t A_y) \quad (22)$$

als einseitiger Vorkonditionierer oder

$$P_L^{-1} = \sqrt{\omega} \left(\frac{1}{\omega} I - \Delta t A_x^m \right) \quad (23)$$

$$P_R^{-1} = \sqrt{\omega} \left(\frac{1}{\omega} I - \Delta t A_y^m \right) \quad (24)$$

als beidseitiger Vorkonditionierer. Der freie Parameter $\omega \in (0,2)$ ist Bestandteil des gewählten Verfahrens. Seine Bedeutung kann für die linksseitige Variante durch die Identität

$$P_L^{-1} = \left(I - \Delta t (A_x^m + A_y^m) \right) + \underbrace{\left(\frac{1}{\omega} - 1 \right) I - \Delta t^2 \omega A_x^m A_y^m}_{\text{Splitting Fehler}}. \quad (25)$$

erklärt werden. Der erste Term der rechten Seite entspricht der Jacobi-Matrix des Impliziten Euler-Verfahrens (17). Die Parametrisierung verschiebt numerische Fehler zwischen den letzten beiden Fehlertermen. Dabei umfasst $\left(\frac{1}{\omega} - 1 \right) I$ Fehler innerhalb der Zeitableitung und $-\Delta t^2 \omega A_x^m A_y^m$ Fehler durch gemischte Ableitungen.

Als Lösungsmethode für das vorkonditionierte Gleichungssystem wird aus der Klasse der Krylov-Unterraum-Methoden das GMRES-Verfahren gewählt.

FALL I: TROCKNUNG EINER ZIEGELWAND

Als repräsentativer Simulationsfall wurde die Trocknung eines Ziegelwandstückes nachempfunden.

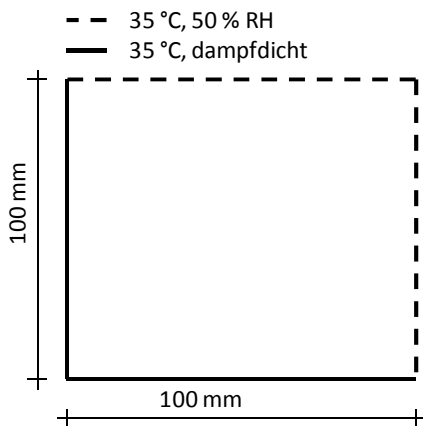


Abbildung 1 Konstruktion Ziegelwand

Bei diesem Prozess sind aufgrund der Phasenumwandlung von Flüssigwasser zu Wasserdampf die nichtlinearen Wechselwirkungen zwischen Wärme- und Feuchtetransport stark ausgeprägt. Um einen zweidimensionalen Fall zu konstruieren, wurde ein Quadrat mit jeweils zwei Oberflächen versehen (Abbildung 1). Auf der Trocknungsseite (Wärmeleitung und Dampfdiffusion) wurde eine relative Luftfeuchte von 50% angenommen und eine Temperatur von 35°C. An den gegenüberliegenden Seiten wird lediglich Wärmeleitung berücksichtigt. Die Simulation startete mit einer Luftfeuchte von 100% und einer Temperatur von 20°C im Bauteil. Beobachtet wurde

ein Zeitraum von zwei Tagen. Räumlich diskretisiert wurde das Wanddetail durch 100x100 Finite-Volumen-Elemente.

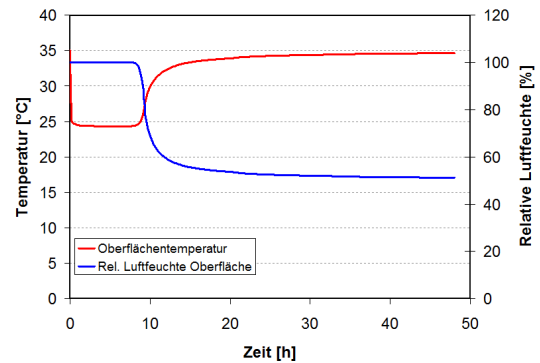


Abbildung 2 Gemittelte Oberflächeneigenschaften, Trocknungsseite

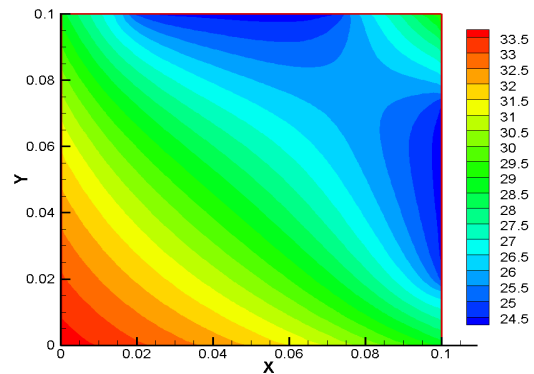


Abbildung 3a Temperatur [°C], Realzeit 9h

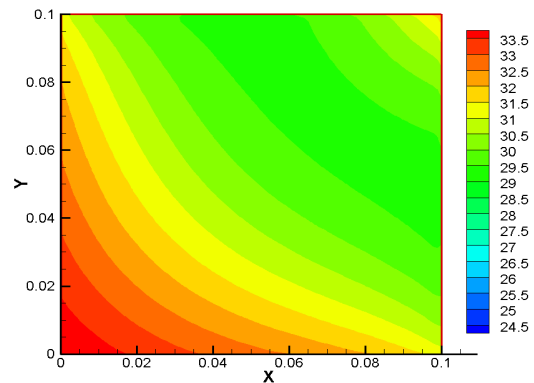


Abbildung 3b Temperatur [°C], Realzeit 10h

Charakteristisch für den Trocknungsprozess ist die Ausbildung zweier Prozessphasen: in der ersten Phase verdunstet das Wasser an der Bauteiloberfläche und wird durch Kapillartransport vom Bauteilinneren an die Oberfläche befördert. Zu erkennen ist diese Prozessphase an einer durch Verdunstungskühlung abgesenkten Oberflächentemperatur und einer hohen Luftfeuchte an der Bauteiloberfläche (Abbildung 2). In der zweiten Prozessphase reißt der Kapillartransport ab, und die

Verdunstung wandert ins Bauteilinnere. Dabei erhöht sich die Oberflächentemperatur, und der relative Feuchtegehalt nimmt ab.

Interessant ist der Simulationsbereich zwischen der 9. und 10. Stunde, in welchem der Übergang zwischen beiden Prozessphasen stattfindet. Hier wirken Änderung der Feuchtetransportmechanismen, Phasenumwandlung und Temperatur besonders stark aufeinander ein. Das Temperaturfeld ändert sich abrupt (Abbildung 3a und 3b).

Diese Zusammenhänge sind verantwortlich für die hohen Simulationszeiten aller Verfahren (Tabelle 1). Nur bei einer minimalen Zeitschrittweite von $\Delta t_{\min} \approx 2s$ beim ADI und $\Delta t_{\min} \approx 10s$ bei allen anderen Methoden, welche in dem kritischen Simulationsbereich gemessen wurde, kann die genügende Genauigkeit der Zeitintegration garantiert werden.

Besonders nachteilig wirkt sich die Komplexität der physikalischen Zusammenhänge auf die Simulationsgeschwindigkeit des klassischen Impliziten Euler-Verfahrens aus. Die nichtlineare Kopplung aller Transportterme verlangt eine häufige Aktualisierung und LU-Faktorisierung der Lösungsmatrizen. Dieser Rechenschritt ist zeitaufwändig und schlägt sich in langen Simulationszeiten nieder.

*Tabelle 1
Simulationsverlauf*

| METHODE | RECHEN-ZEIT | $\Delta t_{\min} [s]$ |
|-------------------------------------|-------------|-----------------------|
| Euler Implizit | 1.2 h | 10 |
| ADI | 30 min | 2.3 |
| GMRES, ADI(0.5) - Vorkonditionierer | 55 min | 9 |
| GMRES, ADI(0.07)-Vorkonditionierer | 20 min | 9 |

Das ADI-Verfahren wird ebenfalls auf eine geringe Zeitschrittweite zurückgeworfen. Da ein Zeitintegrationsschritt jedoch viel effektiver durchgeführt wird, sinkt der Rechenaufwand im Vergleich zum Impliziten Euler-Verfahren, obwohl die Genauigkeitsforderung deutlich kleinere Zeitschritte erzwingt. Die Simulationszeit fällt dramatisch.

Wird die aufwändige direkte Lösung der Gleichungssysteme innerhalb des Impliziten Euler-Verfahrens durch das iterative GMRES-Verfahren ersetzt, so wird die Simulationsgeschwindigkeit gesteigert. Die Größe des Rechenzeitschritts entspricht bei Konvergenz des Verfahrens ungefähr dem des Impliziten Euler-Verfahrens.

Die Variante mit ADI als Vorkonditionierer mit Standardparametrisierung ($\omega = 0.5$) ist jedoch langsamer als das direkte ADI-Verfahren. Die Anforderungen an das ADI als guten Vorkonditionierer unterscheiden sich von denen an das direkte Zeitintegrationsverfahren. Daher ist ohne Weiteres zu erwarten, dass die Variation des Parameters ω die Konvergenzrate des iterativen Gleichungssystemlösers maßgeblich beeinflusst. Obwohl der Wert $\omega = 0.5$ dem optimalen Parameter des klassischen Peaceman-Racheford-ADI entspricht, liefert $\omega = 0.07$ wesentlich bessere Simulationsgeschwindigkeiten.

Dieses Ergebnis verdeutlicht ein wesentliches Merkmal der kombinierten Lösungsmethode: die numerische Stabilität innerhalb der Zeitintegration ist durch das überlagerte Impizite Euler-Verfahren gesichert. Eine robuste Lösung der linearen Gleichungssysteme garantiert das Krylov-Unterraum-Verfahren. Folglich ist die Parametrisierung des ADI-Vorkonditionierers für die numerische Stabilität nur bedingt relevant und kann vielmehr zur Optimierung der Methode eingesetzt werden.

Das ADI-Verfahren als direkte Zeitintegrationsmethode hingegen bewahrt nur für die Peaceman-Racheford-Variante zeitschrittunabhängige Stabilität. Versuche einer alternativen Parametrisierung lieferten eine Verschlechterung der numerischen Genauigkeit und damit eine Verringerung der maximal möglichen Zeitschrittweite.

FALL II: WÄRMEBRÜCKE

Ein klassisches lineares Problem mit inhomogenen Materialeigenschaften wurde als zweiter Anwendungsfall untersucht. Die Simulation einer Wärmebrücke ist gut geeignet, um die Problematik unstetiger Eigenschaften zu veranschaulichen. Gewählt wurde ein Detail einer Wand aus einem Beton- und Isolationsschichtaufbau, in die ein dünnes Aluminiumblech integriert ist (Abbildung 4).

Betrachtet wurde ein rein thermisches Problem bei einer homogenen Starttemperatur von 10°C. Die Außentemperatur wurde konstant bei 0°C gehalten, die Innentemperatur bei 20°C. Es wurden 6 Stunden simuliert, bis die Ausbildung eines stationären Temperaturprofils erfolgte. Es wurde eine räumliche Diskretisierung von ungefähr 100x100 Finite-Volumen-Elementen gewählt. Im Gegensatz zum vorangegangenen Fall wurde Gitter mit irregulären Elementbreiten verwendet, um die Materialgrenzen ausreichend genau aufzulösen.

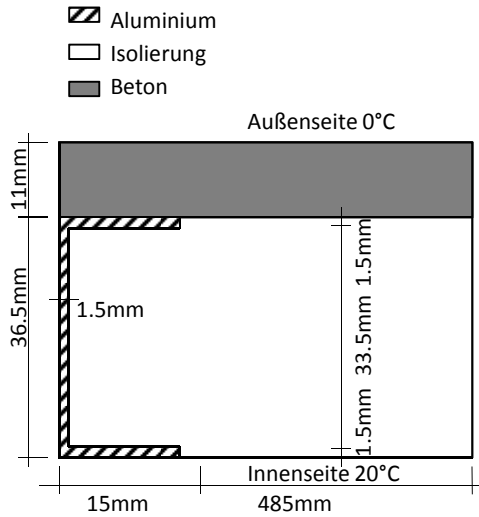


Abbildung 4 Konstruktion Wärmebrücke

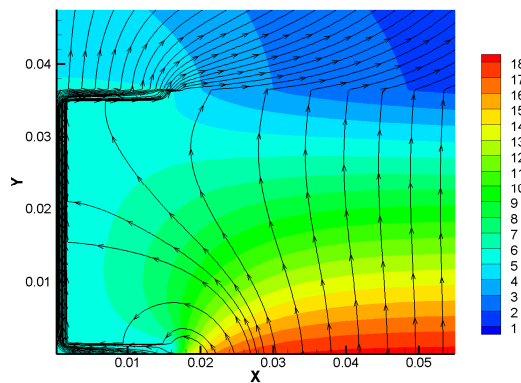


Abbildung 5 Temperatur [°C] und Wärmestrom, Realzeit 6h

Für diesen Simulationstyp bildet das implizite Euler-Verfahren mit LU-Faktorisierung und direktem Gleichungslösungsverfahren einen guten Kandidaten. Aufgrund der Linearität der Wärmetransportgleichung und ihrer Randbedingungen ist nur eine geringe Zahl von Matrizenassemblierungen erforderlich. Nach 11 Sekunden Simulationszeit wurde ein numerisch akkurates Ergebnis für die stationäre Lösung und die instationären Übergangszustände erzielt.

 Tabelle 2
 Simulationsverlauf

| METHODE | RECHEN-ZEIT | Δt_{\min} [s] |
|--------------------------------------|-------------|-----------------------|
| Euler implizit | 11 s | 290 |
| ADI | 1,6 h | 0.12 |
| GMRES, ADI(0.5) - Vorkonditionierer | 23 min | 29 |
| GMRES, ADI(0.001)- Vorkonditionierer | 36 s | 290 |

Die Simulationsgeschwindigkeit des ADI-Verfahrens hingegen bricht aufgrund hoher numerischer Fehler und damit verbundenen geringen Zeitschrittweiten zusammen. Probleme der numerischen Genauigkeit können anhand des Verlaufes der Wärmestromdichten erklärt werden: das Aluminiumblech bildet den Träger der Wärmeleitung im Inneren des Materials und bewirkt aufgrund seiner Biegung eine starke Auslenkung der Wärmeströme. Speziell an den Grenzen der einzelnen Materialschichten bildet sich eine hohe Rotation der Wärmeströme aus. Diese Rotationsterme sind eng mit Mischableitungen verbunden und führen zu unkontrolliert großen numerischen Fehlern des ADI-Verfahrens (vgl. Paepcke et al., 2011).

Für das GMRES-Verfahren erweist sich das ADI mit dem Standardparameter $\omega = 0.5$ erwartungsgemäß als ungünstiger Vorkonditionierer. Das Krylov-Unterraumverfahren verbessert die erzeugten Simulationsergebnisse, konvergiert jedoch innerhalb der Grenze von 100 Iterationen nicht vollständig. Bei Konvergenzfehlern des GMRES-Verfahrens reagiert der Implizite Euler mit einer Reduktion der Zeitschrittweite. Daher wird die Zeitschrittgröße des regulären Impliziten Euler-Verfahrens nicht erreicht.

Eine verbesserte Parametrisierung erhöht die Güte des ADI-Vorkonditionierers. Gleichung (25) identifiziert den Fehlerterm $-\Delta t^2 \omega A_x^m A_y^m$. Für die Wärmeleitungsgleichung ergeben

$$A_y T = -\frac{\partial}{\partial y} \left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \quad (26)$$

und

$$A_x A_y T = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \left(-\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right) \quad (27)$$

Folglich wirkt ω direkt auf die Größenordnung der Approximationsfehler durch Mischableitungen und damit rotationsbehaftete Wärmeströme. Die Wahl von $\omega = 0.001$ verbessert die Kondition der Lösungsmatrix entscheidend und führt zu einem ähnlichen Simulationsverlauf wie bei der klassischen Impliziten Euler-Verfahrensvariante.

ZUSAMMENFASSUNG

Das Alternating-Direction-Implicit-Verfahren bietet gegenüber herkömmlichen Zeitintegrationsmethoden Vorteile bezüglich der Rechengeschwindigkeit und Stabilität bei *homogenen* Materialeigenschaften. Die Block-Implementierung erlaubt eine stabile Behandlung nichtlinearer Kopplungsterme, wie sie in den Wärme-Feuchttransportgleichungen auftreten. Jedoch können starke Unstetigkeiten der Materialparameter bis zum Versagen dieser numerischen Methode führen. Daher ist das direkte ADI-Verfahren als *universelle Methode* in der Bauteilsimulation *ungeeignet*.

Die Kombination einer Impliziten Euler-Zeitintegration mit Krylov-Unterraum-Verfahren zur Lösung der linearen Gleichungssysteme erlaubt die Verwendung von ADI-Verfahren als Vorkonditionierer. Durch geeignete Parametrisierung kann sowohl im nichtlinearen Fall wie auch bei unstetigen Materialparametern eine hohe Simulationsgeschwindigkeit erzielt werden. Insbesondere für mehrdimensionale Probleme großer Dimension wird diese Strategie als äußerst erfolgversprechend gewertet. Die Bestimmung günstiger Parametersätze entscheidet jedoch essentiell über den Erfolg dieser Lösungsmethode. Die generelle Anwendbarkeit hängt davon ab, inwiefern eine automatisierte Bestimmung des Parameters ω , zum Beispiel durch Schätzung von Eigenwerten, unter vertretbarem Rechenaufwand möglich ist. Als alternative Strategie wird in der Literatur der Block-ADI-Vorkonditionierer für streifenförmige Gebiete höherer Elementbreite vorgeschlagen (siehe z.B. Ma et al., 1993).

LITERATUR

- Craig I.J.D., Sneyd A.D. 1988. An Alternating-Direction Implicit Scheme for Parabolic Equations with Mixed Derivatives, *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 16, No. 4, pp. 341-350.
- Celia M.A., Pinder G.F. 1985. An Analysis of Alternating-Direction Methods for Parabolic Equations, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, Vol. 1, pp. 57-70.
- Deghan M., Molavi-Arabshahi S.M. 2007. Comparison of Preconditioning Techniques for Solving Linear Systems arising from the Fourth Order Approximation of the Three-Dimensional Elliptic equation, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 184, pp. 156-172.
- Douglas Jr. J. 1955. On the Numerical Integration $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial u}{\partial t}$ by Implicit Methods, Vol. 3, No.1, pp. 42-65.
- Douglas Jr. J., Gunn J.E. 1964. A General Formulation of Alternating Direction Methods, *Numerische Mathematik*, Vol. 6, No. 4, pp. 428-453.
- Farago I., Karatson J. 2002. *Numerical Solution of Nonlinear Elliptic Problems Via Preconditioning Operators: Theory and Applications*, Nova Science Publishers, New York.
- Grunewald J. 1997. *Diffusiver und konvektiver Stoff- und Energietransport*, Ph.D thesis, Dresden University of Technology.
- Hayes L., Pinder G.F., Celia M.A. 1981. Alternating-Direction Collocation for Rectangular Regions, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 27, pp. 265-277.
- McKee S. 1970. Alternating Direction Methods for Parabolic Equations in Two and Three Space Dimensions with Mixed Derivatives, *The Computer Journal*, Vol. 13, pp. 81-86.
- Ma S., Saad Y. 1993. Block-ADI Preconditioners for Solving Sparse Non-Symmetric Linear Systems of Equations, *Numerical Linear Algebra*, Walter de Gruyter & Co. KG, pp. 165-178.
- Meister A. 2008. *Numerik linearer Gleichungssysteme*, Vieweg & Sohn Verlag, Wiesbaden.
- Nicolai A. 2008. *Modeling and Numerical Simulation of Salt Transport and Phase Transitions in Unsaturated Porous Building Materials*, Ph.D thesis, Dresden University of Technology.
- Peaceman D.W., Rachford Jr. H.H. 1955. The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 3, No. 1, pp. 28-41.
- Paepcke A., Nicolai A., Grunewald J. 2011. Application of ADI Splitting Methods to Two-Dimensional Building Envelope System Solvers, *Proceedings of the 9th Nordic Symposium on Building Physics*, Tampere, Finland.
- Saad Y. 2003. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.
- Thibault J. 1985. Comparison of Nine Three-Dimensional Numerical Methods for the Solution of the Heat Diffusion Equation, *Numerical Heat Transfer: An International Journal of Computation and Methodology*, Vol. 8, pp. 281-298.