

*****INTEGRATION OF AN ANISOTROPIC MATERIAL MODEL INTO THE HYGROTHERMAL TRANSPORT SIMULATION FRAMEWORK DELPHIN

Stefan Vogelsang

Institut für Bauklimatik, Technische Universität Dresden, Dresden, Deutschland

KURZFASSUNG

Neueste Untersuchungen zu anisotropen Materialeigenschaften fanden bisher noch keinen Eingang in die Entwicklung von Simulatoren für hygrothermischen Transportprozesse innerhalb poröser Medien. Diese Arbeit beschreibt ein physikalisches Modell, die zugehörige Herleitung sowie eine Implementierung für das Delphin Löser Framework. Es wird eine Lösung favorisiert, welche die arbeitsintensiven Berechnungsschritte aus dem eigentlichen Arbeitszyklus des Löser in dessen Initialisierungsphase verschiebt. Drei akademische Beispiele wurden mit dem Ziel der Validierung der Resultate des Löser sowie zur Evaluierung der anisotropen Performance erstellt und simuliert. Die Ergebnisse der Simulationen werden unter dem Gesichtspunkt mathematische/physikalische Einfluss anisotroper Materialeigenschaften auf Simulationsergebnisse diskutiert.

ABSTRACT

Recent research was conducted on anisotropic material properties, but rather few findings gained influence on development of transient simulations for heat, air and matter transport in porous media. This paper describes a physical model, its corresponding workload assumption, and an implementation of anisotropy for the Delphin Solver Framework, emphasizing a solution that pulls anisotropy-related mapping-computation-effort out of an actual solution step into the initialisation phase of a solver run. Three academic examples targeting validation as well as evaluation of isotropic and anisotropic solvers were executed. These results are discussed taking into account a mathematical and physical workload distribution evaluation executed during each solver run. Finally a first evaluation of the influence of anisotropic material functions is performed.

EINLEITUNG

Die Vorhersage von Schäden an Holzbalkenköpfen wird derzeit durch Simulation physikalischer Modelle vorangetrieben. Hierbei bedient sich die

Wissenschaft oft der Mittel einer kontinuumsphysikalischen Beschreibung von Erhaltungszuständen durch gekoppelte Systeme partieller Differentialgleichungen. Bei der Implementierung des Simulationsframeworks Delphin (Nicolai und Zhang (2007), Nicolai (2011)) wird diese Kontinuumsphysik durch die Definition eines repräsentativen Elementarvolumens (REV) Whitaker (1969), Bear and Bachmat (1992), Whitaker (1986) für poröse Medien (Baustoffe) ermöglicht. Grunewald (1997) und Nicolai (2007) definierten die wesentlichen physikalischen Erhaltungsgleichungen für den hygrothermischen sowie Salz-Transport. Darüber hinaus wurde die größte untere Schranke (Infimum) abhängig vom Porenradienspektrum als Zwangsbedingungen für die Größe des REV definiert. Nach der Einführung von ortsfesten Kontrollvolumen durch den Schritt der Diskretisierung liegt das zu simulierende Problem als System von gewöhnlichen Differentialgleichungen vor. Abbildung 1 stellt einen Weg zur Lösung von Systemen gekoppelter Differentialgleichungen dar. Dies entspricht dem im Simulationsframework Delphin gewählten Vorgehen.

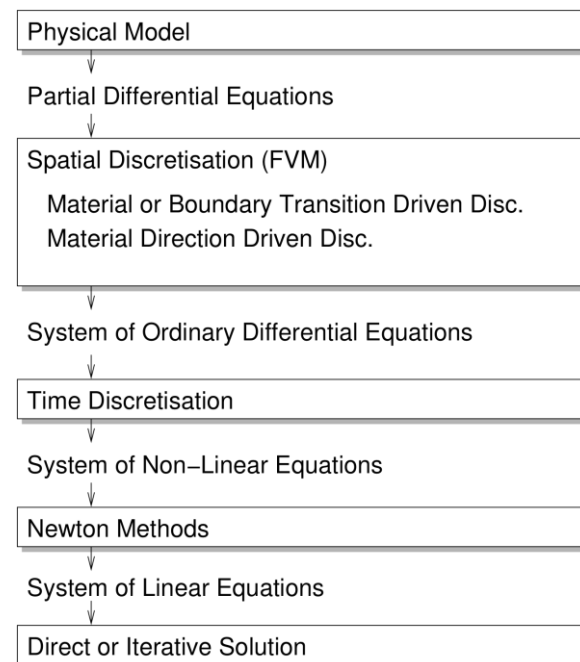


Abbildung 1 Struktureller Lösungsansatz

Trotz umfangreicher wissenschaftlicher Arbeiten (Zillig (2009), Segerholm (2007), Siau (1984), Krabbenhoft (2003), u.a.) finden anisotrope Materialeigenschaften wie sie bei Holz oder Sandstein zu finden sind, bisher keine Anwendung in bekannten thermischen bzw. hygrothermischen Transportsimulationssystemen für poröse Medien. Diese Publikation stellt eine entsprechende hygrothermische Modellierung und Umsetzung der Simulation von anisotropen Materialeigenschaften für Delphin vor.

METHODE

Anisotropie von Materialeigenschaften liegt vor, wenn ein Stoff für unterschiedliche Raumachsen eines Materialbezugssystems durch unterschiedliche Ausprägungen einer Eigenschaft charakterisiert wird. Als Materialbezugssysteme kommen kartesische (z.B.: im Fall von Sandstein) oder auch dreidimensional zylindrische (z.B. im Fall von Holz) in Frage.

Da hygrothermische Simulationen üblicherweise im n-dimensionalen kartesischen Bezugssystem arbeiten, ist zur Betrachtung von Anisotropie ein Transformationsalgorithmus notwendig, welcher die achsabhängigen Materialeigenschaften vom Materialbezugssystem in das Simulationsbezugssystem überführt.

Für eine entweder orts- oder volumengebundene Simulation muss für jeden Punkt bzw. jedes Volumen eine eindeutige Zuordnung des Materials und seiner Ausrichtung (des Materialbezugssystems) möglich sein. Hierbei sind sowohl triviale, Material und Ausrichtung verhalten sich 1 zu 1, als auch fein aufgelöste positionsabhängige Fälle (gemessene) anzutreffen. Die Transformation der Materialkennwerte ins Bezugssystem der Simulation erfolgt während der Simulation automatisch mittels in der Initialisierungsphase voraus berechneter Rotationsmatrizen.

Im Unterschied zur isotropen Simulation, muss bei der anisotropen Simulation für alle n Dimensionen des Simulationsraumes eine separate Berechnung der Flussgrößen erfolgen. Der Aufwand steigt somit um die Anzahl der Dimensionen im Materialbezugssystem. Sollte sich die Materialeigenschaft auf einer Achse als richtungsabhängig erweisen (z.B.: Feuchtediode) erweisen, so muss eine weitere Steigerung des Aufwandes durch Übergang zu Tensoren in Kauf genommen werden.

Trivialer Weise sind von Anisotropie nur Transporteigenschaften und somit die Berechnung aus deren treibenden Potentialen sowie Randbedingungen betroffen.

ERWEITERUNG DES MATERIALFORMATES

Um Anisotropie von Materialien zu erfassen wurde zunächst ein generisches Materialformat erstellt, das in der Lage ist, alle isotropen und anisotropen Eigenschaften eines Materials aufzunehmen. Die dort erfassten Daten müssen eindeutig den Achsen des Materialbezugssystems zuordenbar sein. Zu diesem Zweck wurden drei freie Materialachsen u , v , w definiert. Frei bedeutet, dass bei makroskopischer Betrachtung des Materials keinerlei Annahmen über den geometrischen Zusammenhang der Materialachsen untereinander im Materialformat vorliegen. Natürlich muss die materialspezifische Identifikation der Achsen des jeweiligen Bezugssystems gewährleistet werden.

Bei der messtechnischen Erfassung von isotropen Materialparametern an anisotropen Materialproben entstehen verfahrenstechnisch bedingt Fehler. Geeignete Vorrangregeln bei der Auswahl der zur Bestimmung zulässigen Materialmessungen verhindern das Einwirken dieser Fehler auf den Algorithmus zur Bestimmung der isotropen Materialeigenschaften einer anisotropen Materialdatei.

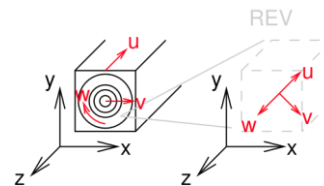


Abbildung 2 Ambivalenz der Bezugssysteme am Beispiel von Holz

Beim Übergang von der makroskopischen Ebene hin zum REV zeigt sich der ambivalente Charakter des Materialbezugssystems (siehe dazu Abbildung 2). Im Folgenden seien die vorliegenden Materialstrukturen durch Kugel oder Zylinderform abstrahierbar. Für alle derartigen Geometrien stehen die Basisvektoren, folglich die möglichen unabhängigen Transportwege, an jedem Punkt stets senkrecht aufeinander. Zum Beispiel bei Holz - einem Zylinder - in radialer Richtung, also von innen nach außen, die tangential Richtung entlang der Oberfläche und in Wuchsrichtung die longitudinale Richtung. Allerdings verändern sich aus Sicht des kartesischen Simulationsbezugssystems abhängig vom Ort des REV die Basisrichtungen. Die mathematische Abbildung von Materialbezugssystem und Simulationsbezugssystem ist somit ortsabhängig. Es wird die Eindeutigkeitsannahme getroffen: Ein REV muss so klein sein, dass seine Krümmung vernachlässigbar ist, es also durch eine Menge von Basisvektoren (Radial, Tangential, Höhe) beschreibbar ist. Für das allgemeine Materialformat

müssen die Achsen u , v und w innerhalb eines REV als orthogonal angesehen werden können. Diese Annahme erweitert die von Grunewald (1997) aufgestellten Randbedingungen unter denen REV definiert werden können um die Forderung: Die Größe eines REV darf nie eine obere Schranke überschreiten welche die Orthogonalitätsannahme verletzt. Für alle Basistransportrichtungen eines Materials muss Konstanz über das gesamte Material gelten.

ABBILDUNG DER MATERIALTRANSPORTKOEFFIZIENTEN

Die Bestimmung der ortsgebundenen Materialeigenschaften ist durch eine Abbildung des Materialbezugssystems auf das Simulationsbezugssystem zu gewährleisten. Dies entspricht einer Koordinatentransformation mittels Rotationsmatrizen. Für mehr Übersichtlichkeit und da Materialeigenschaften nicht skaliert werden sollen, wurde im folgenden auf die homogene Komponente verzichtet. Abbildung 3 stellt die allgemeine Rotation eines Punktes P um den Winkel γ dar.

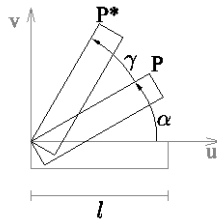


Abbildung 3 Rotation des Punktes P

Für die Ausgangsposition bzw. Endposition lassen sich ableiten:

$$\begin{aligned} u_p &= l \cos \alpha \\ v_p &= l \sin \alpha \\ u_{p^*} &= l \cos(\alpha + \gamma) \\ v_{p^*} &= l \sin(\alpha + \gamma) \end{aligned} \quad (1)$$

Die w -Koordinate bleibt unverändert. Der Zusammenhang zwischen (u_p, v_p) und (u_{p^*}, v_{p^*}) lässt sich erkennen, sobald auf die Additionstheoreme der trigonometrischen Funktionen zurückgegriffen wird. So lassen sich die Gleichungen für u_{p^*} und v_{p^*} auch anders schreiben:

$$\begin{aligned} u_{p^*} &= l \cos(\alpha + \gamma) \\ &= l(\cos \alpha \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma) \\ v_{p^*} &= l \sin(\alpha + \gamma) \\ &= l(\sin \alpha \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma) \end{aligned} \quad (2)$$

Die Ausgangsposition (u_p, v_p) kann nun gemäß Gleichungen (1) in die gefundene Gleichung (2) eingesetzt werden, wodurch die unbekanntes Größen herausfallen. Die Rotationsgleichung für eine Drehung um die w -Achse ergibt sich in Matrixschreibweise zu:

$$R_w = \begin{bmatrix} \cos \beta & -\sin \beta & 0 \\ \sin \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

Äquivalent lassen sich die Rotationsachsen um u und v finden:

$$\begin{aligned} R_u &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta & -\sin \beta \\ 0 & \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix} \\ R_v &= \begin{bmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

Die Superpositionierung eines Materialdatensatzes im Raum lässt sich durch eine Transformation realisieren. Dabei wird ein Materialbezugssystem (MB) durch die schrittweise Ausführung von Einzeltransformationen gedanklich deckungsgleich zum Simulationsbezugssystem (SB) gebracht. Soll jetzt ein Materialparameter in diesem SB definiert werden, bildet man dazu den Parameter zuerst im MB ab und multipliziert dann die Funktionswerte aller gewünschten Informationen mit den einzelnen Transformationsmatrizen, die zur Positionierung des MK über das SB benötigt wurden. Als Ergebnis erhält man die transformierten Materialparameter des Materials, kann dieses also mit der korrekten Lage und Orientierung im Raum abbilden (siehe Abbildung 4).

Geschickter Weise erfolgt die Berechnung der Rotationsmatrizen für jedes REV im Voraus. Damit entfallen teure Auswertungen der Sinus- und Kosinusfunktionen während der Simulationszeit. Der zusätzliche Aufwand der eigentlichen Transformation beträgt damit lediglich 6 Additionen und 9 Multiplikationen pro transformierten Materialparameter. Darüber hinaus sind auch in der Praxis notwendige Projektionen, wie zum Beispiel Einsatz eines zweidimensionalen Materials im dreidimensionalen Simulationsraum durch geeignet gewählte R_m abzubilden ist. Zum Beispiel bildet:

$$\begin{aligned} \bar{p}_{xyz} &= R_T \bar{p}_{uvw} \\ R_T &= R_u R_v R_w \\ R_T &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta_u & -\sin \beta_u \\ 0 & \sin \beta_u & \cos \beta_u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta_v & 0 & -\sin \beta_v \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta_v & 0 & \cos \beta_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta_w & -\sin \beta_w & 0 \\ \sin \beta_w & \cos \beta_w & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos \beta_v & 0 & -\sin \beta_v \\ -\sin \beta_u \sin \beta_v & \cos \beta_u & -\sin \beta_u \cos \beta_v \\ \cos \beta_u \sin \beta_v & \sin \beta_u & \cos \beta_u \cos \beta_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta_w & -\sin \beta_w & 0 \\ \sin \beta_w & \cos \beta_w & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos \beta_v \cos \beta_w & \cos \beta_v - \sin \beta_w & -\sin \beta_v \\ -\sin \beta_u \sin \beta_v \cos \beta_w + \cos \beta_u \sin \beta_w & \sin \beta_u \sin \beta_v \sin \beta_w + \cos \beta_u \cos \beta_w & -\sin \beta_u \cos \beta_v \\ \cos \beta_u \sin \beta_v \cos \beta_w + \sin \beta_u \sin \beta_w & \cos \beta_u \sin \beta_v - \sin \beta_w + \sin \beta_u \cos \beta_w & \cos \beta_u \cos \beta_v \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Abbildung 4 Transformationsmatrizen

$$R_m = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

einen Materialparameter bestimmt für die U-Dimension auf die Komponenten u und v so- wie in V-Dimension auf die Komponente w ab. Durch Anwendung einer Matrizenmultiplikation im Preprocessing-Schritt der Simulation wird auch diese Information durch eine einzige Rotationsmatrix R_R realisiert:

$$\begin{aligned} \bar{p}_{xyz} &= R_m R_T \bar{p}_{uvw} \\ \bar{p}_{xyz} &= R_R \bar{p}_{uvw} \end{aligned} \quad (6)$$

Rotationsmatrizen sind in der Projektstruktur im vereinfachten Euler-Matrix-Format abgelegt. Dabei entspricht [1;0,0.5,-0.5;0,0.5,0.5] der Matrix:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & -0.5 \\ 0 & 0.5 & 0.5 \end{bmatrix}.$$

ERGEBNISSE

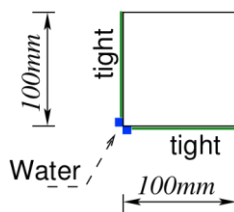


Abbildung 5 Experiment Design

Als erstes Ergebnis liegt eine Implementierung eines anisotropen Simulationssystems in C++ vor. Abbildung 5 zeigt den simulierten Aufsaugversuch als akademisches Experiment. Die Wasserkontaktbedingung ist nur an der linken und unteren Seite des REV der linken unteren Ecke des Probenkörpers definiert. Die Diskretisierung ist äquidistant mit 1600 Elementen, wobei die restliche untere bzw. linke Seite der Konstruktion sowohl als wasser- als auch als dampfdicht definiert wurden. Die anisotrop bestimmten Sandsteine Sander, Karlshafen, Schleerith und Arholzen sowie die anisotrop bestimmten Hölzer Fichte, Eiche und Buche dienen als Materialien. Die Simulationszeit eines jeden Experimentes betrug 24h, wobei die maximal benötigte Rechenzeit bei ca. 4 Minuten lag. Die prinzipielle Funktionalität des anisotropen Löser wurde mittels Vergleichsrechnungen des isotropen Falles im anisotropen Modus nachgewiesen. Die erzielten Ergebnisse für anisotrope Simulationen sind den Abbildungen 6 und 7 zu entnehmen. Für alle Sandsteine in Abbildung 6 liegt die X-Achse parallel zur Schichtung, die Y-Achse Lotrecht dazu. Für alle Hölzer in Abbildung 7 entsprechen die X-Achse der Wuchsrichtung und die Y-Achse der dazu radialen Transportrichtung.

Besonders auffällig ist der abnehmende Einfluss der Anisotropie je schneller ein Sandstein saugt. Es liegt nahe, experimentell eine Grenze für anisotrope Materialklassen zu bestimmen, welche die Anisotropieerweiterung im Solver abschaltet bzw. das als anisotrop bestimmte Material zu einem isotropen nach der Materialfunktionsgenerierung zu Gunsten höherer Rechenperformance zurückstufte. Es leitet sich hier die Fragestellungen ab: (1) Ab wann besitzt ein als anisotrop vermutetes/bekanntes Material genügend abweichende Materialkennwerte für die relevante Beeinflussung von Simulationsergebnissen? (2.) Ab welchem Grenzwert ist "Anisotropie" im

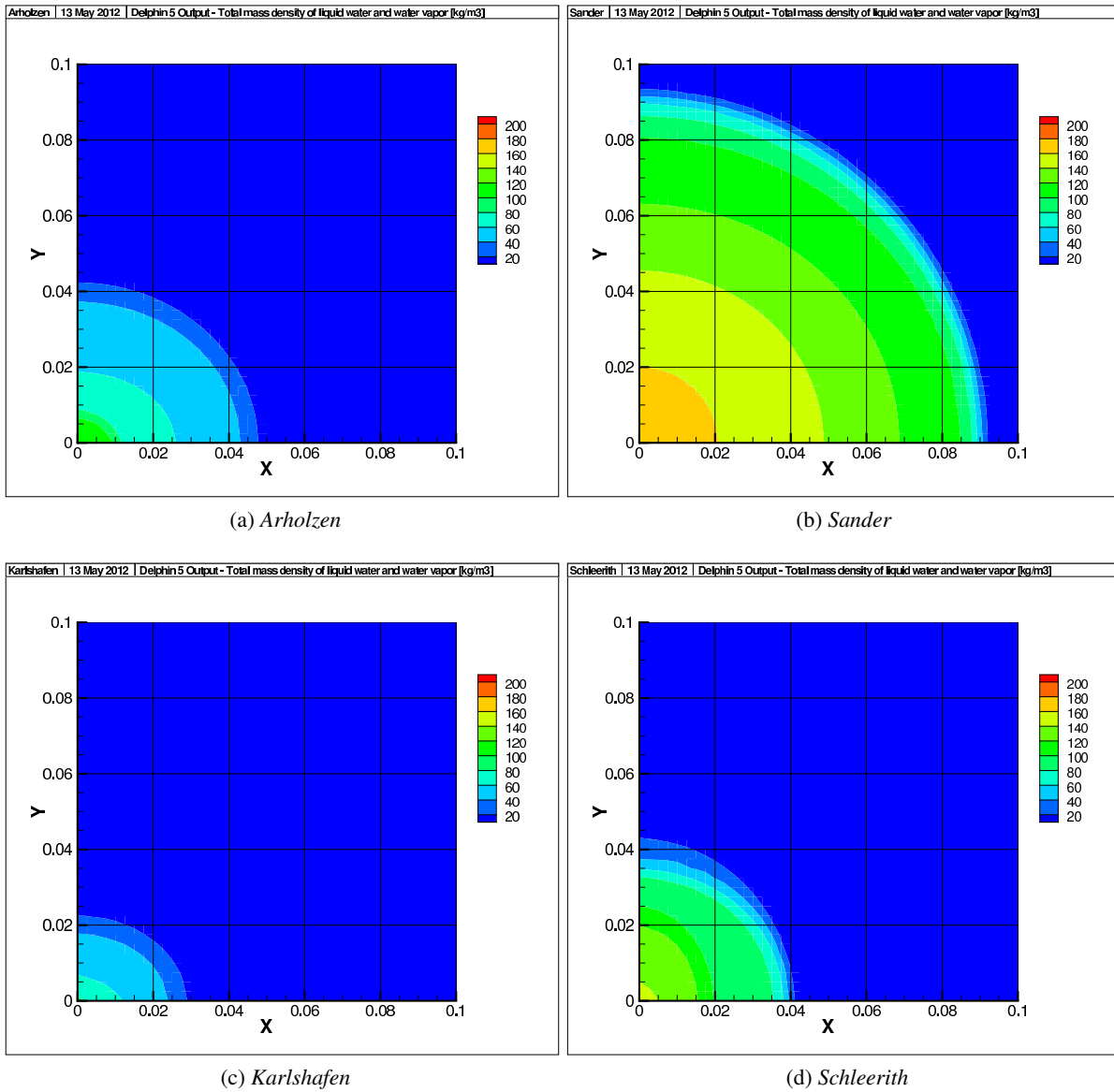


Abbildung 6: Vergleich des Aufsaugexperiments für anisotrope Sandsteine

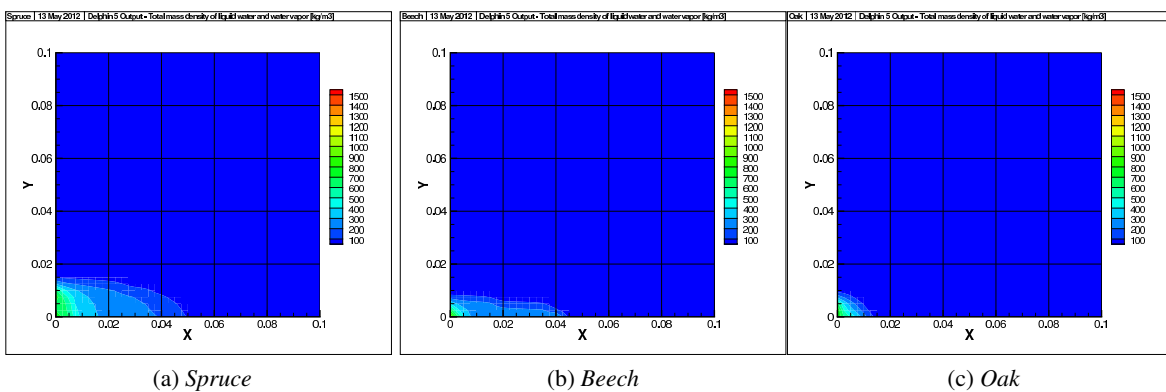


Abbildung 7: Vergleich des Aufsaugexperiments für anisotrope Hölzer

Sinne der Simulation definiert? (3) Unter welchen Bedingungen kann diese zu Gunsten schnellerer Berechnungen ignoriert werden?

Zur Beantwortung dieser Fragestellungen sollten entsprechende Verdunstungsexperimente zur Bestätigung herangezogen werden. Die stark unterschiedlichen Ergebnisse für Hölzer legen nahe, diese in Zukunft nur anisotrop zu simulieren, da ein gravierenderen Einfluss der Transporteigenschaften insbesondere bei zeitlich variablen Randbedingungen auf zukünftige Simulationsergebnisse abzusehen ist.

LITERATUR

- Bear and Bachmat (1992) J. Bear and Y. Bachmat. Introduction to modeling of transport phenomena in porous media. Kluwer Academic Publishers, 1992.
- Grunewald (1997) John Grunewald. Diffusiver und konvektiver Stoff- und Energietransport in kapillarporösen Baustoffen. PhD thesis, Technische Universität Dresden, 01062 Dresden, September 1997.
- Krabbenhof (2003) Kristian Krabbenhof. Moisture Transport in Wood - A Study of Physical-Mathematical Models and their Numerical Implementation. PhD thesis, Department of Civil Engineering, Technical University of Denmark, Denmark, 2003.
- Nicolai (2007) Andreas Nicolai. Modeling and Numerical Simulation of Salt Transport and Phase Transitions in Unsaturated Porous Building Materials. PhD thesis, Syracuse University, NY, USA, December 2007. Printed at Institute of Building Climatology - Dresden University of Technology, Dresden, 2008.
- Nicolai (2011) Andreas Nicolai. Towards a semi-generic simulation framework for mass and energy transport in porous materials. In K. Salminen J. Vinha, J. Pirronen, editor, 9th Nordic Symposium on Building Physics - NSB 2011, volume 2, page 559ff., May 2011. ISBN: 978-952-15-2573-5.
- Nicolai und Zhang (2007) Grunewald J., Nicolai A. and Zhang J.S. Recent improvements in ham simulation tools: Delphin 5 / champs-bes. In Conference Proceedings of 12th Symposium of Building Physics, pages 866–876, 2007.
- Segerholm (2007) Ingemar Segerholm. Moisture transport processes in Scots pine - Anomalous capillary suction. Nonisothermal diffusion. PhD thesis, Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden, December 2007.
- Siau (1984) John F. Siau. Transport processes in wood. Springer series in wood science. Berlin, New York: Springer-Verlag, 1984.
- Whitaker (1969) Stephen Whitaker. Advances in theory on fluid motion in porous media. In Flow Through Porous Media Symposium, volume 61, page 14ff., December 1969. Industrial and Engineering Chemistry.
- Whitaker (1986) Stephen Whitaker. Flow in Porous Media I: A Theoretical Derivation of Darcy's Law. D. Reidel Publishing Company, 1986.
- Zillig (2009) Wolfgang Zillig. Moisture Transport in wood using a multiscale approach. PhD thesis, Katholieke Universiteit Leuven, Kasteelpark Arenberg 40, B-3001 Leuven, May 2009.