

Lehrstuhl für Bauinformatik
Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen
Technische Universität München

Gebäudemodell-basierte Simulation von Raumluftrömungen

Christoph Alban van Treeck

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktor-Ingenieurs

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dr.-Ing. habil. G. H. Müller

Prüfer der Dissertation:

1. Univ.-Prof. Dr. rer.nat. E. Rank
2. Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. M. Krafczyk,
Technische Universität Braunschweig

Die Dissertation wurde am 03.05.2004 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen am 30.06.2004 angenommen.

Für Kerstin und Alicia.

Zusammenfassung

Vorliegende Arbeit diskutiert Simulationstechniken zur quantitativen Bestimmung und Bewertung von Luftströmungen in Innenräumen und die Anbindung dieser Techniken an ein Gebäudemodell. Raumluftrömungen werden in ihrem Erscheinungsbild anhand typischer Konfigurationen der Gebäudehülle charakterisiert. Es werden ihre Auswirkungen auf den Energiehaushalt eines Gebäudes und auf das thermische Behaglichkeitsempfinden der Nutzer erläutert. Zur numerischen Simulation des transienten thermischen Gebäudeverhaltens wird ein Finite-Volumen Ansatz zur Bilanzierung der instationären Wärmeströme durch die Gebäudestruktur beschrieben. Durch die Diskretisierung dynamischer Mehrzonenmodelle ist das Auflösungsvermögen bezüglich Raumluftrömungen dabei begrenzt, da ein oder wenige Raumlufttemperaturknoten pro Zone zur Bestimmung der durch Druckdifferenzen induzierten Enthalpieströme verwendet werden. In bestimmten Fällen ist daher eine hochauflösende Simulation mit CFD-Verfahren nötig, um lokale Strömungsvorgänge analysieren zu können, wie anhand der Vorstudie einer gekoppelten Simulation gezeigt wird. Der Einsatz der entwickelten Kopplungsschnittstelle wird zunächst anhand einer Kopplung zwischen einem kommerziellen CFD-System und einem thermischen Mehrzonen-Gebäudemodell demonstriert. Als Referenzmodell dient ein Gebäude mit Atrium. Die Ergebnisse werden mit vorliegenden Messdaten verglichen.

Die Anbindung von Simulationsverfahren an ein Bauwerksmodell wird durch die verschiedenen Modelle hinsichtlich Planung und Berechnung erschwert, die die unterschiedlichen Sichtweisen der am Planungsprozess Beteiligten implizieren. Zur Analyse und Interpretation der geometrischen, topologischen und semantischen Daten eines Bauwerksproduktmodells wird deshalb ein graphentheoretischer Ansatz vorgestellt. Zur Ableitung eines Raummodells werden ein Bauteilgraph, ein Raumflächengraph, ein Raumgraph und ein relationaler Objektgraph als Hilfsmittel identifiziert und Algorithmen zur Ableitung dieser Relationen entwickelt. Das Raummodell gestattet die semantische Identifizierung von Objekttypen und die Ableitung eines Objekt- und eines Oberflächenmodells, womit die Voraussetzung zur Kopplung zwischen dimensionsreduzierten und detaillierten Berechnungsverfahren des thermischen Gebäudeverhaltens gegeben ist. Die Anwendung des Verfahrens wird anhand der Analyse und geometrischen Diskretisierung eines komplexen Referenzmodells demonstriert.

Zur Simulation konvektiver Raumluftrömungen wird das Gitter-Boltzmann Verfahren eingesetzt. Es werden dessen Erweiterungen hinsichtlich Energieerhaltung und eines Large-Eddy Feinstruktur-Turbulenzmodells diskutiert. Validierungsrechnungen des verwendeten hybriden thermischen Modells zeigen gute Übereinstimmungen mit Werten aus der Literatur. Anhand eines komplexen dreidimensionalen Beispiels der Innenraumluftrömung in einem Atrium wird die prototypische Umsetzung des Verfahrens aufgezeigt.

Abstract

In this thesis, simulation techniques are discussed with respect to the quantification and evaluation of indoor air flows and ways of linking these techniques to a building model. The appearance of the indoor air flows is characterized by means of typical configurations of the outer shell of the building. The impact of air flows is depicted with respect to building ener-

gy consumption and thermal comfort of the user. In order to simulate the transient thermal behaviour of a building numerically, a finite volume method is described for balancing heat gains through the building's fabric. In thermal multizone models, enthalpy flows caused by pressure differences are usually computed using a single node or just a few nodes per zone. As this discretization technique restricts the spatial resolution of indoor air flows, a more detailed high-resolution CFD simulation is required in some cases to resolve local flow patterns, as shown in the preliminary study of a coupled simulation. The utilization of the coupling interface developed for this purpose is demonstrated by a coupled simulation between a commercial CFD system and a thermal multizone building model of a sample building with an inner courtyard. The results are compared to measurement data.

The process of linking numerical approaches to building models is hampered by the range of different models put forward for planning and calculation purposes which reflect the conflicting views of the people involved in the design process. An *ansatz* based on graph theory is accordingly used to interpret the geometrical, topological and semantical data of a building product model. In order to derive a room model, a structural component graph, a graph of room surfaces, a room graph and a relational object graph are identified as aids. Algorithms are developed to derive these relations. The room model serves to identify objects semantically and derive both an object model and a surface model. This serves as a precondition for coupling dimensionally reduced and detailed approaches with respect to the simulation of thermal building behaviour. The application of the technique presented here is demonstrated by the analysis and discretization of a complex sample model.

The lattice Boltzmann technique is applied to simulate convective air flows. Its extensions are discussed with respect to energy conservation and a Large Eddy subgrid scale turbulence model. Validation computations of the hybrid thermal model employed match the values from the literature well. A complex three-dimensional example based on the indoor air flows within an atrium is used to demonstrate the prototypic implementation of the method.

Vorwort und Dank

Diese Arbeit entstand während meiner mehrjährigen Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter und später wissenschaftlicher Assistent am Lehrstuhl für Bauinformatik der Fakultät für Bauingenieur- und Vermessungswesen an meiner Alma Mater, der Technischen Universität München, und grossteils im Rahmen des von der Bayerischen Forschungstiftung geförderten Projektes SIMFAS. Zielsetzung dieses Projektes ist die 'Kopplung von dynamischer Gebäudesimulation und CFD-Methoden zur Untersuchung des Energiehaushalts und Komforts von Gebäuden basierend auf dem IFC-Produktmodellstandard'.

An erster Stelle möchte ich meiner Familie, d.h. meinen Eltern, Prof. Dr. Peter van Treeck und Dr. Elgin van Treeck-Vaassen, meiner Partnerin Kerstin und unserer Tochter Alicia, für den Rückhalt, Ansporn und die grosse Geduld danken, die sie mir in der Endphase meiner Arbeit entgegenbrachten. Meine Eltern schafften durch ihre ideelle und natürlich auch finanzielle Unterstützung die wesentlichen Voraussetzungen zum Erreichen dieser wissenschaftlichen Qualifikation. Unser gemeinsames Kammlacher Projekt dient mir stets als Quelle für neue Energie. Meiner Mutter möchte ich für das finale Korrekturlesen danken, auch wenn die Materie für Kunsthistoriker bestimmt ungewohnt ist.

Ganz besonders möchte ich mich bei meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr. Ernst Rank, für die Förderung, sein sehr frühes und stetiges Interesse an meiner Arbeit und die grosszügige Unterstützung, die mir als Mitarbeiter zuteil wurde, bedanken. Grosser zeitlicher Druck konnte seine Bereitschaft zu Diskussionen dabei nie wirklich reduzieren. Er wirkte fördernd und lenkend auf die wissenschaftliche Entwicklung ein, indem er es verstand, den Fokus jedes Themas zu schärfen, jedoch ohne jemals grundlegend meine von Anfang an klare Zielvorstellung zu verändern. Dies ermöglichte es mir, die Ziele zu dem gemeinsamen Forschungsantrag des Projektes SIMFAS zu formulieren, dessen Ergebnisse wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit sind. Für die Freiräume und das Vertrauen danke ich an dieser Stelle sehr. Auch hätte ich ohne seinen massiven Ansporn nie die geforderte 'quadratische Konvergenzrate' bei der Anfertigung dieser Arbeit erreicht.

Eine Zeit, von der ich nach wie vor profitiere, ist mein Aufenthalt im Jahre 1997 am Fraunhofer-Institut für solare Energiesysteme (ISE) in Freiburg. Die Richtung, die ich dort mit meiner Diplomarbeit eingeschlagen hatte, hat meine weitere wissenschaftliche Entwicklung nachhaltig beeinflusst. Deshalb, auch wenn das schon viele Jahre her ist, möchte ich Sebastian Herkel und Dr. Karsten Voss nochmals an dieser Stelle als Weggefährten positiv erwähnen.

Zum positiven Gelingen hat auch das angenehme Arbeitsklima am Lehrstuhl beigetragen, das sich unter anderem etwa in unserem gemeinsamen Mittagessen am Mittwoch (MaM) oder der jährlichen Fahrt nach Italien auf unser legendäres Skiseminar äussert. Genannte Umstände machen die Entscheidung, die Tätigkeit am Lehrstuhl nun in der Funktion als Leiter der Gruppe 'Thermische Gebäude- und Strömungssimulation' fortzusetzen, sehr leicht. In diesem Sinne freue ich mich auf mindestens drei weitere Jahre am Lehrstuhl.

Für die Übernahme des Koreferates und die intensive Betreuung meiner Arbeit danke ich Prof. Dr. Manfred Krafczyk. Er war es, der mein Interesse am Umfeld des wissenschaftli-

chen Hochleistungsrechnens geweckt hat und fördernd auf den tiefen Einstieg in das Thema der Strömungsmechanik eingewirkt hat. Anhand seiner zahlreichen Vorarbeiten auf dem Gebiet des Gitter-Boltzmann Verfahrens hat er den Weg zum Ziel gut 'vorkonditioniert', womit (zumindest) der Einstieg in diese Thematik sehr leicht fiel. Auch im Bereich des Arbeitsmanagements konnte ich viel von ihm lernen.

Herrn Prof. Dr. Pierre Lallemand vom Laboratoire ASCI der Université Pairs-Sud danke ich sehr für die Gelegenheit der einwöchigen Zusammenarbeit in Braunschweig, während der ich viel über das thermische Gitter-Boltzmann Verfahren lernen konnte und deren Impulse zur erfolgreichen Realisierung des Prototypen beitrugen.

Mein weiterer Dank gilt allen ehemaligen und gegenwärtigen Kollegen. Besonders hervorheben möchte ich dabei Richard Romberg, der den Grundstein zu der weiter unten beschriebenen Rahmenapplikation gelegt hat, Dr. Jonas Tölke, der mir beim Verständnis zahlreicher numerischer Probleme half und ferner meine Sinne hinsichtlich einer differenziert(er)en Betrachtung erlesener Weine, Kubanischer Zigarren und der Nouvelle Cuisine schärfen konnte, Dominik Scholz, denn ohne die zahlreichen Diskussionen mit ihm wäre das Graphenkapitel einfach nicht das, was es ist, Petra Wenisch für ihre Hilfe beim 'Voxeln' (das ist übrigens nichts unanständiges), bei Andreas Niggel, der mir die enorme Last der (Unix-)Rechnerbetreuung abnahm und bei André Borrmann fürs Lesen. Ferner danke ich den Braunschweiger 'Halb-Kollegen' des Institutes für Computeranwendungen im Bauwesen, Björn Nachtwey und Sebastian Geller für ihre Unterstützung.

Auch der Dezentral-Crew in München und Berlin, insbesondere Dr. Tobias Schrag, Christian Waldhoff und Jörg Rädler gebührt grosser Dank für die gute Zusammenarbeit in der Rolle eines der Industriepartner im Rahmen des Forschungsprojektes SIMFAS, für die zahlreichen Diskussionen und für die Unterstützung, ebenso wie die mir in Berlin stets entgegengebrachte Gastfreundschaft. Dr. Christoph Nytsch-Geusen danke ich für die vielen wertvollen fachlichen Diskussionen und die vielfältige Unterstützung. Unvergessen sind dabei die Konferenzbesuche der 'Building Simulation' in Brasilien und den Niederlanden.

Dr. Gunter Pültz von Müller-BBM danke ich für zahlreiche Fachgespräche und den wertvollen Blick in die Praxis, den man bei numerischen Simulationen nie ausser Acht lassen darf.

Weiterhin sei mein Dank an die zahlreichen Diplomand(inn)en und Hiwis für ihre Zuarbeit gerichtet. Besonders erwähnen möchte ich in diesem Zusammenhang Marcos Manjon Gonzalez, Andreas Lämmle, Iris Halm und Matthias Obermeier.

Schliesslich möchte ich auch Herrn Prof. Dr. Werner, unter dessen Leitung ich damals als studentischer Mitarbeiter begann, für den Erstkontakt mit dem Thema 'Bauinformatik' und die vielen anregenden fachlichen Diskussionen danken. Herrn Fink und Herrn Dr. Katz der Sofistik AG danke ich für die Diskussionen im Bereich geometrischer Algorithmen und Produktmodellierung.

Christoph van Treeck, im April 2004.

treeck@bv.tum.de

Inhaltsverzeichnis

1	Problemstellung und Zielsetzung	1
1.1	Einführung	1
1.2	Ablauf einer thermischen Gebäudesimulation	5
1.3	Zielsetzung der Arbeit	6
1.4	Softwarekonzept der Rahmenapplikation	8
1.5	Gliederung der Arbeit	10
2	Charakterisierung und Approximation von Raumluftrömungen	12
2.1	Einordnung und Charakterisierung	12
2.1.1	Bedeutung der Gebäudehülle	12
2.1.2	Einschalige und doppelschalige Fassadensysteme	14
2.1.3	Verglaste Hallen (Atrien)	16
2.1.4	Sog- und Druckverteilung am Baukörper	18
2.2	Thermische Behaglichkeit	19
2.3	Numerische Approximationsverfahren	22
2.3.1	Statische und dynamische Simulationsverfahren	22
2.3.2	Physikalische Wirkungszusammenhänge	24
2.3.3	Finite-Volumen Formulierung der Wärmestrombilanz	26
2.3.4	Berechnung der Enthalpieströme mit Druckknotennetzwerk	29
2.3.5	Strategien zur partitionierten Lösung	32
2.3.6	Anbindung an eine CFD-Simulation	33
2.4	Vorstudie einer gekoppelten Simulation	35
2.4.1	Verwendete Simulationsprogramme	35
2.4.2	Schnittstelle zur Kopplung: Entwurf und Implementation	36
2.4.3	Auswahl eines Referenzgebäudes mit Atrium	38
2.4.4	Modellbildung	39
2.4.5	Vergleich mit Messdaten	41
2.4.6	Vergleich zwischen Einknoten- und Mehrknoten-Modell	42
2.4.7	Vergleich zwischen Mehrknoten- und CFD-Modell	44
2.4.8	Postprozessing: Komfortanalyse	52
2.5	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	53
3	Gebäudeanalyse und Diskretisierung	54
3.1	Grundlagen	55
3.1.1	Einführung in die Graphentheorie	55
3.1.2	Grundlagen der geometrischen und topologischen Modellierung	63

3.2	Produktmodellierung im Bauwesen	76
3.2.1	Begriffsdefinition	76
3.2.2	STEP – ISO 10303	77
3.2.3	Die Industry Foundation Classes (IFC) – ISO/PAS 16739	77
3.3	Überführung von Produktmodelldaten in ein Volumenmodell	80
3.3.1	Auswahl von ACIS als geometrisches Kernsystem	80
3.3.2	Werkzeuge: Toolboxen	81
3.3.3	Überführung von IFC Daten in ein Volumenmodell	82
3.3.4	Beispiel: Bürogebäude	84
3.4	Graphentheoretische Analyse von Raumtopologie und Gebäudestruktur	85
3.4.1	Problemstellung: Interpretation von Gebäudedaten	85
3.4.2	Definition: Bauteilgraph, Raumflächengraph und Raumgraph	86
3.4.3	Zerlegung in ein Verbindungsmodell	87
3.4.4	Menge der kleinsten geschlossenen B-rep Volumenkörper	92
3.4.5	Komplexes Anwendungsbeispiel zur Zerlegung	104
3.5	Randbedingungen und Diskretisierung	106
3.5.1	Identifizierung von Bauteilen	106
3.5.2	Zonierung	107
3.5.3	Beispiel: Zonierung eines Bürogebäudes mit Atrium	109
3.5.4	Vernetzung und Diskretisierung des Strömungsgebietes	111
3.5.5	Beispiel: Vernetzung und Diskretisierung des Atriums	114
3.6	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	117
4	Numerische Simulation von Raumluftrömungen	118
4.1	Grundlagen der Strömungsmechanik	119
4.1.1	Top-Down versus Bottom-Up	119
4.1.2	Grundgleichungen	119
4.1.3	Dimensionslose Grössen (Ähnlichkeitsgesetze)	122
4.1.4	Turbulenzmodellierung	123
4.1.5	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes Gleichungen (RANS)	124
4.1.6	Large-Eddy Simulation (LES)	125
4.2	Gitter-Boltzmann Verfahren	127
4.2.1	Boltzmann-Gleichung	128
4.2.2	Von der Boltzmann- zur Lattice-Boltzmann Gleichung	131
4.2.3	Generalisierte Lattice-Boltzmann Gleichung	135
4.3	Hybrides thermisches Gitter-Boltzmann Verfahren (HTLBE)	138
4.3.1	Thermische Gitter-Boltzmann Verfahren (TLBE)	138
4.3.2	Hybrides Modell nach Lallemand und Luo	140
4.3.3	Diskretisierung der Energiegleichung	142
4.3.4	Validierung: Freie Konvektionsströmungen	143
4.4	Gitter-Boltzmann Modell für turbulente konvektive Strömungen	152
4.4.1	Feinstruktur-Modell für die turbulenten Scheinspannungen	152
4.4.2	Feinstruktur-Modell für den Wärmestrom	153
4.5	Algorithmus des HTLBE-LES Verfahrens	154
4.6	Komplexes dreidimensionales Anwendungsbeispiel	155
4.7	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen	160

5 Ausblick	162
A Phasenraumdiskretisierung in 3D	165
A.1 Kollokationspunkte des $d3q15$ -Modells	165
A.2 Kollokationspunkte des $d3q19$ -Modells	166
B Parameter des Generalisierten Lattice-Boltzmann Verfahrens in 2D	167
B.1 Transformationsmatrix des $d2q9$ -Modells nach [117]	167
B.2 Gleichgewichtsmomente des $d2q9$ -Modells nach [117]	167
C Parameter des hybriden thermischen Lattice-Boltzmann Verfahrens in 2D	168
C.1 Parameter des $d2q9$ -Modells nach [116]	168
C.2 Diskretisierung der Energiegleichung nach [118]	168
Literaturverzeichnis	171

Kapitel 1

Problemstellung und Zielsetzung

1.1 Einführung

Die Begriffe Nachhaltigkeit und Ressourcenschonung spielen hinsichtlich ökologischer und ökonomischer Gesichtspunkte bei der Planung und dem Betrieb von Gebäuden im Sinne des Klimaschutzes eine wichtige Rolle. Spätestens seit der Ölkrise 1972 besteht ein öffentliches Bewusstsein gegenüber den Grenzen der Verfügbarkeit von Energie. In einem entwickelten Land besitzt der Gebäudesektor einen Anteil von etwa 40-50% am Gesamtenergieverbrauch und ein grosser Teil dieser Energie wird dabei zur Heizung und Kühlung von Wohn- und Verwaltungsgebäuden verwendet [60, 85]. Ein weiterer Energiebedarf ergibt sich durch Produktion und Transport von Baumaterialien. Der Bedarf wird grossteils durch den Verbrauch nicht-erneuerbarer Energieträger gedeckt. Auch wenn einzelne Nationen dem widersprechen, so besteht in der Öffentlichkeit doch Konsens darüber, dass die mit dem Energieverbrauch verbundenen Emissionen einen erheblichen Beitrag zur globalen Erwärmung (Treibhauseffekt), zur Versauerung und zum Ozonabbau in der Atmosphäre leisten, das sensible Gleichgewicht aus natürlichen CO_2 Quellen und Senken stören und mit dem Wohlstand und Bedarf einer exponentiell wachsenden Weltbevölkerung korrelieren.¹ Diese Erkenntnis führte auf dem Weltklimagipfel 1997 in Japan zur Formulierung des Klimaschutzprotokolls, das gesetzliche Regelungen zur Reduzierung des Ausstosses von Treibhausgasen vorsieht. In Deutschland reagierte der Gesetzgeber mit verschärften Bestimmungen bezüglich des Heizwärme- bzw. Primärenergiebedarfes von Gebäuden [56, 200].

Sollen Aussagen über die *Energieeffizienz* eines Gebäudes gemacht werden, muss der Gesamtprimärenergiebedarf während des gesamten Lebenszyklusses, d.h. die lokale und globale Auswirkung einzelner Massnahmen von der Erstellung über die Nutzungsphase und Erneuerung bis hin zur Entsorgung, betrachtet werden. Beispielsweise ist ein Nullenergiegebäude bedingt durch hohen technischen Aufwand nicht notwendigerweise energetisch 'effizienter' als ein einfacher realisierbares Niedrigenergiegebäude [134]. Durch (frühzeitige) planerische Massnahmen kann dabei eine deutliche Reduktion des Energiebedarfes eines Gebäudes erreicht werden. Auch der Gebäudebestand bietet hohes Potenzial für Verbesserungen [171].

¹ Würde der heutige durchschnittliche Kraftstoffverbrauch der amerikanischen PKWs auf den Durchschnittsverbrauch der deutschen PKWs reduziert, so könnte der derzeitige jährliche Erdölverbrauch von Afrika, China und Indien eingespart werden. (Quelle: S. Kohler, Expo2000, Der Themenpark, www.nlpb.de)

Zeitgemässe, intelligente Klimakonzepte nutzen das Angebot erneuerbarer Energien und sind bestrebt, ein Gleichgewicht zwischen Ökonomie und Ökologie zu finden. Neben *aktiven* Massnahmen, die eine optimale Deckung des Energiebedarfes zum Ziel haben (etwa die hocheffiziente Energiegewinnung durch Kraft-Wärme-Kopplung), gilt es, *passive* Konzepte, die selber keine bzw. nur sehr wenig Energie benötigen und eine Reduzierung des Energiebedarfes bewirken, umzusetzen [149]. So ist an dieser Stelle die Integration verglaster Hallen (Atrien) in das Gebäudekonzept zu erwähnen, die oft im Winter als Puffer zur Vorerwärmung der Aussenluft eingesetzt werden. Bei Änderungen an der Gebäudehülle des Altbestandes muss dabei bedacht werden, dass sich durch konstruktive Massnahmen das bauphysikalische Verhalten eines Gebäudes auch negativ verändern kann (dichtere Hülle, weniger Luftwechsel, ungenügende Feuchteabfuhr) [193]. Doch ist es z.B. mit modernen, den Feuchtetransport in Bauteilen regulierenden Baustoffen möglich, ein altes Fachwerkhaus auch an der Innenseite (!) zu dämmen, ohne damit in die Probleme einer Durchfeuchtung und Schimmelpilzbildung zu geraten [74]. Intelligente Konzepte müssen dabei auch auf das Behaglichkeitsempfinden der Nutzer Rücksicht nehmen – nicht nur im thermischen Sinne. Beispielhaft ist das neuzeitliche 'Sick Building Syndrom' zu nennen, das besonders in Situationen auftritt, in denen Nutzern der Kontakt zur Aussen- bzw. Umwelt verwehrt wird [120]. Der thermische Komfort spielt eine Rolle, wenn Energiekonzepte hinsichtlich ihrer Funktionalität bewertet werden sollen. Bei Atrien wäre die Frage einer potentiellen sommerlichen Überhitzung zu untersuchen.

Worin besteht nun der Zusammenhang zur Bau- bzw. 'Umweltinformatik'? Im Bereich der energieoptimierten Gebäudeplanung, insbesondere, wenn Konzepte zur passiven Solarenergienutzung bewertet werden sollen, stellt die *numerische Simulation* von thermischen Vorgängen in Gebäuden ein entscheidendes Werkzeug dar. Wechselwirkungen einzelner Wärmetransportvorgänge sind oftmals nicht mit simplen planerischen Methoden hinreichend genau abschätzbar. Beispielsweise können der Einfluss der thermischen Speichermasse eines Gebäudes oder die Raumluftströmung in grossen verglasten Hallen bei einfallender Solarstrahlung mit einfachen statischen Verfahren nicht korrekt erfasst werden. Es besteht erheblicher Bedarf an Werkzeugen für eine zuverlässige Prognose des Raumklimas und für die Optimierung eines Gebäudeentwurfs hinsichtlich Energiebedarf und Komfort. Neben dynamischen Mehrzonenmodellen, die eine Bilanzierung zeitabhängiger Massen- und Wärmeströme durch eine Gebäudestruktur erlauben und die thermische Gebäudemasse und den Strahlungseinfall berücksichtigen, gehören mittlerweile auch CFD-Verfahren² zur numerischen Simulation von Strömungsvorgängen zur Klasse der hierfür geeigneten Verfahren.

Die energetische Optimierung von Gebäuden wird im Planungsprozess jedoch häufig nicht durchgeführt. Die Gründe hierfür liegen in der Komplexität der physikalischen Prozesse und der Mehrfeldproblematik bei der thermischen Simulation von Gebäuden, die wiederum zu einer ausgeprägten Vielschichtigkeit bei numerischen Verfahren führt, deren Anwendung stets das Expertenwissen eines 'Klimaingenieurs' erfordert. Die Konfiguration von Simulationsprogrammen stellt dabei einen erheblichen Arbeitsaufwand dar, der sich in hohen Kosten für die Definition entsprechender Modelle niederschlägt. Weiterhin bestehen oft Inkompatibilitäten beim Datenaustausch oder aber dieser ist auf Grund verschieden dimensionaler Ansätze gar

² *Computational Fluid Dynamics*

nicht möglich.

Die Lösung dieses Dilemmas ist, zumindest zum Teil, Aufgabe der Ingenieurinformatik. Einerseits wird die Integration von numerischen Simulationsprogrammen in computergestützte Konstruktionswerkzeuge bereits erfolgreich praktiziert. In der Praxis spielen beispielsweise CAD-Systeme bei der Erstellung und Definition von strukturmechanischen Modellen eine wichtige Rolle [26]. Dabei ist es andererseits wünschenswert, geometrische Informationen zu einem Bauwerk auch als Ausgangspunkt für weitere Anwendungen verwenden zu können. Als vielversprechender Ansatz in diesem Zusammenhang beginnt sich seit einigen Jahren im Bereich des Bauwesens das Produktdatenmodell der International Alliance for Interoperability (IAI), die Industry Foundation Classes (IFC), als plattformunabhängiges Basismodell zum Datenaustausch und zur gemeinsamen Datennutzung international zu etablieren. Erst seit kurzem gibt es ferner Bestrebungen, dieses Format nicht nur zum Austausch zwischen CAD-Programmen, sondern auch tatsächlich im Bereich von *Simulationsanwendungen* einzusetzen [43]. Es sind Anwendungen, die dringend gebraucht werden, um das Nutzungspotenzial dieses Mediums zu erschliessen. Gerade hierin liegt aber die Schwierigkeit: Jede am Planungsprozess beteiligte Person besitzt dabei eine (teilweise grundlegend) verschiedene Sichtweise auf das 'Produkt Bauwerk', aus der sich verschiedene (Berechnungs-)Modelle ableiten, die im allgemeinen nicht miteinander kompatibel sind. Beispielsweise ist ein Statiker in erster Linie an Lastfällen der tragenden Gebäudekonstruktion interessiert, während für einen 'Bauklimatiker' hingegen der Energieeintrag durch eine Fassadenkonstruktion im Vordergrund steht.

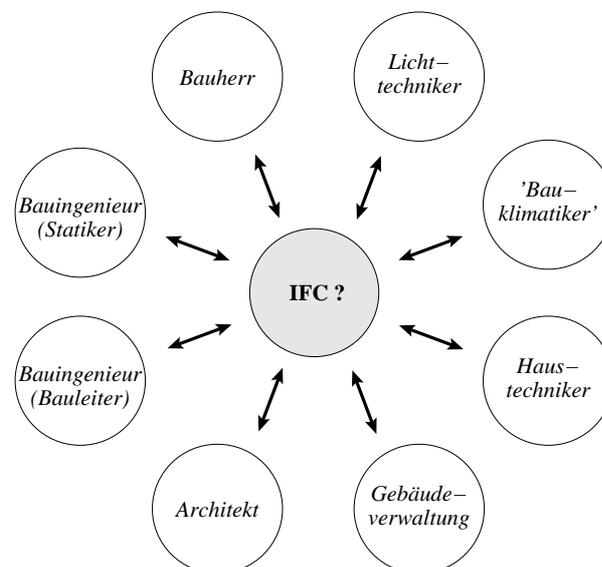


Abbildung 1.1: Interoperabilität im Bauwesen

Bezogen auf die thermische Simulation von Gebäuden liegt das Problem also darin, je nach gewähltem Abstraktionslevel ein für das eingesetzte Simulationsverfahren geeignetes (geometrisches und numerisches) Modell abzuleiten. So wird für die Definition eines thermischen Mehrzonenmodells ein Objektmodell benötigt, das Aufschluss über die Beziehungen zwischen Räumen und Bauteilen geben kann. Die Modellierung erfolgt dabei oft dimensionsreduziert. Ein Strömungsmodell hingegen benötigt ein geometrisches Modell zur Definition von Rechen-

gebiet und Randbedingungen. Die in einem Bauwerksmodell enthaltenen Daten müssen somit zunächst *interpretiert* werden, d.h. die Struktur eines Gebäudes, seine Topologie und die Semantik seiner Bauteile analysiert werden. Grundsätzlich bietet das Objektmodell der IFC die nötigen Voraussetzungen, um diese Daten zu verwalten und die unterschiedlichen Sichtweisen der Planer abzubilden. Es eignet sich aber in der Regel noch nicht für eine direkte Verwendung in einer Simulationsumgebung, da zunächst die Konsistenz des Modells zu prüfen ist und die Beziehungen zwischen den Objekten im Kontext der Simulationsaufgabe ausgewertet werden müssen.

In der Praxis wird ein Bauwerks-Produktmodell derzeit noch selten bzw. nur in Ausnahmefällen verfügbar sein, denn etwa ein Architekt wird wenig unmittelbaren Nutzen aus der Erstellung eines solchen Modells ziehen, zumal die Vergütung des damit verbundenen zusätzlichen Mehraufwandes nicht ausreichend in der Honorarordnung für Architekten und Ingenieure (HOAI) geregelt ist.³ Der Planungsprozess im Bauwesen ist zum Grossteil (noch) von einem 'zeichnungsorientierten' Ansatz geprägt. Eingabeparameter für computergestützte Berechnungen müssen zeit- und somit kostenintensiv aus Plänen anderer Fachdisziplinen übertragen werden. Diesem Mehraufwand steht die Effizienzsteigerung des prozessorientierten, dreidimensionalen Ansatzes gegenüber, den die Produktmodellierung eröffnen würde. Erste Ansätze der Bauindustrie belegen den Innovationscharakter dieses Umdenkens, wie zum Beispiel im Bereich der vollautomatisierten Fertigteileproduktion zu beobachten ist, die dem Einfluss des Maschinenwesens ausgesetzt ist.

Die Lösung der geschilderten Problematik erfordert nach Meinung des Autors ein Umdenken und eine grundlegend andere Herangehensweise bei der Anbindung von Simulationsanwendungen an ein Bauwerksmodell. In der vorliegenden Arbeit wird deshalb ein *graphentheoretischer Ansatz* zur Analyse der Gebäudestruktur und Topologie vorgestellt, der es ermöglicht, von einem 3D-CAD-Modell bzw. einem Produktmodell eines Gebäudes ein *Raummodell* abzuleiten und die Semantik seiner Bauteile, soweit dies für die thermische Simulation von Interesse ist, zu bestimmen. Das Modell bildet sowohl den Ausgangspunkt zur Definition eines Objektmodells für die thermische Simulation und zur Vernetzung und Diskretisierung aller im Gebäude enthaltenen Raumlufkörper, als auch einen integrierten Ansatz zur Verwaltung der Beziehungen zwischen beiden Herangehensweisen, der sich bei einer Kopplung beider Verfahren als vorteilhaft erweisen wird.

Bei der Konzeption von Gebäuden, die durch einen hohen Nutzungsanteil an passiver Solarenergie charakterisiert sind, wie bei der Verwendung von Doppelfassaden oder verglasten Hallen (Atrien), müssen die energetische Wirkungsweise einzelner Massnahmen und Parameter und ihre Auswirkungen auf das thermische Behaglichkeitsempfinden der Nutzer sorgfältig untersucht werden, um die spätere Funktionalität zu gewährleisten. In diesem Zusammenhang spielt die *natürliche Lüftung* von Gebäuden eine bedeutende Rolle, deren Ausprägung von Randbedingungen, wie z.B. der Sog- und Druckverteilung am Baukörper, der einfallenden Solarstrahlung oder Dichteunterschieden infolge von Temperaturdifferenzen, massgeblich beein-

³Dieser Effekt wird nach [149] noch dadurch verstärkt, dass die TGA-Planung gemäss HOAI nicht für Auswirkungen passiver Massnahmen auf das Gebäudeklima zuständig ist, sondern anteilig der verwirklichten technischen Anlagen entlohnt wird. Paradoxaerweise entspricht also eine durch passive Massnahmen bewirkte Reduktion an technischen Anlagen einer Verringerung des Honorars.

flusst wird. Aussagen über Luftmassenströme können in der dynamischen Gebäudesimulation dadurch berücksichtigt werden, dass Luftwechselraten entweder fest vorgegeben oder diese über Druckdifferenzen berechnet werden. Aufgrund der Modellkomplexität ist die räumliche Diskretisierung dabei stark begrenzt (Verwendung von einem bis wenigen Raumlufknoten pro Zone), womit Raumlufströmungen nur unzureichend berücksichtigt werden können.

Komplexe physikalische Strömungsvorgänge können heutzutage mit Hilfe der numerischen Strömungsmechanik hochauflösend simuliert werden, indem effiziente Verfahren und Turbulenzmodelle in Verbindung mit leistungsfähiger Hardware Anwendung finden. Die Simulation von Raumlufströmungen ist dabei aber auf kurze Zeitintervalle und einzelne Zonen eines Gebäudes begrenzt, da diese Berechnungen extrem rechenintensiv sind. Im Unterschied zur Simulation von Phänomenen der Gebäudeaerodynamik, die bei direkter Navier-Stokes Simulation auch für Grossrechner in naher Zukunft ein unlösbares Problem darstellen werden, sind lokal begrenzte Simulationen von Raumlufströmungen innerhalb akzeptabler Rechenzeiten durchführbar.

Zur Simulation der Strömungs- und Wärmetransportvorgänge im Innenraum findet im Rahmen dieser Arbeit ein zu klassischen Verfahren komplementärer Ansatz Anwendung, das sogenannte *Gitter-Boltzmann Verfahren*, das in Kapitel 4 vorgestellt wird. Das auch als *Lattice-Boltzmann Methode (LBM)* bezeichnete Verfahren eignet sich besonders gut zur Simulation schwach kompressibler Strömungen in und um komplexe geometrische Strukturen. Insbesondere eröffnet die Verwendung geeigneter Diskretisierungstechniken die Möglichkeit einer effizienten Anbindung an CAD-Systeme. Dies ausnutzend, konnte beispielsweise im Bereich der Automobilindustrie gezeigt werden, dass, verglichen mit dem üblichen Vernetzungsprozess, die Arbeitszeit zur Modellierung drastisch, d.h. von mehreren Monaten auf wenige Tage, reduziert werden kann [12].

1.2 Ablauf einer thermischen Gebäudesimulation

Wie gliedert sich nun – in der Praxis – die thermische Simulation eines Gebäudes in den Entwurfsprozess der energieoptimierten Gebäudeplanung ein? Einfache, statische Verfahren sind das Handwerkszeug für erste Aussagen in einer frühen Planungsphase. Mit zunehmender Konkretisierung und Steigerung der Komplexität aber muss die Funktionsweise eines Konzeptes bewertet und die angemessene Reaktion eines Systems auf seine Einflussfaktoren abgeschätzt werden.

Um Anhaltswerte für die Verteilung von Druckbeiwerten auf der Aussenschale der Gebäudehülle zu erhalten, werden in der Praxis häufig zunächst aufwändige Windkanalversuche durchgeführt. Dabei muss die Windhäufigkeitsverteilung des Standortes und die Art der umliegenden Bebauung (Bodenrauigkeit) bekannt sein. Mitunter werden in diesem Bereich auch CFD-Verfahren mit geeigneten Turbulenzmodellen eingesetzt ('numerischer Windkanal'). Die Kenntnis der Sog- und Druckverteilung ist insbesondere bei Bauwerken von Bedeutung, deren (natürliches) Lüftungskonzept die Nutzung dieser Kräfte explizit vorsieht.

Gemeinsam mit standortabhängigen Klimadaten werden diese Beiwerte nun als Randbedin-

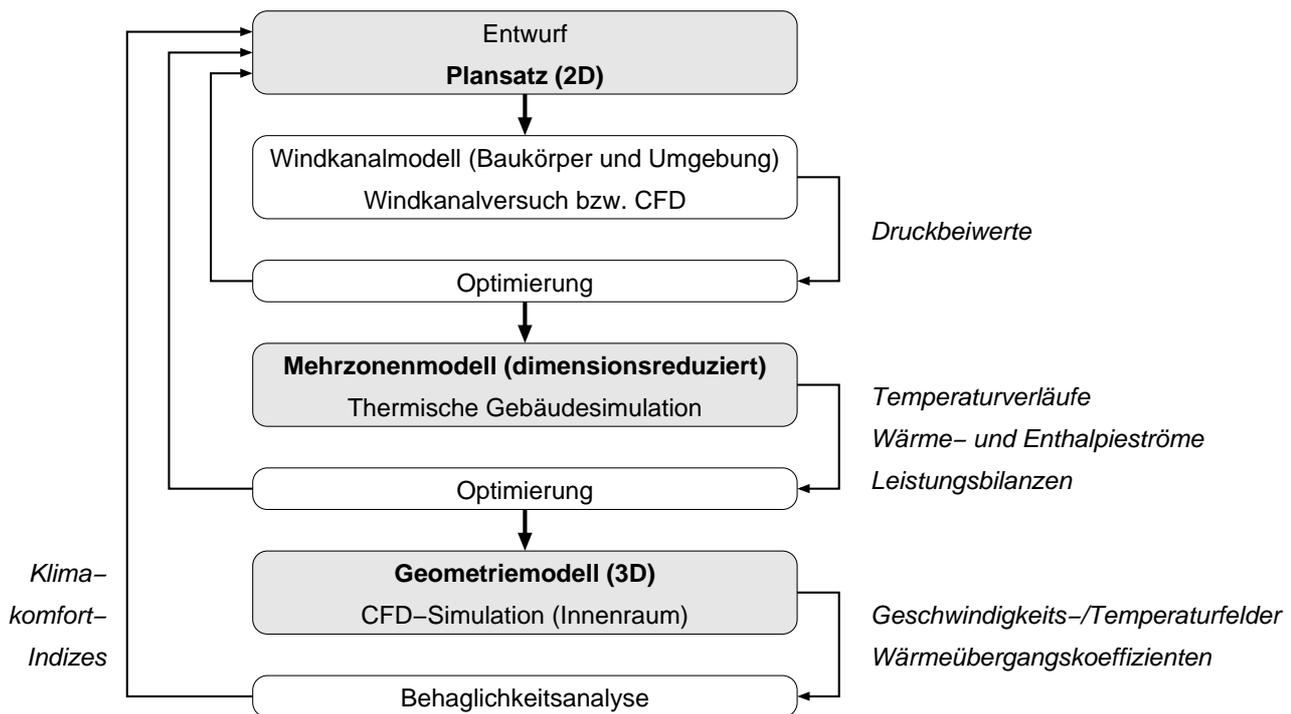


Abbildung 1.2: Schematischer Ablauf einer thermischen Gebäudesimulation (in der Praxis)

gungen eines thermischen Mehrzonen-Gebäudemodells gesetzt. Typische Ergebnisse sind dabei z.B. der zeitliche Verlauf von (mittleren) Raumluft- und Oberflächentemperaturen bzw. von Heiz- und Kühlleistungen. Die Ergebnisse dienen häufig wiederum als Randbedingung für hochauflösende CFD-Simulationen der Strömungsverhältnisse in Fassadenzwischenräumen bzw. Innenräumen. Mit Kenntnis der Oberflächentemperaturen, des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes, der relativen Luftfeuchte, etc. sind dann beispielsweise Aussagen bezüglich des thermischen Behaglichkeitsempfindens möglich. Abbildung 1.2 zeigt das Schema des derzeit üblichen Simulationsablaufes in der Praxis.

1.3 Zielsetzung der Arbeit

Aus der Argumentation der beiden einführenden Abschnitte ergibt sich unmittelbar die Zielsetzung dieser Arbeit. Offensichtlich fehlt es an einem Werkzeug, das möglichst direkt an ein gemeinsames geometrisches Modell angebunden werden kann, um damit Aufwand und Fehlerquellen bei der Generierung von Eingabedaten zu reduzieren und somit die Anwendung von Simulationsverfahren zur energetischen Optimierung von Gebäuden zu fördern. Im Mittelpunkt der Betrachtungen steht deshalb die Entwicklung eines integrierten Konzeptes zur Ableitung der verschiedenen Simulationsmodelle von ein und demselben räumlichen geometrischen Bauwerksmodell, die im Kontext der Simulation von Raumluftströmungen benötigt werden.

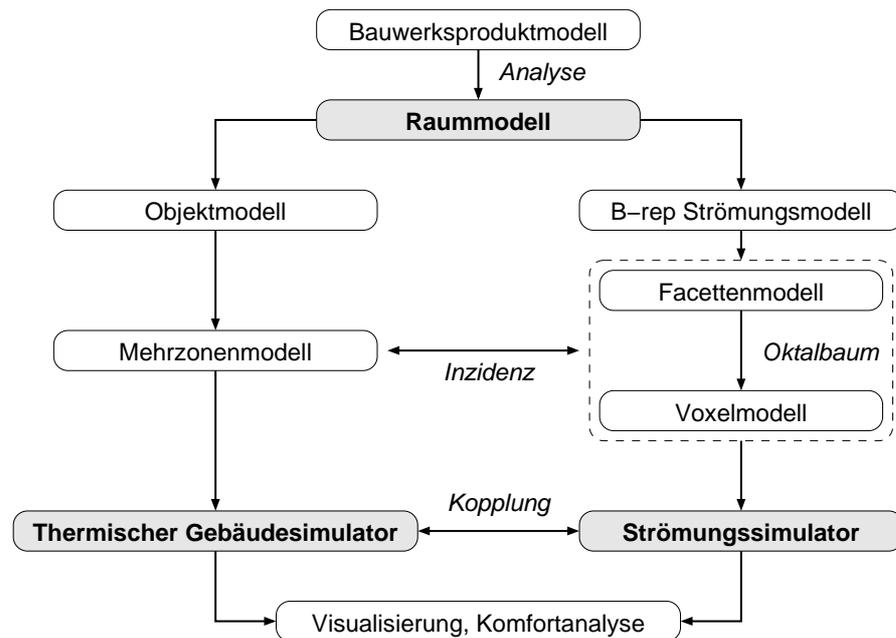


Abbildung 1.3: Schematischer Ablauf des Diskretisierungsprozesses

Zur Simulation konvektiver Raumluftrömungen wird das hybride thermische Gitter-Boltzmann Verfahren eingesetzt, dessen Differenzschema auf einem zur Zeit noch uniformen kartesischen Rechengitter (Voxelmatrix) operiert (vgl. Kapitel 4). Für die Diskretisierung des Rechengebietes wird dabei eine hierarchische Baumdatenstruktur verwendet (siehe Abschnitt 3.1.2.1). Ausgangspunkt hierfür stellt ein Facettenmodell dar, das aus einem Volumenmodell des Strömungsgebietes gewonnen werden kann (vgl. Abschnitt 3.5). Da die Natur von auftriebsgetriebenen Raumluftrömungen durch hohe Rayleigh-Zahlen bestimmt ist, wird das Gitter-Boltzmann Verfahren weiterhin um einen Large-Eddy-Ansatz zur Simulation der turbulenten Grobstruktur und zur Modellierung des Einflusses der nicht aufgelösten Feinstruktur erweitert.

Die erforderlichen Randbedingungen für eine Raumluftrömungssimulation werden von einer zuvor mit einem thermischen Mehrzonenmodell durchgeführten Simulation geliefert. Im Rahmen dieser Arbeit wird in diesem Zusammenhang das Gebäudemodell der Simulationsumgebung *SMILE* eingesetzt (vgl. Abschnitt 2.4.1). Hierfür wird zunächst eine dimensionsreduzierte Sicht auf das Modell benötigt, ferner ist die Kenntnis von Beziehungen zwischen Bauteilen und Luftvolumen von Bedeutung.

Der Ablauf von der abstrakten Modellbildung bis hin zum jeweiligen diskreten Modell soll dabei durchgängig und unter Wahrung der Konsistenz zwischen den Modellen möglich sein. Abbildung 1.3 demonstriert dies anhand des im Rahmen dieser Arbeit realisierten Schemas. Ausgehend von den geometrischen Informationen, die in einem Bauwerksproduktmodell enthalten sind, muss zunächst deren Semantik und Topologie analysiert werden. Ziel ist die Ableitung eines *Raummodells*, das alle Bauteile, die Luftvolumina aller im Gebäude enthaltenen Räume und die Hüllfläche des Gebäudes kennt und die Beziehungen zwischen diesen Objekten

anhand geeigneter Relationen definiert. Das Raummodell besteht aus einem *Volumenmodell* und mehreren *Graphen* zur Organisation des Beziehungsgeflechts zwischen den Objekten (vgl. Abschnitt 3.4). Es gestattet weiterhin die *Identifizierung* von Objekttypen, d.h. die Bestimmung der Semantik von Bauteilen, soweit dies für die thermische Simulation von Bedeutung ist. Aus diesem Raummodell kann dann das für die Zonierung benötigte *Objektmodell* und das zur Diskretisierung des Strömungsgebietes benötigte *Oberflächenmodell* bestimmt werden. Weiterhin sind die Schnittstellen zwischen den Teilgebieten bekannt, womit eine wesentliche Voraussetzung zur Kopplung der Verfahren gegeben ist (vgl. Abschnitt 2.4).

1.4 Softwarekonzept der Rahmenapplikation

In diesem Abschnitt wird nun kurz auf das Softwarekonzept der Rahmenapplikation eingegangen, das als Basis zur Umsetzung der zuvor definierten Ziele im Sinne des softwaretechnischen Entwurfes dient. Aufgabe der Rahmenapplikation ist es, eine graphisch-interaktive Benutzerumgebung zur Verfügung zu stellen, in der die verschiedenen Modelle visualisiert, die implementierten Algorithmen getestet und die Simulationsanwendungen initialisiert und aufgerufen werden können. Der Schwerpunkt liegt weniger auf der Modellierungsfunktionalität, wohl aber auf der Möglichkeit, diese hinzuzufügen zu können, sollten zu einem späteren Zeitpunkt kommerzielle Interessen Gewicht erlangen. Für die Realisierung der in Abbildung 1.3 dargestellten Modellkette galt es, sich zwischen einer Anbindung an ein leistungsfähiges bauspezifisches CAD-System oder dem modularen Aufbau einer eigenen Applikation unter Verwendung von einzeln verfügbaren Softwarekomponenten zu entscheiden. Da CAD-Systeme mittlerweile einen sehr hohen Entwicklungsstand erreicht haben, ist die Neuentwicklung eines grafisch-interaktiven Modellierungswerkzeuges auf Grund des dafür nötigen Aufwandes weder sinnvoll noch realisierbar. Um Synergieeffekte zu anderen Projekten am Lehrstuhl zu nutzen, wurde die Anbindung an das geometrische Kernsystem *ACIS* [188] favorisiert. Auf den Entscheidungsprozess wird in Abschnitt 3.3.1 eingegangen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde deshalb das von ROMBERG im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogrammes *Volumenorientierte Modellierung als Grundlage einer vernetzt-kooperativen Planung im konstruktiven Ingenieurbau* [156] initiierte System weiterentwickelt, vgl. Kapitel 3. Dieses System dient nun – eben im Sinne des kooperativen Arbeitens – auch als Rahmenapplikation im Forschungsprojekt *SIMFAS*, dessen Zielsetzung die *Kopplung von dynamischer Gebäudesimulation und CFD-Methoden* ist [154].

Die Basis des Präprozessors wird von den drei plattformunabhängigen Bibliotheken *QT* [152], *ACIS* [2] und *HOOPS* [96] gebildet. *QT* ist eine⁴ frei erhältliche, objektorientierte Bibliothek zur Erstellung von Anwendungen mit graphischer Benutzerschnittstelle (GUI⁵), die sich u.a. durch ein 'Document/View' Konzept und einen sogenannten 'Signal/Slot' Mechanismus zur Ereignissteuerung auszeichnet. *HOOPS* stellt das Bindeglied zwischen der in einer *QT*-Rahmenanwendung angesteuerten Visualisierungskomponente *Open-GL* und dem geometrischen Kernsystem *ACIS* dar, das in Abschnitt 3.1.2.5 vorgestellt wird.

⁴(im Bereich Forschung und Lehre)

⁵*Graphical User Interface*

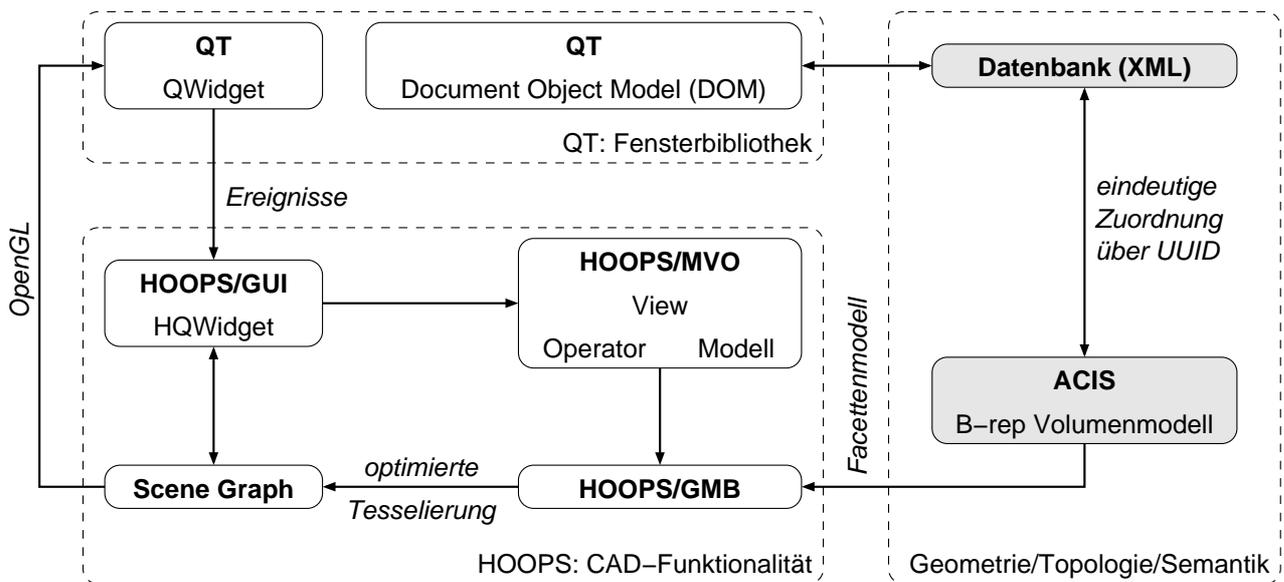


Abbildung 1.4: Zusammenwirken der Komponenten der Rahmenapplikation (HOOPS nach [96])

Die Model/View/Operator-Bibliothek (MVO) von *HOOPS* stellt dabei grundlegende CAD-Funktionalitäten zur Verfügung, indem sie verschiedene Sichten ('Views') auf ein Modell und Operationen auf einem Modell mit Hilfe von Klassen ('Operatoren'), die Algorithmen für bestimmte (Maus-)Interaktionen implementieren, ermöglicht [96]. Die Kapselung der Ereignissteuerung wird durch Ableiten von der graphischen Interaktionsklasse *QWidget* erreicht. Das *HOOPS*-System ist mit der Schleife zur Ereignissteuerung (*Event Processing Loop*) der Fensterklassenbibliothek *QT* verbunden und leitet die vom Benutzer ausgelösten Ereignisse zum 'View'-Objekt bzw. einem 'Operator' weiter. Mit Hilfe einer 'Brücke' zum Geometriemodell ('Geometric Modeler Bridge', Abk.: GMB) wird die tesselierte Ausgabe des Geometriemodellierers *ACIS* (d.h. das Facettenmodell einer Szene) in Abhängigkeit vom benötigten Detaillierungsgrad optimiert und dem graphischen System (*Scene Graph*) von *HOOPS* übergeben. Dabei wird die Referenzierung und Dereferenzierung zwischen *ACIS*- und *HOOPS*-Objekten unterstützt, womit beispielsweise eine Auswertung von markierten Objekten einer Szene zur Laufzeit ermöglicht wird. Der Szene-Graph liefert schliesslich ein gerendertes Bild einer Szene an ein graphisches Kernsystem, in diesem Falle *OpenGL*. Abbildung 1.4 demonstriert das Zusammenwirken der Komponenten der Rahmenapplikation.

Für den Vorgang des Parsens einer physikalischen IFC-Datei wird die *Eurostep Toolbox* [61] eingesetzt, wie in Abschnitt 3.3.2 beschrieben wird. Abschnitt 3.3 erläutert, wie diese Daten in ein Volumenmodell, das die Ausgangsbasis zur Definition des Raummodells bildet, übertragen werden. Um nun zusätzlich zu den geometrischen Daten (und einfachen Attributen) auch semantische Informationen zu den Objekten des Raummodells speichern zu können, wird zu jedem *ACIS* Objekt eine 1:1 Beziehung mit einem entsprechenden Objekt in einer relationalen Datenbank erstellt. Basis dieser Datenbank stellt das *Document Object Model (DOM)* der *QT*-Bibliothek dar, das eine Speicherung der Daten im Format *XML* ermöglicht. Für diese Zuordnung erhalten die Objekte einen eindeutigen Identifikationsbezeichner (UUID).

Ausführliche Details zu Softwarekonzept und Implementierung können der Arbeit von ROMBERG entnommen werden [158].

Beim Entwurf der Applikation und auch bei allen im Rahmen dieser Arbeit entstandenen Einheiten wurde auf Plattformunabhängigkeit und hohe Flexibilität durch einen streng modularen Aufbau Wert gelegt. Seitens der Implementierung äussert sich dies darin, dass die Funktionalität der Module jeweils über eine Schnittstellenklasse mit wohldefinierten statischen Zugriffsfunktionen (API) gekapselt ist.

Im Laufe des in Kapitel 3 beschriebenen Zerlegungsprozesses und der Bestimmung des Raummodells werden verschiedene Repräsentanten des vom Produktmodell abgeleiteten Ausgangsmodells zu erstellen sein, d.h. jeweils ein *ACIS* Modell mit dazugehöriger Datenbank. Dabei wird es stets möglich sein, die Entstehungsgeschichte voneinander abgeleiteter Objekte nachvollziehen zu können, da die Eltern/Kind-Beziehungen zwischen solchen Objekten in den Datenbanken abgelegt werden. Dies wird es beispielsweise erlauben, die ein Innenraumvolumen aufspannenden Bauteile und auch deren zugrundeliegende IFC-Objekte zu ermitteln, d.h. die Entstehungsgeschichte zu traversieren. Damit wird erreicht, dass die Vorteile beider Herangehensweisen nutzbar sind: diejenige eines *Objektmodells* und diejenige eines *Volumenmodells*. Näheres hierzu in Kapitel 3.

Neben der Grundfunktionalität einer Fensterklassenbibliothek bietet *QT* weiterhin Mechanismen zur Kommunikation zwischen einzelnen Softwarekomponenten. Beispielsweise wurde damit die Steuerung der Simulationsverfahren mit Hilfe einer *Socket-Verbindung* realisiert, die den dateibasierten Austausch ersetzen kann.

1.5 Gliederung der Arbeit

In Kapitel 2 wird zunächst ein allgemeiner Überblick über die Simulation von Raumluftströmungen gegeben. Dabei werden diese in ihrem Erscheinungsbild charakterisiert, ihre Antriebskräfte und die sie massgeblich beeinflussenden Randbedingungen beschrieben. In diesem Zusammenhang wird die Bedeutung der Gebäudehülle anhand typischer Konfigurationen, wie z.B. Doppelfassadensystemen und grossen verglasten Hallen (Atrien), analysiert und der Einfluss von Raumluftströmungen auf das Raumklima und das Behaglichkeitsempfinden der Nutzer abgeschätzt. Weiterhin werden übliche Approximationsverfahren zur Berechnung vorgestellt. Schliesslich werden in Abschnitt 2.4 die Unterschiede zwischen einer dimensionsreduzierten und einer hochauflösenden Simulation anhand der Vorstudie einer gekoppelten Simulation zwischen einem Mehrzonenmodell und einem CFD-Verfahren quantifiziert.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit der geometrischen, topologischen und semantischen Analyse eines Gebäudes. Nach einer Einführung in die Grundlagen der Graphentheorie, der geometrischen und topologischen Modellierung und der Produktmodellierung im Bauwesen wird beschrieben, welche Schritte zur Überführung von Produktmodelldaten in ein Volumenmodell nötig sind. In Abschnitt 3.4 wird ein graphentheoretischer Ansatz zur Analyse von Raumtopologie und Gebäudestruktur beschrieben, der auf die Definition eines Raummodells führt und die Grundlage für den Diskretisierungsprozess bildet.

Zu Beginn von Kapitel 4 werden die im Kontext von Raumluftrömungen relevanten Grundgleichungen der Strömungs- und Wärmetransportvorgänge vorgestellt und das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Gitter-Boltzmann Verfahren und dessen Erweiterung zur Simulation turbulenter konvektiver Raumluftrömungen beschrieben. Dabei findet eine Grobstruktursimulation Anwendung. Das Verfahren wird anhand typischer Konfigurationen hinsichtlich freier konvektiver Strömungen validiert. Der Einsatz des Verfahrens wird schliesslich anhand eines komplexen Anwendungsbeispiels, freier und erzwungener Konvektion in einem Atrium, demonstriert.

Ergebnisse und Schlussfolgerungen werden nach jedem Kapitel zusammengefasst, Kapitel 5 gibt einen Ausblick auf mögliche Erweiterungen und künftige Aktivitäten.

Kapitel 2

Charakterisierung und Approximation von Raumlufströmungen

Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines integrierten Konzeptes zur Berechnung von Raumlufströmungen und der dazu erforderlichen Randbedingungen. Die Schwerpunkte liegen dabei, ausgehend von einem Bauwerksproduktmodell, auf der Ableitung eines zonalen Modells und eines Strömungsmodells und der Anbindung eines zur Simulation konvektiver Raumlufströmungen eingesetzten Verfahrens, das in Kapitel 4 behandelt wird.

Dabei ist es zunächst wichtig, auf die Besonderheiten bei der Modellierung von Raumlufströmungen einzugehen, d.h. diese zu charakterisieren und typische Konfigurationen zu betrachten, um deren Einfluss auf Raumklima und Behaglichkeit für die Nutzer abschätzen zu können, und in diesem Kapitel einen knappen Überblick über in diesem Zusammenhang übliche Approximationsverfahren zu geben.

2.1 Einordnung und Charakterisierung

2.1.1 Bedeutung der Gebäudehülle

Die Ausbildung von Raumlufströmungen ist grundsätzlich abhängig von der Geometrie und Struktur eines Baukörpers (Materialien, vorhandene Speichermassen, Pufferzonen), den gegebenen physikalischen Randbedingungen (Ausrichtung, Wetter-/Klimadaten wie z.B. Aussentemperatur, Luftfeuchtigkeit, Einstrahlung) und der Nutzung des Gebäudes (Interne Lasten, Nutzerverhalten wie z.B. Fensterlüftung). Antriebskraft, 'Motor' von Strömungen im Innenraum, die auf die *natürliche Lüftung* eines Gebäudes zurückzuführen sind, können dabei folgende Effekte sein, die sich auch gegenseitig überlagern können:

- Temperaturdifferenzen zwischen innen und aussen bzw. benachbarten Zonen führen zu verschiedenen Dichteverhältnissen, es entstehen thermische (Auftriebs-)Kräfte.
- Die Ausbildung von Raumlufströmungen wird weiterhin massgeblich von den Bauteiloberflächentemperaturen bestimmt, die etwa von der Verteilung der einfallenden kurzwelligigen Strahlung abhängen (Absorption).
- Durch vom Wind induzierte Kräfte auf einer Fassade, d.h. durch die Wirkung von *dynamischem Druck* (Staudruck bzw. Sog), und durch den *statischen Druck*, d.h. durch die

'Schichtung' der Luft, bestehen Druckgradienten zwischen Öffnungen (grossen Öffnungen und Bauteilfugen).

Anforderungen an die *mechanische Lüftung (Ventilation)* werden in DIN 1946 festgelegt [46]. Als Richtwert soll dabei, je nach Grad der körperlichen Tätigkeit, eine Luftwechselrate von $40 - 60 \text{ m}^3$ pro Stunde und Person eingehalten werden. Hinsichtlich der natürlichen Belüftung gibt es generell nur allgemeine Vorgaben. Beispielsweise ist bei der Anordnung von Öffnungen in Räumen darauf zu achten, dass sich ein 'raumerfüllender' Strömungsvorgang einstellt, weshalb in der Arbeitsstättenrichtlinie ASR 5 festgelegt wird, dass bei einseitiger Fensterlüftung eine Raumtiefe der maximal 2.5-fachen Raumhöhe zulässig ist [8, 149].

Der Gebäudehülle kommt dabei als flexibel reagierende Schnittstelle zwischen Aussen- und Innenklima eine besondere Bedeutung zu. Ihre Aufgaben liegen im winterlichen Wärmeschutz (Schutz vor Kälte), im baulichen sommerlichen Wärmeschutz (Schutz vor Überhitzung), in der Transparenz hinsichtlich Tageslichtnutzung und in der Regulierung der (natürlichen) Lüftung [88]. Neben den Lüftungswärmeverlusten (Ventilation, Infiltration) beeinflussen die Transmissionswärmeverluste den winterlichen Wärmeschutz. Da in Fassadensystemen eine Menge an Optimierungspotenzial steckt, sind Massnahmen zur Energieeinsparung bereits frühzeitig in der Entwurfsphase zu ergreifen. Dabei ist ein (vom Bauherrn empfundenes) Gleichgewicht zwischen ökonomischen und ökologischen Aspekten zu finden [107]. Wie eingangs erwähnt, gilt es, zwischen aktiven (technischen) Massnahmen, die eine *optimale Deckung* des Energiebedarfes bewirken, und passiven Massnahmen, die eine *Reduzierung* des Energiebedarfes zum Ziel haben, zu unterscheiden [149]. Motivation sollte stets sein, zunächst letztgenannte zu ergreifen.

Historisch gesehen wurde Bauen als Reaktion auf klimatische Bedingungen verstanden und bis in die Vorkriegszeit zumeist mit am Ort verfügbarem Baumaterial bewerkstelligt. Un-erfahrenheit mit neuer Technik führte um 1930 zu anfänglichen Problemen beim Einsatz grossflächig verglaster Fassaden, wie beispielsweise bei den Bauwerken der berühmten Architekten LE CORBUSIER (Cité de Refuge) und W. GROPIUS (Fagus-Werke) [107]. Ob der heutzutage oft aus ästhetischen Gründen gewählte Einsatz grossflächig verglaster Fassadensysteme auch sinnvoll und ressourcensparend ist, hängt von einer Vielzahl von Parametern ab und bedarf einer sorgfältigen Analyse und Simulation durch einen 'Bauklimatiker'. Wie

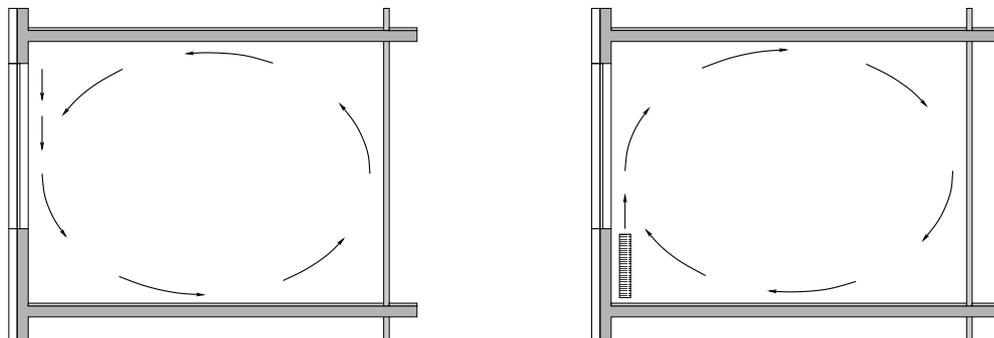


Abbildung 2.1: Schema der Raumlufstromung in Einzelraum (Heizperiode): **Links:** Kaltluftabfall am Fenster, **rechts:** Umkehrung der Konvektionswalze durch Heizkörper

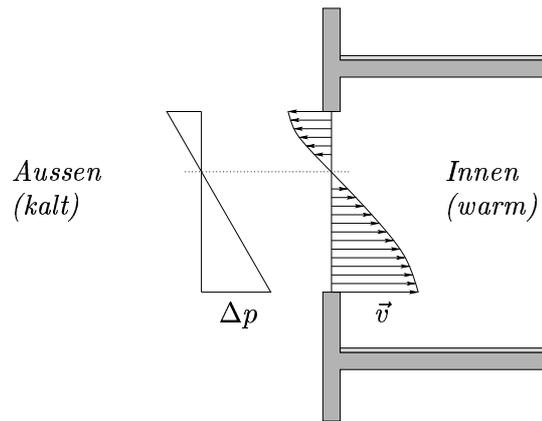


Abbildung 2.2: Schema des bidirektionalen Luftaustausches durch vertikale Öffnung, hier: Überlagerung des Luftaustausches mit konstantem Einströmprofil, vgl. [4, 149]

in Kapitel 1 erwähnt, übersteigt die Komplexität des iterativen Simulationsprozesses derartiger Systeme die vom Tragwerksplaner zu erbringenden Berechnungen hinsichtlich normativer Vorschriften bei weitem. Dazu kommt, dass beispielsweise die Energieeinsparverordnung [56], die den Jahresprimärenergiebedarf eines Gebäudes begrenzt, sinnvollerweise nicht zur Auslegung von modernen Bürogebäuden herangezogen werden kann, da diese nicht den dominanten Einfluss von sommerlichen Kühllasten berücksichtigt [149].

2.1.2 Einschalige und doppelschalige Fassadensysteme

Als typische Konfigurationen der modernen Architektur können *einschalige* und *doppelschalige Fassadensysteme* unterschieden werden, die u.a. bei der Konstruktion grosser verglaster Hallen (*Atrien*) eingesetzt werden. Lösungsvarianten einschaliger Systeme sind etwa in [129] zu finden. Die einseitige freie Lüftung, d.h. die Fensterlüftung von Einzelräumen (vgl. Abb. 2.1), ist dabei hauptsächlich durch Dichteunterschiede infolge von Temperaturgradienten bestimmt¹ und resultiert in einem bidirektionalen Luftaustausch, dem Ab- und Zuströmen (vgl. Abb. 2.2), weshalb sie mit der Annahme einer konstanten Luftwechselrate nicht hinreichend genau abgeschätzt werden kann [149]. PÜLTZ erläutert in [149] die Grenzen der Fensterlüftung bei vorhandener Querlüftung und weist auf den Effekt der Fassadenaufheizung bei starker Sonneneinstrahlung und der sich daraus ergebenden Grenzschicht hin, deren Einfluss besonders bei hohen Gebäuden problematisch sein kann, d.h. eine Fensterlüftung unmöglich macht.

Eine Klassifikation von Doppelfassadensystemen wurde von LANG in [120] und von MÜLLER et al. in [129] vorgenommen. Allgemein handelt es sich bei einer Doppelfassadenkonstruktion um zwei durch einen Luftzwischenraum getrennte Fassadenebenen im Abstand von etwa 0.2–1.4m (vgl. etwa Abb. 2.4). Die innere Hülle kann verglaste und opake Elemente enthalten, die äussere Hülle muss den Anforderungen an den Wetter- und primären Wärmeschutz genügen. Doppelfassadensysteme werden bei der Sanierung bestehender Gebäude und im Neubaubereich zur Vorerwärmung der Zuluft im Fassadenzwischenraum, zur Reduzierung der Bögigkeit

¹Der Einfluss der Luftfeuchtigkeit ist hier von untergeordneter Bedeutung

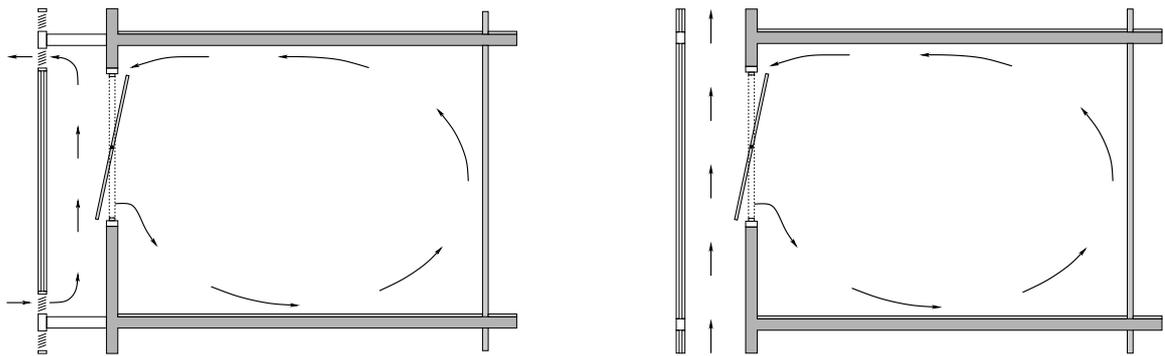


Abbildung 2.3: Schema der Luftströmung bei Doppelfassadensystemen. **Links:** geschossweise getrenntes System, **rechts:** Vorhangfassade [129]

bei der Windanströmung der inneren Fassade und zum Schutz gegen Aussenlärm eingesetzt [88, 129]. Im Sommer erwärmt sich die Luft dabei im Verhältnis zur Aussenluft wesentlich stärker, wodurch sich eine Verschlechterung der Komfortkriterien ergeben kann. Dem kann i.d.R. durch Verwendung eines integrierten Sonnenschutzes, ausreichend dimensionierter Zu- und Abluftöffnungen und durch Nachlüftung begegnet werden [149]. In Abhängigkeit von ihrer Konstruktion unterscheidet man folgende Systeme (vgl. auch Abb. 2.3): *Geschossweise getrennte Systeme* weisen eine horizontale Abtrennung zwischen Geschossen auf. Üblich sind Kastenfenstersysteme (raumweise Trennung) und Korridorfassaden (achsweise Trennung). Die überwiegend aus Gründen des Schallschutzes eingesetzten *mehrgeschossigen Vorhangsysteme*

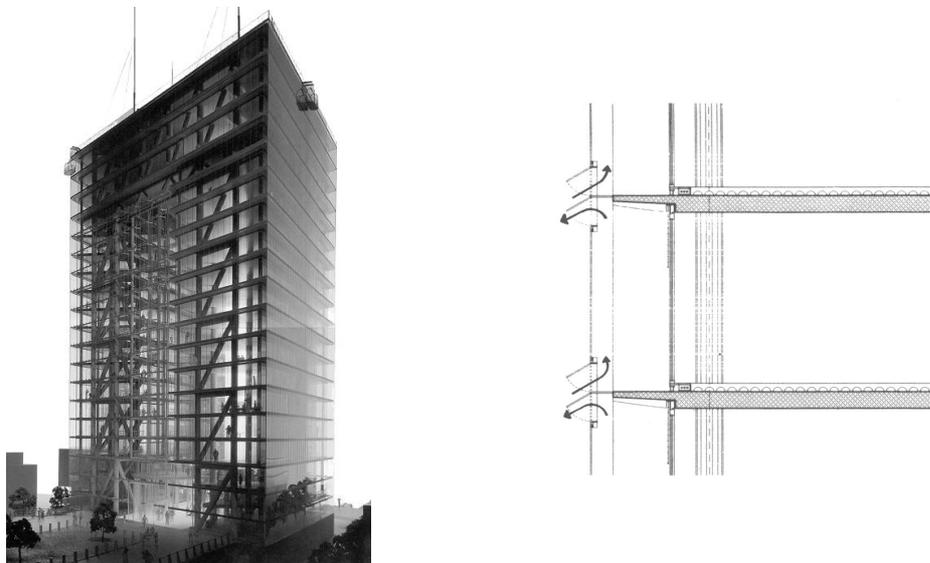


Abbildung 2.4: Das Düsseldorfer Stadttor, Architekten *Petzinka, Pink und Partner*, Doppelfassadensystem und integriertes Atrium, Nutzung der natürlichen Sog- und Druckverhältnisse am Baukörper [146]. Interessant ist hierbei, dass als äussere Hülle eine Einfachverglasung eingesetzt wurde, 15cm dahinter befindet sich ein hochreflektierender Sonnenschutz, die Bürofassade besteht aus einer Spezial-Isolierverglasung (Abstand 1.4m). Zu- und Abluftöffnungen sind in der Deckenebene alternierend angeordnet.

ohne horizontale und vertikale Abtrennungen haben infolge des Kamineffektes den gravierenden Nachteil hoher Austrittstemperaturen, die eine Fensterlüftung in oberen Etagen in Frage stellen. Weiterhin kennt man *Schacht-Kastenfenster-Systeme*, bei denen ein geschosshohes Kastenfenster mit Zuluftöffnung zum Aussenklima mit einer hohen, schachtförmigen Abluftöffnung kombiniert wird.

2.1.3 Verglaste Hallen (Atrien)

Bei verglasten Hallen innerhalb von Gebäuden kennt man Konfigurationen, die ein- bis allseitig von Gebäudeteilen umschlossen sein können. Atrien dienen als Wärmepuffer- bzw. Wärmespeicherzonen und sind vielfältig einsetzbar. Der Charakter des Freiraumes sollte frühzeitig in der Planung berücksichtigt werden, da sich hieraus Konsequenzen bezüglich des Energiebedarfes ergeben: An einen vollwertigen Innenraum (z.B. ein Bistro) werden andere Anforderungen hinsichtlich Behaglichkeitskriterien gestellt als an einen nur zeitweise genutzten Aussenbereich (z.B. ein Treppenhaus). Je nach Konfiguration kann ein Atrium dabei im unbeheizten Zustand durch sein Potenzial in Bezug auf die passive Solarenergienutzung massgeblich zur Energieeinsparung beitragen, wobei es in Abhängigkeit vom Dämmverhalten und Energiedurchlassgrad der Verglasung durch solare Energiegewinne und hohe Transmissionswärmeverluste im Winter geprägt ist.

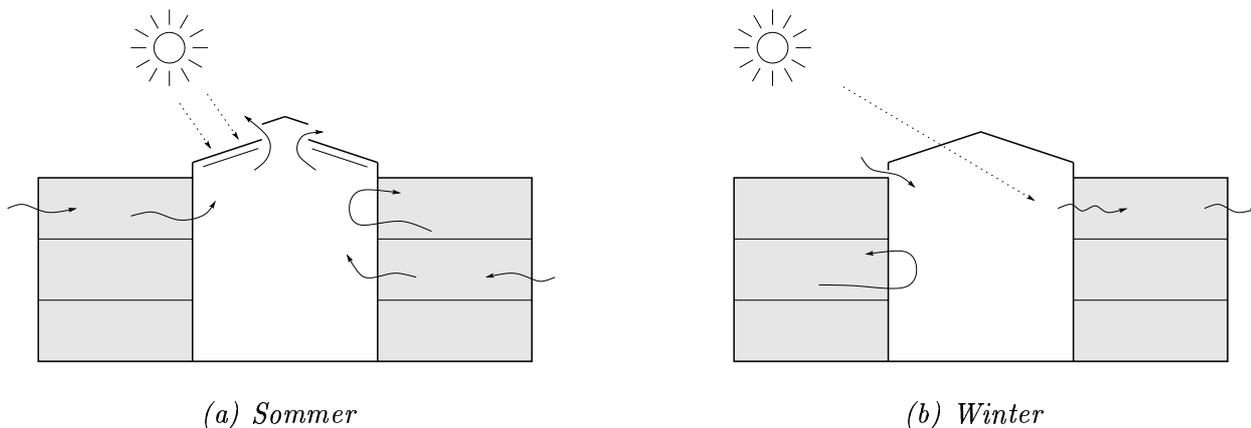


Abbildung 2.5: Passive Solarenergienutzung in Atrien [29, 129]

Die transienten Strömungsverhältnisse innerhalb eines Atriums werden massgeblich vom Sonnenstand beeinflusst, womit eine Approximation der Temperaturverteilung mit dimensionsreduzierten Ansätzen problematisch ist. Um eine vertikale Durchströmung zu ermöglichen, werden üblicherweise Lüftungskappen am Dach (als höchstem Punkt) und in der Fassade angeordnet. Sie müssen ausreichend gross dimensioniert werden, um die Bildung eines Warmluftpolsters unter dem Dach zu verhindern und eine ausreichende Ventilation zu gewährleisten, andererseits so platziert werden, dass Zugerscheinungen vermieden werden (über Kopfhöhe). Um sommerlicher Überhitzung entgegenzuwirken, sollte ein hinterlüfteter Sonnenschutz angebracht werden; ein wirksames Mittel zur Entwärmung stellt die Nachtlüftung dar [29, 88, 91, 129, 149].

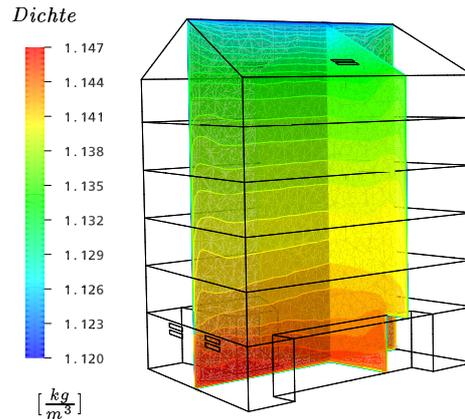


Abbildung 2.6: Beispiel Luftschichtung: Verteilung der Dichte ρ in einem Atrium (Sommer)

Häufig beobachtete Effekte sind eine *thermische Schichtung* (vgl. Abb. 2.6) und der winterliche *Kaltluftabfall* an der Fassade. Sollen beispielsweise die an ein Atrium grenzenden Räume über die Halle mit Frischluft versorgt werden, ist der Ausbildung einer thermischen Schichtung im Sommer entgegenzuwirken (Überhitzung) [149]. Auch im Winter ist diese zu vermeiden, da den unteren Regionen stets Energie zugeführt werden muss, die durch Konvektion sofort nach oben abtransportiert wird (Warmluftpolster). Zegerscheinungen durch kalte Luft entstehen, wenn sich Luftschichten im Winter infolge der kalten Fassade abkühlen und, bedingt durch ihre höhere Dichte, absinken (Kaltluftabfall). Weiterhin treten in der Heizperiode hohe Temperaturgradienten zwischen innen und aussen auf, wodurch bei ungenügender Durchmischung mit Warmluft Zegerscheinungen auftreten können [29, 149].

Eine thermische Schichtung ist geprägt von einem Temperaturgradienten in vertikaler Richtung und einer relativ homogenen horizontalen Temperaturverteilung. Die Ausbildung einer thermischen Schichtung wird bei unzureichender Ventilation nach AIULFI [29] durch die in Abbildung 2.7 dargestellten Situationen begünstigt, wie z.B. durch einen grossflächigen Strahler im oberen Bereich der Halle, verursacht durch Strahlungsabsorption an den Wänden oder einer Verschattungseinrichtung. Man kann ihr durch ausreichende Luftzirkulation entgegenwirken, im Sommer wie oben beschrieben durch geöffnete Lüftungsklappen oder im Winter durch Einbeziehung benachbarter Zonen in das Lüftungskonzept. Es sei angemerkt, dass die

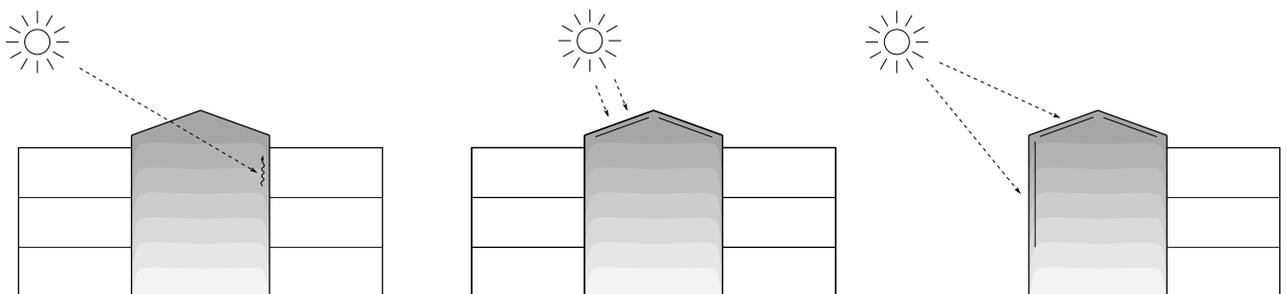


Abbildung 2.7: Ausbildung einer thermischen Schichtung

physikalische Situation somit dem umgekehrten Fall der Voraussetzungen für die Ausbildung einer Rayleigh-Bénard-Konvektion (vgl. Abschnitt 4.3.4.2) entspricht. Dort führt die Beheizung einer (ebenen und unendlich ausgedehnten) Bodenplatte und Kühlung einer (parallelen) Deckenplatte ab der kritischen Rayleighzahl zur Instabilität.

Für die Analyse von Raumklima und thermischem Komfort sollten deshalb jeweils für einen charakteristischen Sommer- und Wintertag Permutationen folgender Situationen als Grenzfälle betrachtet werden:

- Mit/ohne Verschattung,
- Lüftungsklappen tagsüber geöffnet/geschlossen,
- Nachtlüftung.

2.1.4 Sog- und Druckverteilung am Baukörper

Interessant ist in diesem Zusammenhang auch die sogenannte *Querlüftung*, die sich die natürliche Sog- und Druckverteilung am Baukörper zunutze macht und insbesondere bei hohen Gebäuden eingesetzt werden kann. Dabei ist darauf zu achten, dass die Druckunterschiede zwischen den Öffnungen nicht zu gross werden (Zugerscheinungen) und dass sich andererseits Querlüftung und Thermik überlagern können (ggf. keine Ventilation im Sommer) [149].

Die Verteilung der Kräfte ist abhängig von der Geometrie des umströmten Körpers, der Ausprägung der Gebäudekanten, der Oberflächenbeschaffenheit der Fassade, etc. und dem Anströmungsprofil. Die Bestimmung der Strömungsverhältnisse erfordert dabei, neben der Kenntnis von Hauptwindrichtung (Windhäufigkeitsverteilung) und atmosphärischer Grenzschicht, die Betrachtung der Bodenrauigkeit, der Geländeform und der umliegenden Bebauung (Form und Abstand) [143, 144]. Da die Natur der Aerodynamik von Baukörpern durch extrem hohe Reynoldszahlen in der Grössenordnung von $Re \approx \mathcal{O}(10^6 \dots 10^{11})$ geprägt ist, müssen zur näherungsweise Bestimmung von Druckbeiwerten (den c_p -Werten) aufwändige Windkanalversuche oder Berechnungen mit geeigneten Turbulenzmodellen durchgeführt werden. Dabei

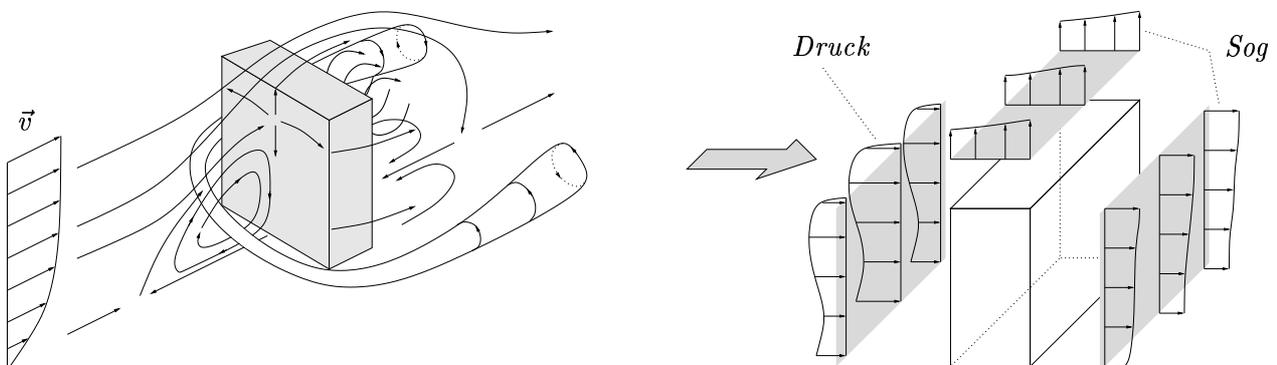


Abbildung 2.8: Strömungsverlauf und Sog- und Druckverteilung bei senkrechter Anströmung eines freistehenden, quaderförmigen Baukörpers bei Verhältnis $h/l = 2$ [143, 144]

spielt die Betrachtung der dynamischen Ähnlichkeit von turbulenten Strömungen bei hohen Reynoldszahlen eine wichtige Rolle, da Strömungsvorgänge in diesem Bereich sowohl für den skalierten Versuch als auch für die (direkte numerische) Simulation auf Höchstleistungsrechnern derzeit und in naher Zukunft ein unlösbares Problem darstellen.

Abbildung 2.8 zeigt exemplarisch die Umströmung eines quaderförmigen Gebäudes und die daraus resultierende Druckverteilung am Baukörper. Das Grenzschichtprofil kann dabei bis zu einer Dicke von etwa 0.15δ der Grenzschicht mit dem logarithmischen Wandgesetz beschrieben werden [143]. An den Gebäudekanten löst sich die Strömung ab, es kommt zur Ausbildung einer freien Scherströmung mit komplexen Rezirkulationsströmungen und einem Nachlaufgebiet. Der Staupunkt liegt auf etwa 0.8-facher Höhe der angeströmten Vorderseite.

Die Ausführungen dieses Abschnittes 2.1 machen deutlich, dass bei der Simulation von Luftströmungen in Innenräumen stets das Gesamtsystem eines Gebäudes betrachtet werden muss, da die Abhängigkeiten zwischen einzelnen Komponenten gravierenden Einfluss auf das Innenraumklima besitzen und unterschiedliche Randbedingungen implizieren.

2.2 Thermische Behaglichkeit

Sinn und Zweck der hochauflösenden Simulation von Raumluftrömungen innerhalb eines Gebäudeabschnittes ist es, ihre Auswirkungen auf das thermische Behaglichkeitsempfinden der Nutzer bereits in einer frühen Planungsphase abschätzen zu können. Nach DIN 1946 Teil 2 ist thermische Behaglichkeit gegeben, wenn der Mensch Lufttemperatur, Luftfeuchte, Luftbewegung und Wärmestrahlung in seiner Umgebung als optimal empfindet. Das Behaglichkeitsempfinden eines Menschen hängt dabei von einer Vielzahl von Parametern ab, die Raumlufthemperatur alleine ist als Indikator ungeeignet [173]. Zur näherungsweise Berechnung eines statistischen Masses zur Bewertung des Behaglichkeitsempfindens und lokaler Umgebungsbedingungen nach DIN EN ISO 7730 ist die Kenntnis von Aktivität, Bekleidungsgrad, mittlerer Lufttemperatur t_a [$^{\circ}C$] und mittlerer Strahlungstemperatur der Umschliessungsflächen \bar{t}_r [$^{\circ}C$], woraus die operative Temperatur $t_o = \frac{1}{2}(t_a + \bar{t}_r)$ nach DIN 1946-2 gebildet werden kann², ferner von der relativen bzw. lokalen mittleren Luftgeschwindigkeit v_{ar} bzw. v_a [$\frac{m}{s}$] mit Fluktuationen (Turbulenzgrad Tu [%]) und der relativen Luftfeuchte (Wasserdampfpartialdruck p_a [Pa]) erforderlich. Bereiche von empfohlenen operativen Raumtemperaturen können dabei den Normen [46] und [48] entnommen werden. Im Zusammenhang mit der Untersuchung und Bewertung der thermischen Behaglichkeit gilt FANGER als einer der Pioniere [62, 63, 64, 65].

Bezug auf den Körper als Ganzes. Zur quantitativen Bestimmung wird die Wärmebilanz des Körpers betrachtet, wobei folgende Parameter von Bedeutung sind [4, 173]:

- Die produzierte Energie ist die Differenz zwischen der Stoffwechselrate, dem Metabolismus M und der verrichteten mechanischen Arbeit W . Die auf die Körperoberfläche bezogene Wärmeleistung ist abhängig von der Aktivität und kann in der Einheit [met] ausgedrückt werden; $1met \sim 58.15 \frac{W}{m^2}$ entspricht der sitzenden Tätigkeit eines Erwachsenen [46]. Werte für den Energieumsatz können [48] entnommen werden.

²Zur Berechnung der *Empfindungstemperatur* vgl. auch den Algorithmus von GLÜCK in [78]

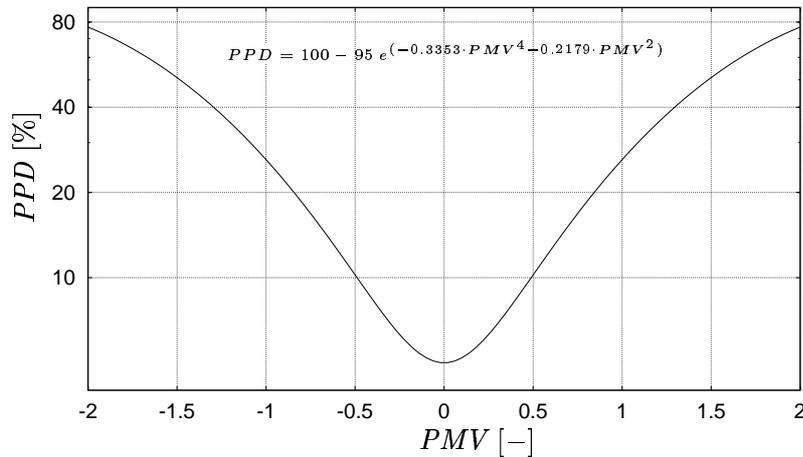


Abbildung 2.9: PPD-Index: Vorausgesagter Prozentsatz Unzufriedener nach DIN EN ISO 7730

- Die an die Umgebung abgegebene Energie setzt sich zusammen aus der Summe des konvektiven und radiativen Wärmestromes und der durch Wärmeleitung durch die Kleidung transmittierten Energie, ferner aus der Verdunstung über die Haut, der sensiblen Wärmeabgabe an die Atemluft und der respiratorischen Verdunstungskälte. Der Bekleidungsgrad wird als Wärmedurchlasswiderstand I_{cl} angegeben, wobei für leichte Bekleidung ein Wert von $1clo \sim 0.155 \frac{m^2K}{W}$ angenommen wird [47].

Ausgehend vom Gleichgewichtszustand dieser Größen kann nach DIN EN ISO 7730 der sogenannte *PMV-Index* (*Predicted Mean Vote*) nach Gl. (2.1) bestimmt werden. Dieser Wert entspricht der statistischen Bewertung des durch die genannten Größen beschriebenen Klimas auf einer 7-Punkte Skala ($+3=heiss$, $+2=warm$, $+1=etwas\ warm$, $0=neutral$, $-1=etwas\ kühl$, $-2=kühl$, $-3=kalt$) durch eine Personengruppe.

$$\begin{aligned}
 PMV = & \left[M - W - 3.05 \cdot 10^{-3} [5733 - 6.99(M - W) - p_a] \right. \\
 & - 0.42 [(M - W) - 58.15] - 1.7 \cdot 10^{-5} M(5867 - p_a) \\
 & - 1.4 \cdot 10^{-3} M(34 - t_a) - 3.96 \cdot 10^{-8} f_{cl} [(t_{cl} + 273)^4 - (\bar{t}_r + 273)^4] \\
 & \left. - f_{cl} h_c (t_{cl} - t_a) \right] \cdot (0.303 e^{-0.3036M} + 0.028)
 \end{aligned} \quad (2.1)$$

Gültige Parameter- und Wertebereiche und die Gleichungen zur iterativen Bestimmung der Oberflächentemperatur der Kleidung t_{cl} [°C] und des konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten h_c [$\frac{W}{m^2K}$] können der Norm entnommen werden.

Mit Kenntnis des PMV-Indexes ist es nun möglich, eine quantitative Aussage über den Prozentsatz der mit dem Klima unzufriedenen Personen vorzunehmen. Die Beziehung zwischen dem PMV- und dem nach Gl. (2.2) bestimmten *PPD-Index* (*Predicted Percentage of Dissatisfied*) ist in Abbildung 2.9 zu sehen.

$$PPD = 100 - 95 e^{(-0.3353 \cdot PMV^4 - 0.2179 \cdot PMV^2)} \quad (2.2)$$

Lokale Einflüsse. Neben den zuvor genannten Grössen sind Kriterien lokaler thermischer Behaglichkeit zu beachten, die insbesondere bei der Nutzung von Atrien eine bedeutende Rolle spielen. DIN EN ISO 7730 und DIN 1946-2 nennen Grenzwerte und Behaglichkeitsfelder hinsichtlich der typischen Erscheinungen *Zugluft* [64], *vertikaler Temperaturschichtung* [136], *zu warmer bzw. zu kalter Fussböden*, *Asymmetrien der Strahlungstemperatur* [63], d.h. einer einseitigen Erwärmung oder Abkühlung beispielsweise durch kalte Fensteroberflächen, ferner bezüglich der *Raumluftqualität* (Schadstoffkonzentration) und der *Luftfeuchte*, die zwischen 30% und 65% relativer Luftfeuchte betragen sollte.

Der *vertikale Temperaturgradient* sollte dabei höchstens $2K$ je m Raumhöhe betragen. Weiterhin kann der Grad einer Beeinträchtigung durch *Zugluft* für Menschen mit leichter Tätigkeit mit den oben genannten Eingangsparametern wie folgt berechnet werden:

$$PPD = (34 - t_a)(v_a - 0.05)^{0.62} (0.37 \cdot v_a \cdot Tu + 3.14) \quad (2.3)$$

2.3 Numerische Approximationsverfahren

In den letzten Abschnitten wurden Raumluftrömungen charakterisiert und ihr Einfluss auf den Energiehaushalt eines Gebäudes und den Komfort für die Nutzer abgeschätzt. Zur Approximation von natürlichen Raumluftrömungen, die durch dynamischen Winddruck auf der Gebäudehülle und durch Druckgradienten infolge von Dichteunterschieden durch Temperatur- bzw. Luftfeuchtgradienten induziert werden, unterscheidet man je nach Modellierungskomplexität zwischen

- empirischen Modellen,
- der Modellierung eines Druckknotennetzwerkes,
- thermischen Ein- bzw. Mehrzonenmodellen und
- CFD-Verfahren³.

Ein Überblick über verschiedene *empirische Modelle* zur Bestimmung der Luftwechselrate und der mittleren Strömungsgeschwindigkeit wird beispielsweise von ALLARD in [4] gegeben. Diese Verfahren eignen sich nur für einen Einsatz in einem sehr frühen Planungsstadium und besitzen einen schmalen Anwendungsbereich bei hoher Unschärfe. In [4] sind auch parametrische Umgebungsmodelle zur Bestimmung von Druckbeiwerten auf der Gebäudeoberfläche infolge Windanströmung zu finden.

Sollen neben der Betrachtung der Lüftungswärmeverluste auch Aussagen über die Luftqualität bzw. die thermische Behaglichkeit getroffen werden, müssen die Strömungsverhältnisse hochauflösend mit den Methoden der numerischen Strömungsmechanik, die in Kapitel 4 besprochen sind, berechnet werden (vgl. z.B. auch [86]). Die mit diesen Verfahren erreichbare Genauigkeit hängt dabei neben den spezifisch definierten Modellen der physikalischen Prozesse entscheidend von der Wahl der *Randbedingungen* ab. Da die Anwendung von CFD-Verfahren durch ihre Komplexität auf wenige Zeitschritte einer Ganzjahressimulation (etwa einen charakteristischen Sommertag in der Simulationsperiode) und auf ausgewiesene Gebäudeabschnitte (das Luftvolumen einer Zone) beschränkt ist, werden geeignete Näherungsverfahren wie die *dynamische Gebäudesimulation* benötigt. Bevor nun die näherungsweise Bestimmung von Luftströmungen in Bauwerken mit Hilfe eines *Druckknotennetzwerk-Modells* beschrieben wird, muss zunächst der Begriff des *dynamischen Mehrzonenmodells* erläutert werden.

2.3.1 Statische und dynamische Simulationsverfahren

Statische Verfahren zur Bestimmung des Energiebedarfes von Gebäuden basieren auf einer Bilanzierung von Energiesummen, wobei Wärmekapazitäten entweder nicht berücksichtigt werden oder die Trägheit des Gebäudes als einfacher Faktor eingeht. Somit sind diese Verfahren nur zur näherungsweisen Abschätzung des Jahresheizenergiebedarfes in frühen Planungsphasen einsetzbar und gestatten keine Aussagen über das raumzeitliche Verhalten von Temperaturverläufen und Wärmeströmen. Man unterscheidet Monats- und Jahresbilanzverfahren [56] und [200]. Ein weiterer Schwachpunkt beider letztgenannter Methoden ist, dass damit eine

³ *Computational Fluid Dynamics*

Abschätzung der besonders im Büro- und Verwaltungsbau auftretenden sommerlichen Kühllasten nicht möglich ist.

Dynamische Verfahren bilanzieren hingegen Leistungen von instationären Wärmeleitungs Vorgängen in Bauteilen, von konvektiver und radiativer Wärmeübertragung an Bauteiloberflächen, von internen Wärmequellen und von Enthalpieströmen, die sich auf Grund des interzonalen Luftaustausches oder von Luftwechseln mit der äusseren Umgebung ergeben. Sie berücksichtigen somit den kapazitativen Einfluss der Gebäudestruktur, der insbesondere im Zusammenhang mit den eingangs vorgestellten Konzepten zur passiven Solarenergienutzung von Bedeutung ist, wenn solare Gewinne über die Absorption an Bauteiloberflächen zur Erwärmung und zeitverzögerten Wärmeabgabe führen.

Man unterscheidet bei Ein- und Mehrzonenmodellen folgende Funktionalitäten und Berechnungsarten:

- Luftwechsel werden entweder über feste Luftwechselraten bestimmt oder über Druckdifferenzen berechnet (vgl. Abschnitt 2.3.4).
- Die Berechnung des instationären Wärmetransportes kann *numerisch*, z.B. über finite Differenzenmethoden, oder über a priori berechnete *Transferfunktionen* mit Hilfe einer Laplace-Transformation erfolgen (*response factor method*) [34, 128].
- Konvektive Wärmeströme und langwelliger Strahlungsaustausch werden entweder gemeinsam oder getrennt berechnet, man kennt *Ein- und Zweisternmodelle* [110]. Die Verteilung der in einer Zone eintreffenden kurzwelligen Solarstrahlung kann geometrisch oder nicht-geometrisch durch flächengewichtete Aufteilung erfolgen [34]. Auch beim langwelligen Strahlungsaustausch unterscheidet man zwischen geometrischen und nicht-geometrischen Verfahren. Erstgenannte basieren auf einer Berechnung von Sichtfaktoren, einem Sichtbarkeitsentscheid, und berechnen den Strahlungsaustausch beispielsweise mit Hilfe eines Radiosity-Verfahrens. FEIST quantifiziert in [67] und [68] die Unterschiede beider Herangehensweisen. Dieser Aspekt ist insbesondere bei der Betrachtung verglaster Hallen von Bedeutung, da die Ausbildung konvektiver Raumluftströmungen entscheidend von der Verteilung der Oberflächentemperaturen abhängt. In diesen Fällen ist somit die Verwendung eines geometrischen Strahlungsmodells zu bevorzugen.
- Feuchtetransport wird üblicherweise entweder nicht, nur in der Luft oder mit unterschiedlichen Ansätzen auch in Bauteilen betrachtet [34, 134].
- Flächengemittelte Wärmeübergangskoeffizienten können als zeitabhängig oder konstant vorgegeben oder in Abhängigkeit von Geometrie und Strömungsverhältnissen aus empirischen Zusammenhängen oder zuvor durchgeführten CFD-Simulationen bestimmt werden [15].
- Eine Kopplung mit haustechnischen Anlagen ist möglich, indem diese idealisiert (feste Raumtemperatur) oder detailliert, d.h. durch explizite Modellierung und ggf. unter Einbeziehung von Regelungsstrategien [34], behandelt werden.

Heute etablierte Programmsysteme stammen grossteils aus den siebziger Jahren und werden noch heute weiterentwickelt. Da die Komplexität dieser Systeme sukzessive im Laufe der Entwicklung der Prozessorleistung zunahm, sind sie stellenweise durch sequentielle Verfahren und

eine nicht-adaptive Zeitschrittwahl geprägt, wodurch Rückkopplungseffekte, insbesondere von Systemen mit anderem Frequenzverhalten (z.B. gebäudetechnische Anlagen und Regelungsstrategien), nur unzureichend erfasst werden können. Viele Systeme sind mittlerweile durch numerische Verfahren ergänzt worden. Weite Verbreitung haben Systeme wie *ESP-r* [34], *TRN-SYS* [110], *EnergyPlus* [57], *TAS* [186], *Apache* [7], *BLAST*, *SMILE* [133] und *DOE2* gefunden.

Der folgende Abschnitt geht nun auf die Wärmeübertragungsmechanismen am und im Baukörper ein. In den Abschnitten 2.3.3 und 2.3.4 wird dann ein Ansatz zur Diskretisierung und numerischen Simulation angegeben. Einen Eindruck von der Komplexität einer Mehrzonen-Simulation erhält man, wenn man bedenkt, dass bereits bei Verwendung von einigen wenigen Zonen und üblicher schichtweiser Diskretisierung von Bauteilen ein Gleichungssystem mit mehreren tausend Unbekannten entsteht, das zu jedem Zeitschritt einer Ganzjahressimulation, mit einer Auflösung von Minuten bis Stunden, gelöst werden muss.

2.3.2 Physikalische Wirkungszusammenhänge

Bevor die Formulierung der Erhaltungsgleichungen erfolgen kann, müssen der Vollständigkeit halber die Wärmeströme am Baukörper und ihre Wirkungszusammenhänge charakterisiert werden. Für eine ausführliche Darstellung wird dabei auf die weiterführende Literatur [4, 34, 78, 134] und die darin angeführten Referenzen verwiesen. Allgemein gilt es, bei der Modellierung die Integrität eines Gebäudes und der darin enthaltenen Anlagentechnik zu erhalten. Das thermische Verhalten eines Gebäudes ist vom komplexen und dynamischen Zusammenwirken vieler Komponenten abhängig, die grossteils durch nichtlineare (in der Regel temperaturabhängige) Eigenschaften und unterschiedliches Frequenzverhalten geprägt sind. Je nach Modellierung kann das physikalische Verhalten durch gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung oder durch parabolische Differentialgleichungen zweiter Ordnung (Fouriersche Wärmeleitung) beschrieben werden.

Ein Gebäude ist den Einflüssen seiner Umgebung ausgesetzt, die in Form von Klimadatenansätzen, wie z.B. der *Meteonorm*-Datenbasis [126] oder den *Testreferenzjahren* bestimmter Klimaregionen, quantifiziert sind. In Abhängigkeit von Standort (Breitengrad, Zeitverschiebung), Jahrestag, Tageszeit und Bewölkungsgrad können damit die Position der Sonne (der Einfallswinkel) und die Werte der diffusen und direkten Sonneneinstrahlung I_{diff} und I_{dir} (bzw. der Gesamt- und der Direktstrahlung in $[\frac{kJ}{h \cdot m^2}]$) mit dem Modell eines isotropen Himmels bestimmt werden [49]. Sind der Neigungs- und Azimuthwinkel einer Bauteiloberfläche bekannt, können flächenspezifische Einstrahlungswerte berechnet werden. Weiterhin enthalten Wetterdatensätze Werte zur Umgebungstemperatur θ_{amb} , Luftfeuchte und mittleren Windgeschwindigkeit.

Betrachten wir zunächst die Gebäudehülle. Als Wärmeübertragungsmechanismen an der Oberfläche opaker und transparenter Bauteile sind Konvektion, Strahlung und Wärmeleitung zu nennen [94]. Die *konvektive Wärmeübertragung* q_{conv} wird massgeblich von der Ausbildung der wandnahen Grenzschicht und somit von den Windströmungsverhältnissen und der Umgebungstemperatur bestimmt (erzwungene Konvektion). Ansätze zur Berechnung von Wärmeübergangskoeffizienten können beispielsweise [4, 15, 34] und [134] entnommen werden. Abschnitt 2.3.6 geht auf die Wahl der Parameter im Zusammenhang mit einer Anbindung an ein

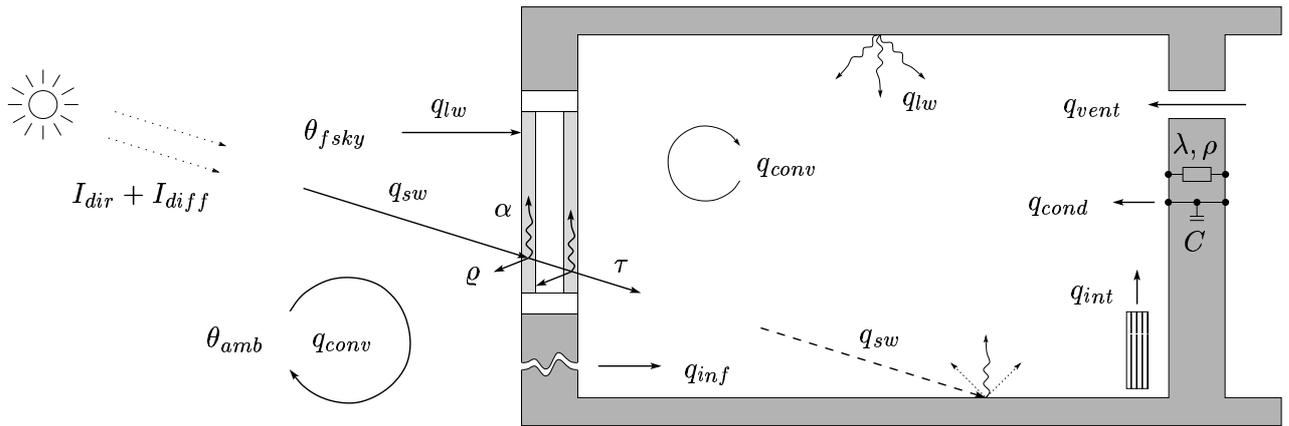


Abbildung 2.10: Physikalisches Modell der Wärmeübertragung am und im Baukörper. Wärmeleitung im Bauteil kann in Analogie zum elektrischen Netzwerk dargestellt werden.

CFD-Verfahren ein. Zur Berechnung des *langwelligen Strahlungsaustausches* q_{lw} mit der Umgebung kann eine Emissivität des Himmels und eine fiktive Himmelstemperatur T_{fsky} nach [49] verwendet werden. Einfallende *kurzwellige Solarstrahlung* wird an opaken Oberflächen reflektiert und teilweise absorbiert, bei mehrschichtigen transparenten Bauteilen ist eine komplexe Wechselwirkung zwischen vorder- und rückseitiger Transmission τ , Absorption α in den einzelnen Glasschichten und Reflexion ϱ , jeweils in Abhängigkeit vom Einstrahlungswinkel, zu beachten [147]. Dabei sind die thermischen Eigenschaften der Gasfüllung und die Emissivitäten und Leitfähigkeiten der Glasschichten von Bedeutung. Strahlungsabsorption q_{sw} führt allgemein zur Erhöhung von Bauteil- bzw. Schichttemperaturen. Globale solare und optische Eigenschaften von Verglasungen können mit Hilfe eines detaillierten Fenstermodells, wie z.B. [72], rekursiv berechnet werden [162, 163]. Für vereinfachte statische Berechnungen können diese auch in einem Wärmedurchgangswiderstand und einem Gesamtenergiedurchlassgrad ausgedrückt werden. Grundlagen der Fenstermodellierung sind vom Autor ausführlich in [193] beschrieben.

Innerhalb von Bauteilen tritt *instationäre Wärmeleitung* q_{cond} auf. Bauphysikalische Eigenschaften der Bauteilschichten sind die Wärmeleitfähigkeit des Materials λ [$\frac{W}{m \cdot K}$], die Dichte ρ [$\frac{kg}{m^3}$] und die spezifische Wärmekapazität C [$\frac{J}{kg \cdot K}$]. Unter Vernachlässigung der transienten Einflüsse und der Annahme konstanter thermischer Eigenschaften kann man für die statische Bilanzierung von Transmissionswärmeverlusten den Wärmedurchgangswiderstand eines Bauteils, den sogenannten U-Wert [$\frac{W}{m^2 \cdot K}$], bestimmen. Dabei wird aber auch die räumliche Integrität vernachlässigt, womit beispielsweise einem U-Wert nicht mehr entnommen werden kann, ob ein Dämmstoff an der Innen- oder Aussenseite der Gebäudehülle angebracht ist. Somit können dann keinerlei Aussagen über die Wirkung kapazitiver Einflüsse oder den Feuchtetransport in einem Bauteil getroffen werden [34].

Kurzwellige Strahlung, die durch Transmission in den Innenraum gelangt, wird wiederum teilweise absorbiert und mehrfach reflektiert. Bei der Bestimmung des konvektiven Wärmeübergangs innerhalb einer Zone ist zwischen freier, erzwungener und gemischter Konvektion zu unterscheiden. Weiterhin muss der langwellige Netto-Strahlungsaustausch zwischen den Um-

schliessungsflächen einer Zone bestimmt werden, der sich aufgrund von Emission (Annahme eines grauen Strahlers), Mehrfachreflexionen (diffus, spektral, gemischt) und Absorption einstellt.

Schliesslich sind die Einflüsse interner Wärmequellen q_{int} und haustechnischer Anlagen (Heizung), und die Enthalpieströme zwischen Umgebung und benachbarten Zonen q_{vent} und durch Infiltration q_{inf} zu nennen. Dabei kann die Charakteristik unterschiedlicher Strömungspfade näherungsweise mit Hilfe eines Potenzansatzes für den Luftmassenstrom bestimmt werden, vgl. auch [4] und Abschnitt 2.3.4.

2.3.3 Finite-Volumen Formulierung der Wärmestrombilanz

Bei der Bilanzierung von Wärmeströmen müssen die Prinzipien der Energie-, Massen- und Impulserhaltung beachtet werden. Da das träge thermische Verhalten eines Gebäudes massgeblich von der instationären Wärmeleitung in Bauteilen beeinflusst wird, liegt es nahe, die Bestimmungsgleichungen der konvektiven bzw. advektiven und radiativen Wärmeströme zu linearisieren, d.h. äquivalente Leitfähigkeiten einzuführen, um auch diese Flüsse mit dem Gesetz der Wärmeleitung beschreiben zu können. Die Energiebilanz kann somit durch die folgende *Integralform der Erhaltungsgleichung* ausgedrückt werden:

$$\rho C \int_V \frac{\partial \theta}{\partial t} dV = k \int_S \frac{\partial \theta}{\partial n} dS + q \quad (2.4)$$

Die Änderung der in einem Volumen V enthaltenen Energie entspricht somit dem Betrag der über den Rand der Oberfläche S zu- oder abgeführten Energiemenge zuzüglich des Quellterms der inneren Wärmeproduktion q , wobei die Dichte ρ , spezifische Wärmekapazität C und Leitfähigkeit k als konstant angenommen sind.

Ein üblicher Ansatz zur Diskretisierung eines Gebäudes ist dessen Zerlegung in eine oder mehrere Zonen, deren Luftvolumen in ein oder mehrere Fluid-Volumen unterteilt werden, die ihrerseits durch je einen sogenannten Luftknoten repräsentiert werden. Die instationäre Wärmeleitung innerhalb der Struktur betrachtet man *eindimensional*, indem diese schichtweise (oder feiner) durch Anordnung von Knoten an den Oberflächen und Schichtübergängen (oder auch innerhalb der Schichten) diskretisiert wird. In Analogie zu einem elektrischen Netzwerk ergibt sich damit ein System aus in Reihe geschalteten Wärmedurchgangswiderständen mit Kapazitäten, die durch die Parameter Dichte und spezifische Wärmekapazität bestimmt sind. Die thermophysikalischen Eigenschaften einzelner Schichten werden dabei als isotrop angenommen. Dem mehrdimensionalen Einfluss von Wärmeströmen innerhalb der Struktur kann durch linienbezogene Wärmebrückenverlustkoeffizienten Rechnung getragen werden. Geeignete Näherungsverfahren sind vom Autor ausführlich in [193] dargestellt.

Mit dem Ziel, Bestimmungsgleichungen für die unbekanntenen Knotentemperaturen zu erhalten, bietet sich als Verfahren zur Diskretisierung die im folgenden dargestellte *Finite-Volumen Formulierung* nach CLARKE an [34]. Der Vorteil liegt darin, dass die Erhaltungsgleichungen direkt auf die *Kontrollvolumen* angewendet werden und somit auch bei einer groben Diskretisierung

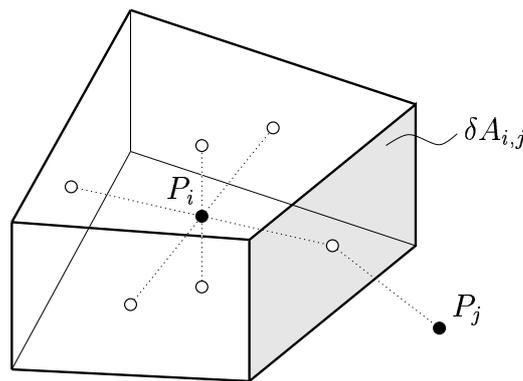


Abbildung 2.11: Beispiel: 6-seitiges Kontrollvolumen

erfüllt werden. Dabei ist ein Mittelweg zwischen Diskretisierungsgenauigkeit und erforderlicher Rechenzeit zu wählen. Weiterhin führen die inhärenten Wärmeübertragungsmechanismen zwischen den Gebieten, die miteinander in thermodynamischem Kontakt stehen, zur Bildung 'anisotroper' Kontrollvolumen. Mit dem Ansatz

$$\rho_i(\xi)C_i(\xi)\delta V(\xi)\frac{\theta_i(t+\delta t)-\theta_i(t)}{\delta t} = \sum_{j=1}^n K_{i,j}(\theta_j(\xi)-\theta_i(\xi)) + q_i(\xi) + \epsilon \quad , \quad (2.5)$$

zur Diskretisierung mit Hilfe eines allgemeinen, n -seitigen Kontrollvolumens um einen Punkt P_i , wie in Abbildung 2.11 exemplarisch für den Fall eines 6-seitigen Elementes dargestellt, sind für die Leitfähigkeiten $K_{i,j}$ zwischen dem Punkt P_i und allen damit verbundenen Punkten P_j mit $j = 1, \dots, n$ und Begrenzungsfläche $\delta A_{i,j}$ je nach Schnittstellentyp folgende Fälle zu unterscheiden. In Abbildung 2.12 sind die ersten beiden Fälle für den eindimensionalen Fall dargestellt.

- Liegen beide Punkte P_i und P_j innerhalb der Struktur, d.h. findet der Wärmetransport ausschliesslich über Wärmeleitung statt, entspricht $K_{i,j} = \delta A_{i,j}k_{i,j}$ mit dem Durchgangs-

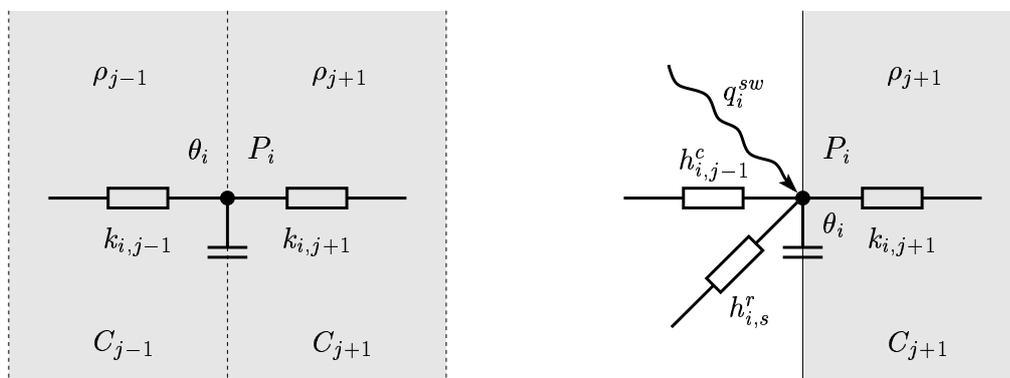


Abbildung 2.12: Schnittstellentypen: Im linken Fall liegt das Kontrollvolumen komplett innerhalb der Struktur, im rechten Fall an der Oberfläche.

widerstand $k_{i,j}$ der jeweiligen Schicht und den volumengemittelten Grössen $\rho_i(\xi)$ bzw. $C_i(\xi)$ zum Zeitpunkt ξ .

- Befindet sich Punkt P_i an einer Bauteiloberfläche, findet die Wärmeübertragung einerseits konduktiv in Richtung Struktur (s. oben), andererseits radiativ und konvektiv in Richtung Fluidvolumen statt. In diesem Fall ist ein Term hinsichtlich konvektivem Austausch mit dem Luftknoten, $K_{i,j}^c = \delta A_{i,j} h_{i,j}^c$, zu addieren, und die Quellterme bezüglich kurzwelliger Strahlungsabsorption q_i^{sw} an der Oberfläche und langwelligem Strahlungsaustausch mit allen m umliegenden Oberflächen $q_i^{lw} = \sum_{s=1}^m h_{i,s}^r \delta A_{i,j} (\theta_s - \theta_i)$ zu berücksichtigen. h^c und h^r sind dabei die linearisierten Wärmeübergangskoeffizienten.
- Liegt das Interface zwischen zwei Fluidvolumen, so ist der advective Energietransport zu bestimmen. Mit dem Enthalpiestrom $\dot{m}_{i,j}(\xi)$ zwischen beiden Volumen, auf dessen Bestimmung im nächsten Abschnitt eingegangen wird, ergibt sich $K_{i,j} = \dot{m}_{i,j}(\xi) \bar{\rho}_i(\xi) \bar{C}_i(\xi)$, wobei die überstrichenen Grössen in derjenigen Region ausgewertet werden, aus der der Zustrom erfolgt.

In Gl. (2.5) bezeichnet ϵ den Diskretisierungsfehler. Wird als Zeitdiskretisierung ein *explizites Euler-Verfahren erster Ordnung* gewählt, d.h. werden alle Grössen zum Zeitpunkt $\xi = t$ ausgewertet, erhält man ein System unabhängiger Gleichungen, deren unbekannte Knotenwerte zu jedem Zeitschritt direkt berechnet werden können, da die Werte zur Zeit t als bekannt vorausgesetzt sind. Mit der Fourierzahl

$$F = \frac{k \delta t}{\rho C \delta x^2} \quad , \quad (2.6)$$

die das Verhältnis von Wärmeproduktions- und Wärmespeicherrate definiert [34], ergibt sich das Stabilitätskriterium des expliziten Verfahrens zu $F \leq \frac{1}{2}$.

Die Auswertung der Grössen zum Zeitpunkt $\xi = t + \delta t$ führt zu einem *impliziten* Schema. Da jede Gleichung Terme gegenwärtiger und zukünftiger Zeitreihen enthält, muss das entstehende algebraische Gleichungssystem zu jedem Zeitschritt *direkt* oder *iterativ* gelöst werden. Ein implizites Verfahren besitzt dabei den Vorteil höherer Stabilität gegenüber einem expliziten Verfahren; grosse Zeitschritte führen allerdings zu grossen Diskretisierungsfehlern.

Die gleichmässige Wichtung beider Verfahren führt zum sogenannten *Crank-Nicolson* Verfahren, das gute Konvergenzeigenschaften besitzt und eine variable Zeitschrittweite ermöglicht. In Gl. (2.7) sind der Übersichtlichkeit halber die Kopplungskoeffizienten an das eigene bzw. an andere Kontrollvolumen in $\alpha_i(\xi)$ bzw. $\beta_i(\xi)$ zum Zeitpunkt ξ zusammengefasst.

$$\alpha_i(t + \delta t) \theta_j(t + \delta t) - \sum_{j=1}^n \beta_j(t + \delta t) \theta_j(t + \delta t) - \frac{\delta t q_i(t + \delta t)}{\delta V} = \alpha_i(t) \theta_j(t) - \sum_{j=1}^n \beta_j(t) \theta_j(t) - \frac{\delta t q_i(t)}{\delta V} \quad (2.7)$$

Mit dieser Darstellung wird in der Differentialgleichung der *Fourierschen Wärmeleitung* nach Gl. (2.8) der Differentialquotient der räumlichen Ableitung zweiter Ordnung jeweils durch

einen zentralen Differenzenquotienten ersetzt und die Zeitableitung als Vorwärts- (explizit) bzw. Rückwärtsdifferenz (implizit) behandelt.

$$\rho_i C_i \frac{\partial \theta_i}{\partial t} = k_i (\nabla^2 \theta)_i + q'_i \quad (2.8)$$

Das bei entsprechender Anordnung entstehende Gleichungssystem der Form

$$\mathbf{A}\Theta_{t+1} = \mathbf{B}\Theta_t + \mathbf{C}$$

weist dabei eine *dünnbesetzte Matrix* \mathbf{A} auf. Die Anwendung eines direkten Verfahrens mit der sukzessiven Elimination der Unbekannten mit dem *Gaußschen Algorithmus* oder dem *Cholesky-Verfahren* würde deshalb zu langen Rechenzeiten und hohem Bedarf an Speicherplatz führen [175, 176, 177]. Eine Alternative stellt die Verwendung eines iterativen Verfahrens dar, das die Eigenschaft der schwachen Besetzung der Koeffizientenmatrix ausnützen kann [176], wie z.B. die *Methode der konjugierten Gradienten*. Eine wesentliche Konvergenzbeschleunigung kann auch mit Hilfe von *Mehrgitterverfahren* erreicht werden. CLARKE beschreibt in [34] Techniken, wie das Gleichungssystem strukturiert werden kann, um eine *Partitionierung* des Systems zu ermöglichen und den Charakter der Dünnbesetztheit zu entfernen. Dieses Vorgehen hat den entscheidenden Vorteil, dass die Untermatrizen dann in Abhängigkeit von ihrem Frequenzverhalten mit geeigneten direkten Verfahren invertiert werden können. Beispielsweise erfordert die numerische Simulation eines Radiators deutlich kürzere Frequenzen (*Zeitskala: $\mathcal{O}(\text{Minuten})$*) als die Betrachtung der Wärmeleitung in massiven Wänden (*Zeitskala: $\mathcal{O}(\text{Stunden})$*).

Zur Bestimmung der verwendeten linearisierten konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten ist nun die Betrachtung der Massen- und Impulserhaltung notwendig, worauf im nächsten Abschnitt eingegangen wird.

2.3.4 Berechnung der Enthalpieströme mit Druckknotennetzwerk

Für die Bestimmung des Energiebedarfes hinsichtlich Luftaustausch ist es meist ausreichend, eine zur Druck- und Temperaturverteilung korrespondierende Bilanz der Luftmassenströme näherungsweise mit Hilfe eines *Druckknotennetzwerkes* zu bestimmen, wobei den Verbindungen zwischen den Knoten die *Strömungspfade* durch das Gebäude entsprechen. In den vorhergehenden Abschnitten wurde bereits auf die physikalischen Zusammenhänge hingewiesen und die Antriebskräfte der natürlichen Lüftung von Gebäuden wurden beschrieben. Randbedingung eines Druckknotennetzwerkes stellt somit die statische und dynamische Druckverteilung an den äusseren Knoten des Baukörpers dar, die sich infolge Windumströmung und thermischer Schichtung ergibt.

Bestimmung der Luftmassenströme. Unter der Annahme stationärer, inkompressibler Strömungsverhältnisse und einer uniformen Temperaturverteilung θ_i innerhalb eines jeweils durch einen Knoten repräsentierten Fluidvolumens i mit Druck p_i kann der Druckabfall zwischen zwei über einen Strömungspfad verbundenen Volumina mit Hilfe der *Bernoulli-Gleichung* bestimmt werden. Diese ergibt sich nach [75] aus dem Energiesatz für Stromröhren mit spezifischer Dissipation ϕ und ohne Zu- und Abfuhr mechanischer Arbeit in der sogenannten *Druckform* zu

$$\frac{\rho}{2} v_1^2 + p_1 + \rho g z_1 - \phi_{1,2} = \frac{\rho}{2} v_2^2 + p_2 + \rho g z_2 \quad . \quad (2.9)$$

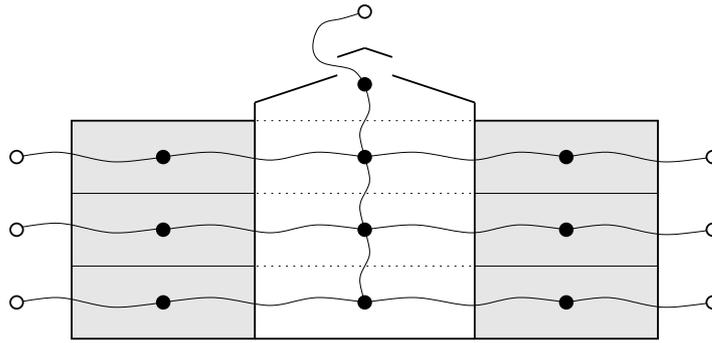


Abbildung 2.13: Beispiel: Druckknotennetzwerk in Gebäude mit Atrium

Wird der dynamische Anteil vernachlässigt, so ergibt sich für den lokalen Druckunterschied zwischen zwei Knoten i und j auf Grund dissipativer Einflüsse infolge von Reibungs- und dynamischen Verlusten

$$\Delta p_{i,j} = p_I - p_J + \rho_i(\theta)g(z_I - z_i) - \rho_j(\theta)g(z_J - z_j) \quad , \quad (2.10)$$

mit den Referenzdrücken p_I bzw. p_J an den Referenzknoten z_I bzw. z_J und den relativen Höhenpositionen z_i bzw. z_j der Öffnungen. Mit Hilfe des idealen Gasgesetzes kann die temperaturabhängige Dichte dabei nach Gl. (2.11) bestimmt werden.

$$\rho(\theta) = \frac{\rho_0 \theta_0}{\theta} \quad . \quad (2.11)$$

Mit Hilfe der Bernoulli-Gleichung kann nun ein Ausdruck für den Luftmassenstrom auf Grund einer Druckdifferenz gefunden werden, wobei dieser mit einem Verlustkoeffizienten C_d zur Berücksichtigung des Strömungswiderstandes multipliziert wird:

$$\dot{m} = \text{sign}(p_i - p_j) C_d \rho A \sqrt{\frac{2 |\Delta p|}{\rho}} \quad (2.12)$$

Gl. (2.12) kann bei grossen Öffnungen, wie z.B. geöffneten Fenstern, mit $C_d = 0.7$ angewendet werden. Bei gekippten Fenstern kann der Öffnungsbeiwert beispielsweise nach [201] bestimmt werden. Zur näherungsweise Charakterisierung der unterschiedlichen Strömungspfade bei engen Ritzen und Spalten wird üblicherweise ein allgemeiner Potenzansatz für den Luftmassenstrom in der Form

$$\dot{m} = \text{sign}(p_i - p_j) \rho k_d |\Delta p|^x \quad (2.13)$$

gewählt [92], der für den vollständig turbulenten Fall mit $x = 0.5$ Gl. (2.12) entspricht, d.h. $k_d = C_d A (2/\rho)^{0.5}$. Für laminare Strömungen in engen Ritzen wird der Exponent zu $x = 1$ gewählt, womit der Massenstrom von der dynamischen Viskosität μ der Luft bestimmt wird. Nach [134] berechnet sich der Durchflusskoeffizient k_d mit dem Spaltdurchmesser d und der Spaltlänge L in diesem Fall zu

$$k_d = \frac{\pi d^4}{128 \mu L} \quad . \quad (2.14)$$

Es ist anzumerken, dass sich auf Grund der Temperaturschichtung der Luft ein bi-direktionaler Luftaustausch einstellt, vgl. auch Abbildung 2.2 weiter oben. Durch Bestimmung der Nulllinie und Integration über ein angenommenes oder empirisch bestimmtes Geschwindigkeitsprofil können dann die beiden Massenströme für den Zu- und Abfluss bestimmt werden.⁴

Massenbilanz. Durch die *Kontinuitätsbedingung* (2.15) für inkompressible Fluide ($\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$) ergibt sich für ein Kontrollvolumen die Forderung, dass die Summe aller Zu- und Abflüsse gleich Null sein muss. Die Anwendung des Prinzips der *Massenerhaltung* an jedem Knoten führt damit auf ein System nichtlinearer Gleichungen mit den Knotendrücken als Unbekannten bei gegebenen Randbedingungen.

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.15)$$

Iterative Lösung des Gleichungssystems. Zur iterativen Lösung dieses Systems wird üblicherweise das *Newton-Raphson-Verfahren* eingesetzt, das sich durch sehr schnelle Konvergenz innerhalb weniger Iterationsschritte auszeichnet [95]. Die Lösung des Gleichungssystems

$$\mathbf{R}(\mathbf{p}) = 0 \quad (2.16)$$

mit den Unbekannten $\mathbf{p} = [p_i]$ und Residuen

$$\mathbf{R}(\mathbf{p}) = [R_i(p_i)] \quad \text{mit} \quad R_i(p_i) = \sum_{j=1}^{n_i} \dot{m}_{i,j} = \sum_{j=1}^{n_i} \rho k_{d_{i,j}} \text{sign}(p_i - p_j) |p_i - p_j|^{x_{i,j}} \quad (2.17)$$

für die n_i Massenströme zu bzw. von einem Knoten i mit $j = 1, \dots, n_i$ erfolgt bei gegebenen Werten \mathbf{p}_k zu jedem Iterationsschritt k durch sukzessive Berechnung der Näherungswerte

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{p}_k + \omega \mathbf{c} \quad (2.18)$$

der exakten Lösung bezüglich der Korrekturwerte \mathbf{c} . Die Wahl des Relaxationskoeffizienten zu $\omega = 1.0$ entspricht einem Newton-Raphson Korrekturschritt. Die Korrekturwerte \mathbf{c} werden dabei durch die Bildung der *linearen* Approximation

$$\mathbf{R}(\mathbf{p}_{k+1}) \approx \mathbf{R}(\mathbf{p}_k) + D \mathbf{R}(\mathbf{p}_k)[\mathbf{c}] = 0 \quad , \quad (2.19)$$

d.h. unter Berücksichtigung der konstanten und linearen Terme im Sinne einer Taylorreihenentwicklung, bestimmt. Die Richtungsableitung kann nach BONET in der Umgebung $\epsilon = 0$ durch Anwendung der Kettenregel wie folgt ausgewertet werden [20]:

$$D \mathbf{R}(\mathbf{p}_k)[\mathbf{c}] = \left. \frac{d}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} \mathbf{R}(\mathbf{p}_k + \epsilon \mathbf{c}) = \mathbf{J}(\mathbf{p}_k) \mathbf{c} \quad (2.20)$$

In der Literatur zu Finite-Element-Verfahren wird die *Jacobi-Matrix*

$$\mathbf{J}(\mathbf{p}_k) = [J_{i,j}(\mathbf{p}_k)] \quad \text{mit} \quad J_{i,j}(\mathbf{p}_k) = \left. \frac{\partial R_i}{\partial p_j} \right|_{\mathbf{p}_k} \quad (2.21)$$

⁴In [4] wird ein entsprechendes Verfahren angegeben.

dabei auch als *tangentiale Steifigkeitsmatrix* \mathbf{K} bezeichnet. Durch Substitution der Ableitung in Gl. (2.19) durch Gl. (2.20) ergibt sich ein lineares Gleichungssystem für die unbekanntenen Korrekturwerte \mathbf{c} , das zu jedem Iterationsschritt gelöst werden muss:

$$\mathbf{c} = -\mathbf{J}(\mathbf{p}_k)^{-1} \mathbf{R}(\mathbf{p}_k) \quad (2.22)$$

Die Diagonalelemente der Jacobi-Matrix entsprechen dabei den Änderungsraten der Residuen hinsichtlich einer Druckänderung am jeweiligen Knoten i zwischen zwei Iterationsschritten,

$$J_{i,i} = \sum_j^{n_i} \left(\frac{\partial \dot{m}_{i,j}}{\partial p_i} \right)_i, \quad (2.23)$$

alle anderen Elemente der Matrix geben die Änderungsrate der Massenströme hinsichtlich der Druckänderung zwischen den Knoten i und j an,

$$J_{i,j} = \sum_j^{n_i} \left(\frac{\partial \dot{m}_{i,j}}{\partial p_j} \right)_i \quad \text{für } i \neq j. \quad (2.24)$$

Eine Beschleunigung der Konvergenz kann mit Hilfe von Relaxation erreicht werden. WALTON schlägt hierfür eine Extrapolation der Korrekturwerte $c_{i,k}$ zum Iterationsschritt k durch Multiplikation mit folgenden individuellen Relaxationsfaktoren vor [95, 199]:

$$\omega_i = \frac{1}{1 - (c_{i,k}/c_{i,k-1})} \quad (2.25)$$

Bei der betrachteten Problemklasse ist $\mathbf{J}(\mathbf{p}_k)$ nichtsymmetrisch und dünnbesetzt. Die Lösung des Gleichungssystems (2.22), d.h. die Invertierung der Matrix $\mathbf{J}(\mathbf{p}_k)$, kann nun beispielsweise direkt mit einer LR-Zerlegung von $\mathbf{J}(\mathbf{p}_k)$ in das Produkt \mathbf{LR} aus einer linken unteren und einer rechten oberen Dreiecksmatrix erfolgen, womit das Gleichungssystem durch einfaches Vorwärts- und anschließendes Rückwärtseinsetzen gelöst werden kann (Algorithmus von GAUSS) [176]. Bei einem kleinen Gleichungssystem mit einer geringen Anzahl von Unbekannten ist ein direktes Verfahren dabei einem iterativen oftmals überlegen. Weiterhin erweist sich zur Erhöhung der Rechengenauigkeit eine (teilweise oder vollständige) *Pivotisierung* als sinnvoll, indem Zeilen bzw. Spalten der Matrix vertauscht werden [192].

2.3.5 Strategien zur partitionierten Lösung

Insbesondere bei auftriebsgetriebenen Strömungen besteht eine starke Abhängigkeit zwischen Wärme- und Luftmassenströmen, womit die Art und Weise, wie die beiden Berechnungsverfahren Mehrzonen- und Druckknoten-Modell miteinander gekoppelt werden, entscheidenden Einfluss auf die Genauigkeit der Ergebnisse besitzt. HENSEN gibt in [93] eine Übersicht über die verschiedenen Herangehensweisen und quantifiziert deren Unterschiede. Allgemein unterscheidet man folgende Varianten [4]:

- *Direkte Kopplung.* Werden alle Gleichungen zu einem globalen System assembliert, spricht man von direkter Kopplung. Dieses Vorgehen ist dabei aus den oben genannten Vorteilen, die eine Partitionierung der Matrizen eröffnet, nicht sinnvoll. Weiterhin gibt es Ansätze, die versuchen, beide Phänomene, Wärmetransport und Luftströmung, in einer einzigen Gleichung zu formulieren ('full integration').

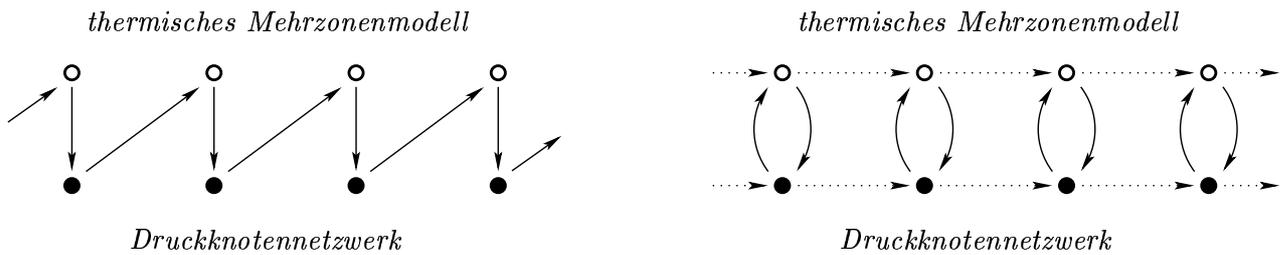


Abbildung 2.14: Schema des sequentiellen (links) und des iterativen Verfahrens (rechts)

- *Sequentielles Verfahren ('ping-pong')*. Abbildung 2.14 links zeigt das Schema einer 'hintereinandergeschalteten' Berechnung der Gleichungen des thermischen Mehrzonenmodells und des Druckknotennetzwerkes. Das Vorgehen entspricht einem expliziten Zeitschrittverfahren. Durch die entkoppelte Herangehensweise sind sehr kleine Zeitschritte erforderlich, um Konvergenz und hinreichend genaue Ergebnisse zu erzielen (insbesondere bei grossen Öffnungen).
- *Iterative Verfahren ('onion')*. In Abbildung 2.14 rechts ist die gekoppelte Lösung beider Systeme dargestellt. Der iterative Prozess wird solange wiederholt, bis die Änderung der Werte unter eine bestimmte Genauigkeitsschranke fällt. Mit diesem Verfahren können akzeptable Ergebnisse auch bei einer Wahl von Zeitschritten in der Grössenordnung \mathcal{O} (Stunden) erhalten werden [93]. Die Methode benötigt am meisten Rechenzeit.

2.3.6 Anbindung an eine CFD-Simulation

Die vorgestellte Diskretisierungstechnik eignet sich zur Auflösung des trägen thermischen Verhaltens eines Gebäudes und zur näherungsweise Berechnung von Enthalpieströmen, womit beispielsweise Energiebilanzen oder der zeitliche Verlauf von Raumlufttemperaturen bestimmt werden können. Durch die Annahme von stationären Strömungsverhältnissen, einer einheitlichen Raumlufttemperatur und durch Vernachlässigung des Impulses sind aber keine Aussagen über lokale Strömungsvorgänge möglich, die zur Analyse des thermischen Behaglichkeitsempfindens und ggf. zur exakten Bestimmung von Wärmeübergangskoeffizienten nötig sind. Aus diesem Grund ist in manchen Situationen (vgl. Abschnitt 2.1) die Anbindung an eine hochauflösende CFD-Simulation sinnvoll. CFD-Verfahren werden in Kapitel 4 ausführlich behandelt.

Zunächst soll nun die Frage erörtert werden, auf welche Art ein CFD-Verfahren an ein Mehrzonenmodell (Wärme- und Enthalpieströme) angebunden werden kann. Wie im oben genannten Fall aus Abschnitt 2.3.5 sind hierfür verschiedene Strategien denkbar:

- *Einseitige Kopplung*. Ein Mehrzonenmodell mit Druckknotennetzwerk, das insbesondere die detailliert zu simulierende Zone mit mehreren Druckknoten auflösen sollte, liefert Randbedingungen für eine CFD-Simulation, die jeweils einen quasi-stationären Zustand des korrespondierenden Strömungszustandes berechnet. Je nach Detaillierungsgrad des Druckknotennetzwerkes und je nach Genauigkeit der Berechnung der Strahlungs- und somit der Temperaturverteilung an den Oberflächen sind hiermit Aussagen bezüglich der

thermischen Behaglichkeit für die betrachtete Zone in begrenztem Umfang möglich. Seitens des Mehrzonenmodells müssen hierfür zu jedem Simulationsschritt die Lösungsvektoren exportiert und die Randbedingungen des Strömungsmodells entsprechend gesetzt werden. Da in der Regel im einen Fall ein nicht-geometrisches (Objekt-)Modell und im anderen Fall ein geometrisches Modell verwendet wird, ist die Übertragung dieser Daten ein meist aufwändiger und manuell nicht zu bewerkstelliger Prozess, wofür in Kapitel 3 ein Lösungsansatz gegeben wird. In Abschnitt 2.4 werden die Ergebnisse einer Vorstudie einer einseitigen Kopplung vorgestellt.

- *Bidirektionale Kopplung mit thermischem Modell.* Auf der Basis eines Zeitschrittverfahrens ist es weiterhin möglich, im thermischen Modell das mit einem CFD-Verfahren bestimmte Geschwindigkeits- und Temperaturfeld zur Berechnung des konvektiven Wärmeübergangs zu verwenden. NEGRAÕ unterscheidet folgende Möglichkeiten [131]:
 - Berechnung flächengemittelter Wärmeübergangskoeffizienten im CFD-System und Übergabe an das thermische Modell. Die Struktur der in Abschnitt 2.3.3 vorgestellten Matrix ändert sich dabei nicht.
 - Berechnung von mittlerer Lufttemperatur und konvektivem Wärmestrom im CFD-System und Rückführung zum thermischen Modell. Die Struktur der Matrix des thermischen Modells ändert sich.
- *Bidirektionale Kopplung mit Druckknotennetzwerk.* Im Unterschied zum vorherigen Fall interagiert das CFD-System hier mit dem Drucknetzwerk (und nicht mit dem thermischen Modell), indem ein oder mehrere Druckknoten durch ein CFD-Gebiet ersetzt werden. Die so ermittelten Luftmassenströme werden als Quellterme in der Massenbilanz berücksichtigt [15].

Weiterhin von Bedeutung ist die Wahl entsprechender Randbedingungen, die von den lokalen Strömungsverhältnissen abhängen. Zur Auflösung der viskosen Effekte in der wandnahen Grenzschicht kann entweder das Rechengitter lokal verfeinert werden (Low-Reynolds-Modell) oder es können geeignete Wandfunktionen verwendet werden [121, 210]. Bei der Methode der Wandfunktionen wird dabei die Form des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes angenommen, womit die Wandschubspannungen und die Wärmeübertragung berechnet werden können, ohne den wandnahen Bereich auflösen zu müssen. Die Grenzschichtprofile beispielsweise von freier und erzwungener Konvektion besitzen dabei unterschiedliche Formen, womit falsche Annahmen hinsichtlich Profil oder Grenzschichtdicke gravierende Fehler bei der Berechnung von Wärmeübergangskoeffizienten implizieren. Solche Effekte wurden beispielsweise in [29, 167] analysiert.

BEAUSOLEIL-MORRISON schlägt ein Verfahren vor, wie geeignete Wandfunktionen ausgewählt und in bestimmten Fällen durch empirische Wärmeübergangskoeffizienten ersetzt werden können [15]. Dabei wird zunächst der Strömungscharakter mit Hilfe einer initialen Strömungssimulation bestimmt. Die Unterscheidung zwischen freier, erzwungener oder gemischter Konvektion erfolgt durch Evaluierung des Verhältnisses $\frac{Gr}{Re}$. Anhand dieser Information werden dann geeignete Wandfunktionen bzw. Randbedingungen ausgewählt und eine gekoppelte Simulation durchgeführt.

2.4 Vorstudie einer gekoppelten Simulation

Der Schwerpunkt des in dieser Arbeit verfolgten Ziels der Ableitung eines Zonen- und eines Strömungsmodells von einem Bauwerksmodell und das der Anbindung des in Kapitel 4 vorgestellten numerischen Verfahrens liegt auf dem 'geometrischen' Aspekt. Um die Unterschiede und Wechselwirkungen der beiden Herangehensweisen einer dimensionsreduzierten und einer hochauflösenden Simulation zu untersuchen, soll an dieser Stelle aber zunächst der 'numerische' Aspekt betrachtet werden, indem, im Sinne einer Vorstudie, eine einseitige Kopplung zwischen einem Mehrzonenmodell und einem Strömungscode vorgenommen wird. Die Untersuchungen erfolgten im Rahmen des Forschungsprojektes *SIMFAS* [154]. Motivation hierfür sind folgende Faktoren:

- Versorgung eines CFD-Modells mit realistischen und zeitlich veränderlichen Randbedingungen durch ein Mehrzonenmodell mit integriertem Strömungsmodell unter Berücksichtigung klimatischer Einflüsse und der thermischen Trägheit des Gebäudes,
- Analyse lokaler Strömungsverhältnisse (Geschwindigkeits- und Temperaturfeld), womit eine Quantifizierung thermischer Behaglichkeitskriterien möglich wird, und
- Validierung des im Mehrzonenmodell verwendeten Drucknetzwerk-Modells.

2.4.1 Verwendete Simulationsprogramme

Gebäudemodell der Simulationsumgebung SMILE. Die Simulationsumgebung SMILE wurde 1990 im Rahmen eines interdisziplinären Forschungsprojektes an der TU Berlin in Zusammenarbeit mit der Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD) für die zeitkontinuierliche Simulation technischer Probleme entwickelt [59] und wird hauptsächlich im Bereich der Energietechnik eingesetzt. Die Entwicklung wird gegenwärtig vom Fraunhofer-Institut für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik fortgeführt.

Das softwaretechnische Konzept ist gekennzeichnet durch Objektorientierung, Gleichungsorientierung, die Trennung von Modell und Numerik (austauschbare numerische Verfahren zur Lösung hybrider Systeme) und eine adaptive Zeitschrittweitensteuerung. Die objektorientierte Modellbeschreibungssprache ermöglicht es dabei, Modelle hierarchisch strukturiert und unter Verwendung von Vererbungsmechanismen aufzubauen. Mit Hilfe eines Modell-Compilers können aus einer Modellbeschreibung Modellbibliotheken erzeugt werden, die zusammen mit dem Laufzeitsystem und einem numerischen Verfahren ein ausführbares Simulationsprogramm darstellen. Die Steuerung eines 'Experiments' erfolgt dabei über eine Schnittstelle, die über die Skriptsprache *Python* [150] angesprochen wird.

Auf der Grundlage von SMILE wurde von NYTSCH ein Mehrzonen-Gebäudemodell entwickelt [43, 133, 135]. Das Vererbungs- und Aggregationsprinzip nutzend, sind umfangreiche Modellklassen zur Bildung komplexer Mehrzonenmodelle erhältlich. Das Modell verwendet dabei im Wesentlichen die in den Abschnitten 2.3.3 und 2.3.4 vorgestellten Techniken. Eine ausführliche Beschreibung des Modells ist in [134] zu finden. Zur Berechnung der Strahlungsverteilung wird dabei ein nicht-geometrisches Modell verwendet.

Programmpaket ANSYS/CFX-5. CFX-5 ist ein sehr leistungsfähiges kommerzielles CFD-Programmpaket, das einen Finite-Volumen Ansatz verwendet und über einen impliziten Algorithmus zur Simulation stationärer und instationärer, inkompressibler und kompressibler Strömungsvorgänge im subsonischen, transsonischen und Überschall-Bereich verfügt [32]. Es sind diverse Turbulenzmodelle implementiert, von Null-Gleichungsmodellen über $k-\epsilon$ -Modelle, Reynoldsspannungs-Transport-Modelle bis hin zu skalierbaren Wandfunktionen. Weiterhin besitzt CFX ein geometrisches Strahlungsmodell, und es können Wärmeübertragungs- und Verbrennungsvorgänge, Mehrphasenströmungen, freie Oberflächenprobleme und reaktive Strömungen simuliert werden. Das System kann auf einem PC oder in einer homogenen oder heterogenen parallelen Umgebung eingesetzt werden, wobei eine automatische Gebietszerlegung unterstützt wird. Die Modellkonfiguration, automatische Netzgenerierung und adaptive Verfeinerung erfolgt mit Hilfe eines auf dem CAD-Kernsystem MSC/Patran basierenden B-rep Präprozessors. Der mitgelieferte Postprozessor ermöglicht die Ergebnisdarstellung mit üblichen Visualisierungstechniken (Vektorpfeildarstellung, Ebenendarstellung, Isoflächen, Konturplots, Streichlinien, etc.) und darüberhinaus, als besonderes Merkmal, die Möglichkeit der quantitativen Bestimmung und Ausgabe von beispielsweise flächengemittelten oder über eine Wichtungsfunktion integrierten Ergebnisvariablen. Der Postprozessor bietet hierfür eine an die Skriptsprache *Perl* [142] angelehnte Schnittstelle, die sich für die Aufgabenstellung dieses Abschnittes als hilfreich erweisen wird.

2.4.2 Schnittstelle zur Kopplung: Entwurf und Implementation

Zur Realisierung eines Datenaustausches zur Laufzeit wurde im Rahmen dieser Arbeit eine dateibasierte, rudimentäre Schnittstelle zur Kopplung der beiden oben genannten Applikationen implementiert. Das Pflichtenheft des Entwurfszyklus' umfasste folgende Kriterien:

- Einlesen der in tabellarischer Form für jeden Zeitschritt vorliegenden Lösungsvektoren des SMILE-Gebäudemodells und Speicherung in einer relationalen Objektstruktur,
- Implementation eines Interpreters zum Parsen von CFX-Definitionsdateien,
- Dynamische Zuordnung jedes SMILE-Lösungsvektors zu den Randbedingungen einer CFX-Definition und umgekehrt,
- Umrechnung von Einheiten der zu transferierenden Größen,
- Setzen von Randbedingungen in Abhängigkeit von der Strömungsrichtung und
- (Zeit-)schrittweise Ansteuerung folgender Prozesse:
 - Generierung einer CFX-Definitionsdatei mit entsprechend gesetzten Randbedingungen eines SMILE-Lösungsvektors,
 - Starten des CFX-Solvers mit der quasi-stationären Lösung des vorherigen Schrittes als Startwert (Konvergenzbeschleunigung),
 - Automatische Generierung von *Perl*-Code zur individuellen Ansteuerung des CFX-Postprozessors zur Ergebnisauswertung zu jedem Zeitschritt,
 - Starten des CFX-Postprozessors im Batch-Modus; Ausgabe integraler Größen in tabellarischer Form in eine ASCII-Datei.

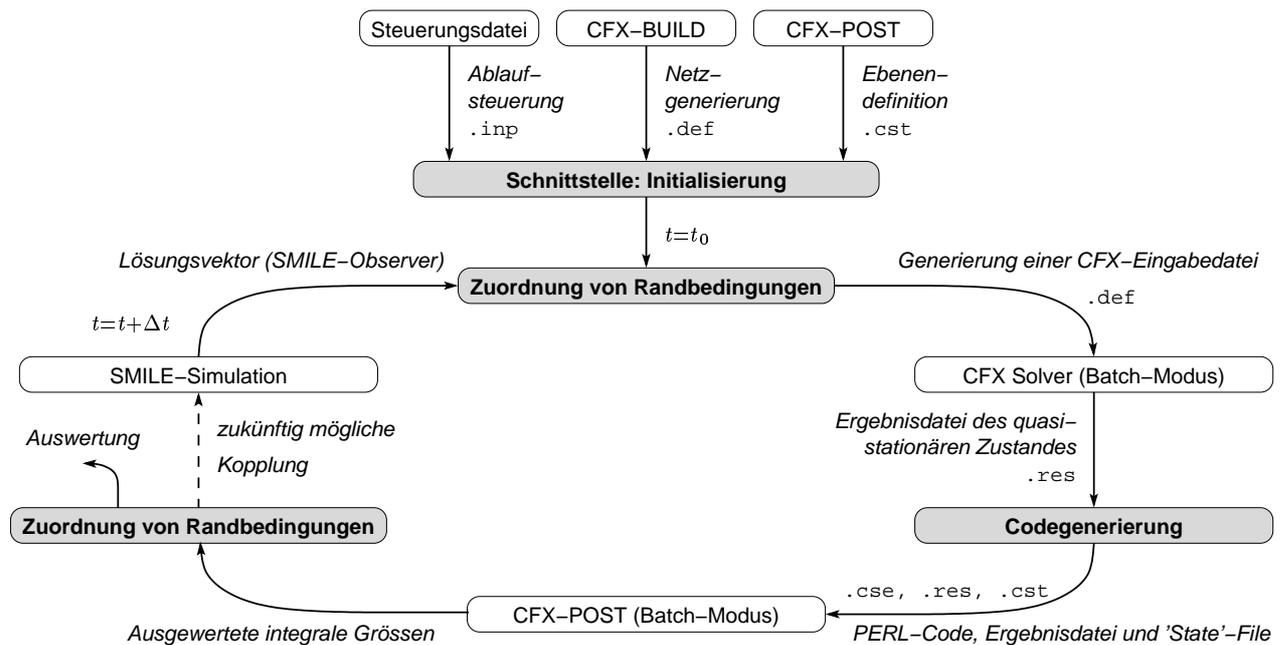


Abbildung 2.15: Schematischer Ablauf des Kopplungsprozesses. Die Schnittstellenoperationen sind grau unterlegt; die Endungen der Dateien, die am Austauschprozess teilnehmen, sind jeweils angegeben. Die Rückkopplung an SMILE (gestrichelt) wurde noch nicht realisiert und ist Gegenstand künftiger Arbeiten [154].

Die Schnittstelle wurde prototypisch in der Sprache C++ umgesetzt. Die Steuerung einer Simulation wird dabei mit Hilfe einer Eingabedatei vorgenommen, deren Syntax in Anlehnung an die CFX-Definitionsdatei gewählt wurde. Der Ablauf einer gekoppelten Simulation ist in Abbildung 2.15 dargestellt.

Für eine gekoppelte Simulation müssen folglich zwei individuelle Modelle erstellt werden: ein Multizonen-Gebäudemodell und ein Strömungsmodell. Die Vernetzung stellt dabei – auch für die vermeintlich simple Struktur eines Atriums – einen sehr (zeit-)aufwändigen Prozess in der Größenordnung von Tagen dar. Weiterhin muss die korrekte Zuordnung von Randbedingungen durch den Benutzer sichergestellt sein. In Kapitel 3 wird deshalb ein Ansatz vorgestellt, wie beide Verfahren an ein gemeinsames Bauwerksmodell angebunden werden können und der Diskretisierungsprozess und die (geometrische) Kopplung beider Herangehensweisen vorgenommen werden können, um diese Unzulänglichkeiten zu beseitigen.

Während des Postprozessings werden flächengemittelte Wärmeübergangskoeffizienten, integrale Werte konvektiver Wärmeströme, Luftmassenströme durch definierte Ebenen, Bauteiloberflächen- und Lufttemperaturen einer quasi-stationären Lösung des Strömungsimulators ausgewertet. Prinzipiell kann diese Schnittstelle auch für den Fall einer Rückkopplung an das Mehrzonenmodell eingesetzt werden, da durch die modulare Struktur auch eine explizite Interaktion auf Zeitschrittbasis möglich ist. Hierfür müsste die Schnittstelle des SMILE-Gebäudemodells erweitert werden und ein Lösungsverfahren verwendet werden, das eine Manipulation von Parametern zu Laufzeit gestattet.

2.4.3 Auswahl eines Referenzgebäudes mit Atrium

Für die Vorstudie wurde das *Atrium Grafenau* in Zug ausgesucht, das sich in der Schweiz, 22km südlich von Zürich, befindet. Der 1995 fertiggestellte Bürogebäudekomplex⁵ enthält drei südausgerichtete Atrien mit einer Höhe von je 26m, die über die anderen Gebäudeabschnitte hinausragen, womit ein sich ausbildendes Warmluftpolster in Regionen oberhalb der Bürozone verlagert werden soll (Lüftung durch Klappen u.a. im First). Die Atrien dienen als Verkehrsfläche und im Winter zur Vorerwärmung der Aussenluft, die im höchsten Punkt der Atrien abgesaugt und in die Bürozone eingebracht werden kann. Die Atrien sind mit innenliegenden Sonnensegeln verschattbar. In unmittelbarer Nachbarschaft befindet sich ein See, der in das aktive Kühlungskonzept mit eingebunden ist [30]. Die Glasfassade besitzt einen U-Wert von $2.8 \frac{W}{m^2K}$, einen Reflexionswert von 14% und einen Lichttransmissionswert von 80%. Im Winter sind die Atrien prinzipiell unbeheizt, wobei an der verglasten Südwand Radiatoren angebracht wurden, um einem Kaltluftabfall entgegenwirken zu können. Messungen ergaben, dass die Atriumstemperatur so gut wie nie unter $10^\circ C$ fällt und die Heizung somit nur selten bzw. nur bei Veranstaltungen zugeschaltet werden muss. Alle Atrien sind im Erdgeschoss über einen Korridor miteinander verbunden. Das östlich gelegene Atrium ist durch eine in etwa rechteckige Gestalt bei schwach gekrümmter Fassade bestimmt, weist eine Grundfläche von $320m^2$ und zwei geschlossene Einbauten in der Erdgeschossebene auf und ist auf Grund eines nur geringen Publikumsverkehrs für Messungen geeignet.

Das Gebäude wurde seinerzeit vom schweizerischen Bundesamt für Energie (BFE) als Demonstrationsobjekt für energieeffiziente Bauweise ausgewählt und war Gegenstand zahlreicher Forschungsprojekte [30, 91], wobei die energetische Bedeutung der Atrien untersucht wurde. In diesem Zusammenhang wurden von EICHER & PAULI detaillierte Messungen durchgeführt [140], die von SCHÄLIN mit CFD-Simulationen verglichen wurden [91]. Als Messgrößen wurden die Temperaturen im Atrium auf 6 Höhen, die Globalstrahlung und Aussentemperatur und, in einer Ebene senkrecht zur Fassade, Luftgeschwindigkeits- und Temperaturprofile zur Untersuchung des Kaltluftabfalles bestimmt. Die Auswertung ist in [91] dokumentiert.

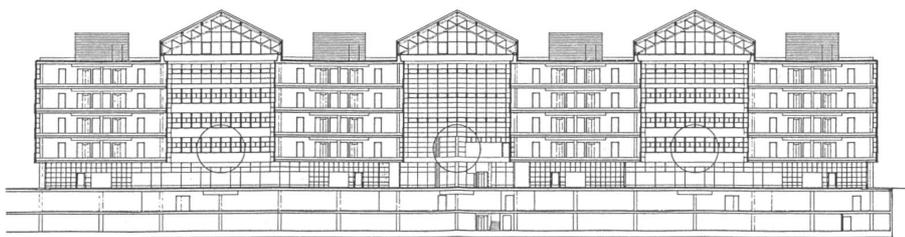


Abbildung 2.16: Ansicht des Atriums Grafenau, Zug [22]

Im Rahmen des Forschungsprojektes *SIMFAS* und einer von GONZALEZ angefertigten Diplomarbeit wurden das Referenzgebäude modelliert und, wie in den nächsten Abschnitten beschrieben, diverse Simulationen daran durchgeführt [80, 154]. Hierfür wurden uns freundlicherweise von SCHÄLIN Messdaten zur Validierung zur Verfügung gestellt [169]. Weiterhin lagen zur Modellierung Pläne des Architekturbüros BOSSHARD UND SUTTER vor [22].

⁵Eigentümer: Landis & Stäfa AG

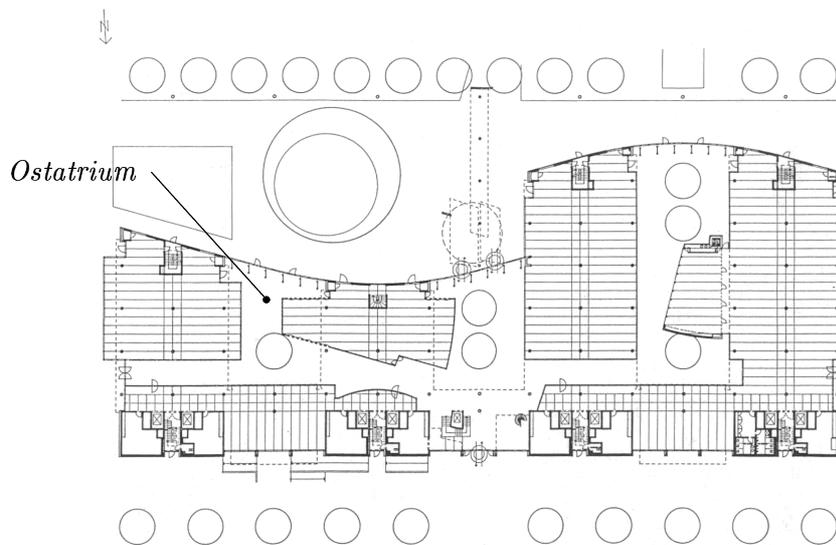


Abbildung 2.17: Grundriss des Atriums Grafenau, Zug (Süden ist 'oben') [22]

2.4.4 Modellbildung

Basierend auf den zuvor beschriebenen Daten wurden zwei Mehrzonenmodelle für die Simulationsumgebung SMILE mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad und ein CFD-Modell für das System CFX-5 erstellt. Da die Pläne nicht in digitaler Form und nur in einem grossen Massstab vorlagen, mussten die Werte aus den Plänen gemessen werden. Infolge fehlender Daten mussten manche Werte angenommen bzw. Erfahrungswerte gewählt werden. Eine ausführliche Gebäudebeschreibung, sowie Angaben zu Eingabedaten und Parametern können [80] entnommen werden.

Das Atrium wird dreiseitig ('U-förmig') von Bürozonen und auf der Südseite von einer verglasten Fassade begrenzt, die Dachneigung beträgt 27° . Im Mehrzonenmodell wurden vier Öffnungen modelliert: zwei im unteren Teil der Südfassade und jeweils eine in beiden geneigten Dachflächen. Bei der Mehrzonenmodellierung wurden folgende Vereinfachungen gemacht:

- Die im Bereich des Erdgeschosses angesiedelten Einbauten im Atrium und die Galerie wurden als interne Massen, nicht aber als geometrische Objekte im Innenraum behandelt.
- Die Korridore im Erdgeschoss wurden vernachlässigt, da diese auch bei der Messdatenerfassung nicht berücksichtigt wurden.
- Das Atrium ist dreiseitig ('U-förmig') von Bürozonen umgeben, wobei in horizontaler Richtung pro Stockwerk jeweils eine Bürozone modelliert und die Verbindung mit anderen Büros als adiabatische Randbedingung formuliert wurde (Symmetrie).
- Die leichte Krümmung der Fassade wurde vernachlässigt.
- Der Neigungswinkel der südlichen Dachverglasung wurde auf Grund fehlender Daten zu 90° gewählt.



Abbildung 2.18: Modellbildung in SMILE: einfaches Modell (links) und detailliertes Modell (rechts).

Abbildung 2.18 zeigt beide Modelle. Das *einfache Modell*, bestehend aus den zwei Zonen Atrium und Bürotrakt, wurde zu einer ersten Abschätzung von Leistungsbilanzen und zur Plausibilitätskontrolle verwendet. Durch die Annahme homogener Temperaturverteilungen in den Zonen lässt es keinerlei Aussagen über die Temperaturschichtung zu. Das *detaillierte Modell* besteht dagegen aus sechs Zonen, d.h. dem Atrium und je einer Bürozone pro Stockwerk. Das Luftvolumen des Atriums ist wiederum in sechs vertikale Abschnitte unterteilt, um Aussagen über die Luftschichtung zu ermöglichen. Die natürliche Belüftung des Atriums erfolgt über vier Öffnungen, der Bürotrakt ist über Strömungspfade mit dem Atrium und der äusseren Umgebung verbunden.

Mit Hilfe des Präprozessors CFX-BUILD wurde ein *B-rep* Modell des Atrium-Luftvolumens erstellt und ein am Rand verfeinertes Volumennetz generiert. Die Elemente des zunächst erzeugten triangulierten Oberflächennetzes werden in Wandnähe zu mehreren feinen Schichten prismatischer Volumenelemente, sogenannten 'inflation elements', extrudiert, anschliessend wird im Inneren ein Volumennetz erstellt. Das resultierende Volumennetz besteht aus prismatischen, tetraeder- und pyramidenförmigen Elementen. Wie in Abschnitt 2.3.6 bemerkt, ist die Verfeinerung in Wandnähe zur Auflösung der Grenzschicht wichtig. In CFX wird dafür ein $k - \epsilon$ -Turbulenzmodell in Verbindung mit skalierbaren Wandfunktionen verwendet. Abbildung 2.19 zeigt das *B-rep* Modell und das Oberflächennetz des Atriums. Das Volumennetz besteht aus rund 90000 Volumenelementen bei einem Verhältnis zwischen Randschicht- und Volumen-

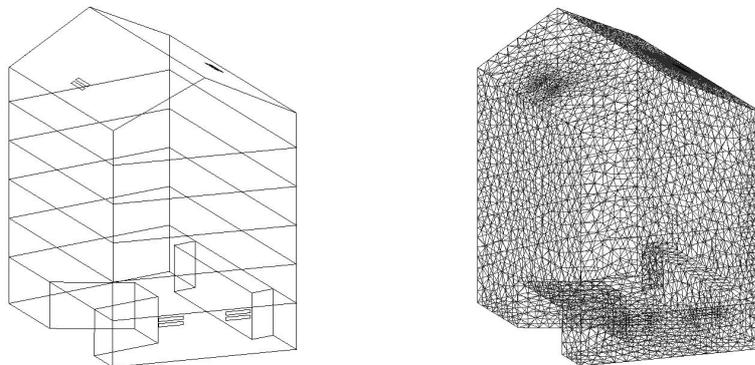


Abbildung 2.19: Modellbildung in CFX-5. **Links:** B-rep Modell mit Randbedingungen, **rechts:** Oberflächennetz, bestehend aus ca. 6500 Dreiecksflächen.

elementen von etwa 1 : 2. Den vier Öffnungen des Sechs-Zonenmodells entsprechen dabei acht Öffnungen als Randbedingungen des Strömungsmodells, da pro Öffnung im Mehrzonenmodell zwei Strömungspfade modelliert werden. Die Randbedingungen werden, wie oben beschrieben, zur Laufzeit von der Schnittstelle zur Kopplung beider Modelle dynamisch gesetzt. An Wänden wird somit eine Haft- und Dirichlet-Randbedingung gesetzt, bei Öffnungen eine Ein- oder Ausström-Bedingung, je nachdem, ob und in welcher Richtung der Massenstrom erfolgt. Zur Berechnung der Wärmeübertragung wird in CFX-5 das 'Total Energy' Modell verwendet (kompressibles Modell).

2.4.5 Vergleich mit Messdaten

Die Messdaten liegen für eine 20-tägige Periode im Monat Juli des Jahres 1994 vor. In Ergänzung zu den für die Aussentemperatur und einfallende (totale) Solarstrahlung verfügbaren Messgrößen wurden deshalb Klimadaten für die Region und diesen Zeitpunkt mit Hilfe von *Meteonorm 4.0* [126] generiert. Da zwar die Regelungsstrategien für Öffnungen und Verschattung bekannt sind [140], andererseits aber keinerlei Angaben über die Grösse der Öffnungen zum Zeitpunkt der Messungen vorhanden sind, mussten zunächst Simulationen zur Bestimmung dieser Zielgrößen durchgeführt werden. Die Untersuchungen sind in [80] dokumentiert.

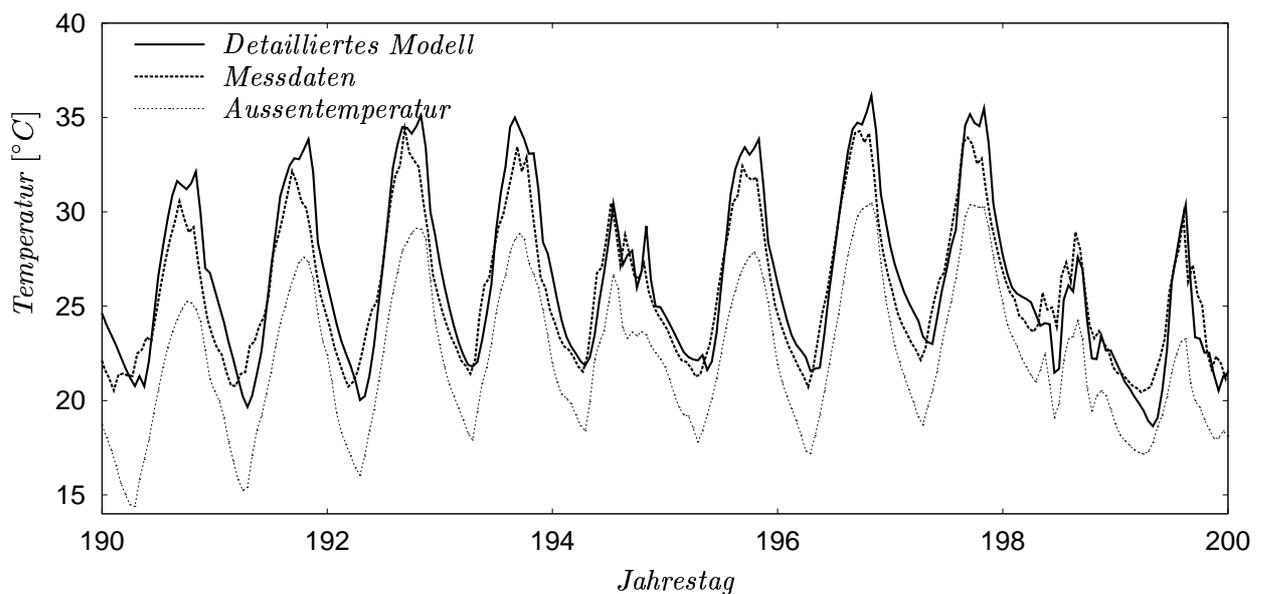


Abbildung 2.20: Vergleich von simulierten und gemessenen mittleren Lufttemperaturen im Atrium

Abbildung 2.20 zeigt einen Vergleich zwischen gemessenen und anhand des detaillierten Modells simulierten mittleren Lufttemperaturen im Atrium und die Aussentemperatur für eine Periode von 10 Tagen im Monat Juli. In Abbildung 2.21 sind die Messdaten und gemittelten Lufttemperaturen für die Luftvolumen 0 und 4, korrespondierend zu Erdgeschoss und viertem Obergeschoss, gegenübergestellt. Während Simulation und Messung für Luftvolumen 4 nahezu übereinstimmen, weichen die Temperaturmaxima für Volumen 0 (Erdgeschoss) bis zu 3K voneinander ab. Die Gründe hierfür liegen u.a. darin, dass das Atrium im Bereich des Erdgeschosses Einbauten aufweist, die im Mehrzonenmodell nur als interne Massen berücksichtigt

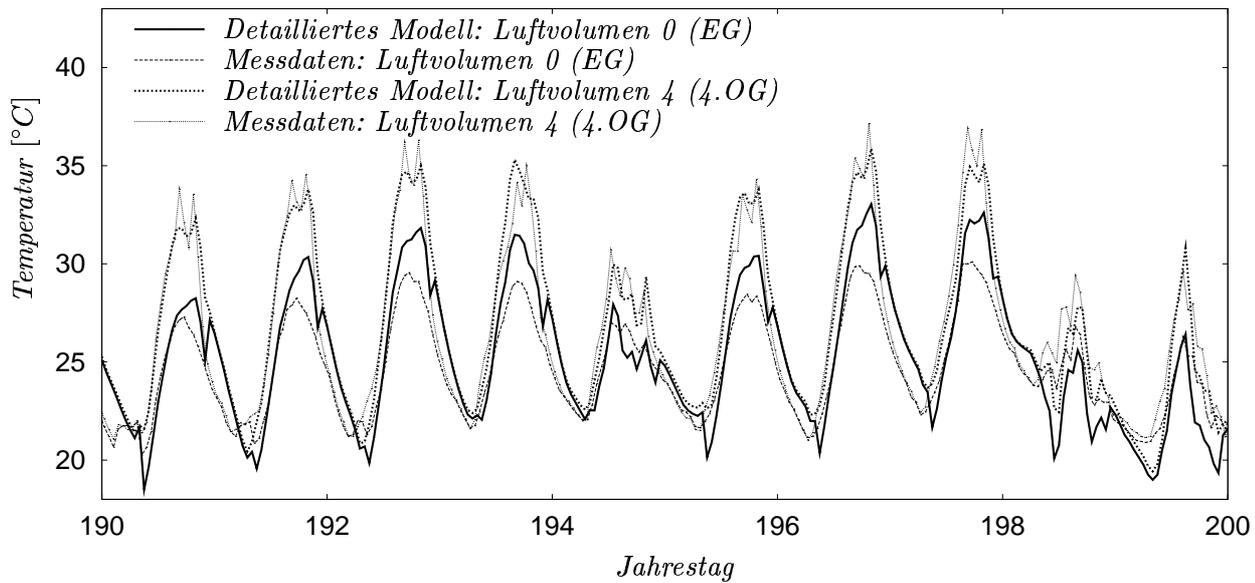


Abbildung 2.21: Gemessene und simulierte mittlere Lufttemperaturen

sind. Es aber ist anzumerken, dass ein Vergleich mit Messdaten prinzipiell nur schwer möglich ist, da die Messdatenerfassung u.a. vom Nutzerverhalten stark beeinflusst wird, beispielsweise spielen das Öffnen von Türen oder die durch Personenverkehr verursachten Luftbewegungen eine Rolle, letztgenannte insbesondere im Bereich des unteren Luftvolumens.

2.4.6 Vergleich zwischen Einknoten- und Mehrknoten-Modell

In diesem Abschnitt werden nun das Einknoten- und das Mehrknotenmodell des Atriums des jeweiligen Mehrzonenmodells in der Simulationsperiode Juli betrachtet und der Einfluss der Herangehensweisen auf die Temperaturverteilung im angrenzenden Bürotrakt abgeschätzt.

Ein Vergleich zwischen der mit dem einfachen Atriummodell ermittelten homogenen Temperaturverteilung und einem aus allen sechs Luftvolumina des detaillierteren Modells gebildeten Mittelwert zeigt, bei weitgehend ähnlichem Kurvenverlauf, geringe Differenzen bei den Spitzenwerten von etwa $2K$, die auf die unterschiedliche Behandlung der internen Massen zurückzuführen sind (vgl. Abbildung 2.22). Das Sechs-Zonenmodell liefert hingegen Aussagen über die vertikale Temperaturverteilung im Atrium, wie in Abbildung 2.23 ersichtlich ist. Inwieweit diese Werte auch Aussagekraft besitzen, wird durch einen Vergleich mit den durch die CFD-Simulationen gewonnenen Informationen weiter unten beschrieben.

In Abbildung 2.24 wird demonstriert, wie der angrenzende Bürotrakt von der vertikalen Temperaturverteilung im Atrium massgeblich beeinflusst werden kann. Bei der Simulation wurden die Fenster zwischen Bürotrakt und Atrium als geschlossen angenommen. Die Büroräume werden während der Geschäftszeiten (8-18 Uhr) klimatisiert und bis zu einem Schwellwert von $25^{\circ}C$ gekühlt. Da die Atriums- und Aussentemperaturen auch nach diesen Zeiten noch hoch sind, steigen die Temperaturen in den Büroräumen danach wieder sprunghaft an. Offenbar

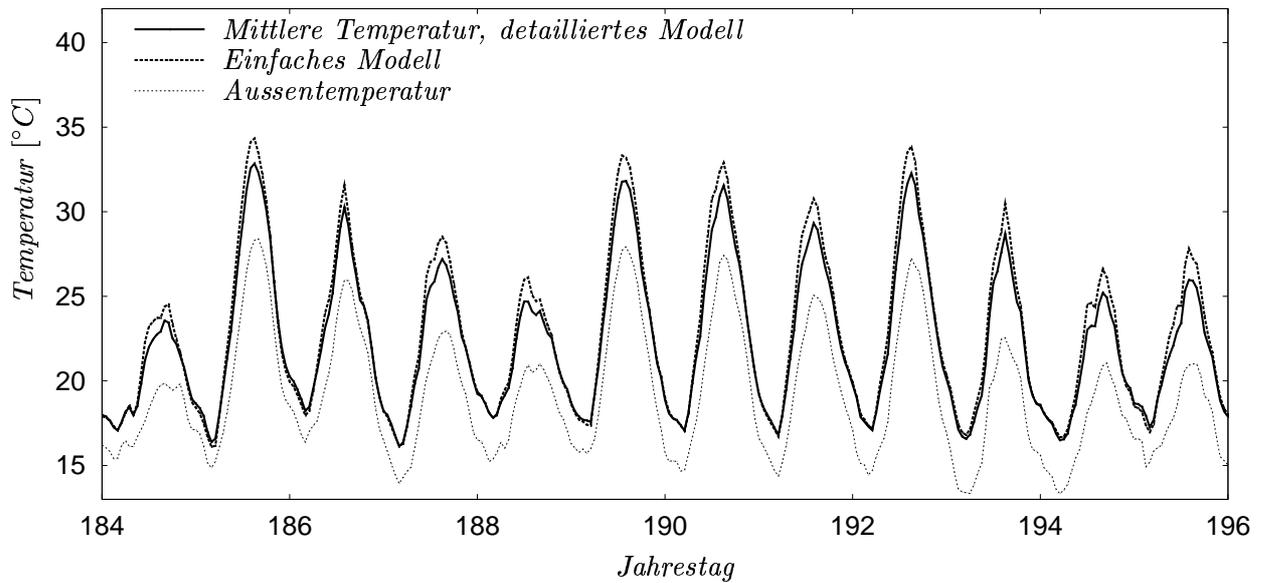


Abbildung 2.22: Temperaturverlauf im Atrium: Einfaches Modell mit der Annahme eines volldurchmischten Zustandes, Mittelwerte der Lufttemperaturen des detaillierten Modells.

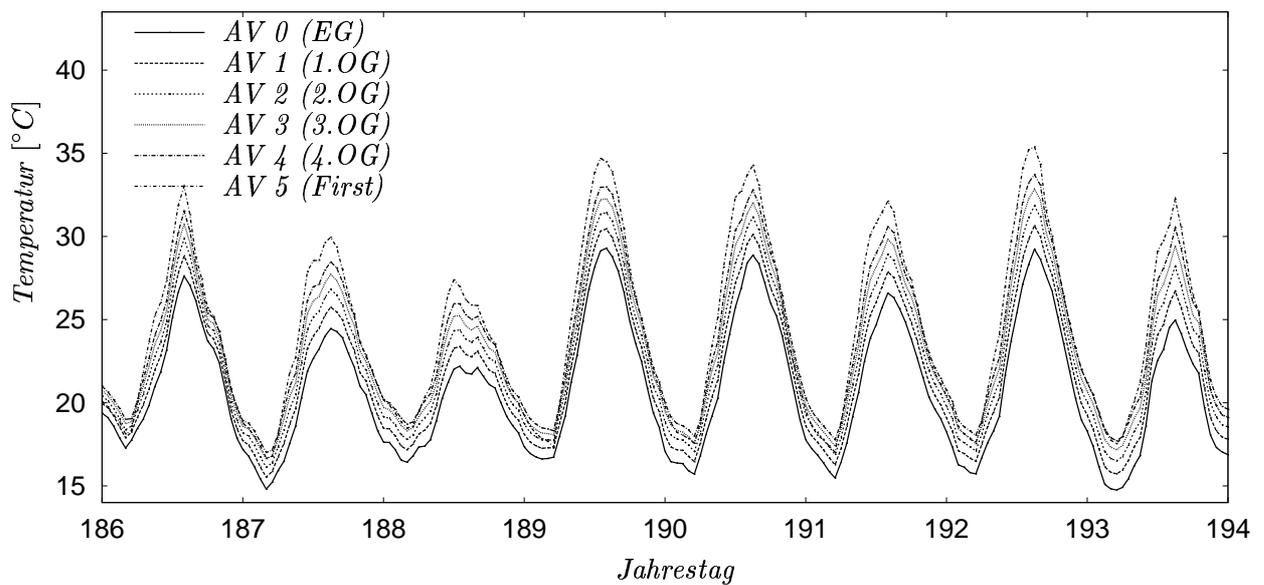


Abbildung 2.23: Lufttemperaturen in dedizierten Luftvolumen (AV) des detaillierten Modells.

ist das einfache Modell nicht in der Lage, das die Planung und den Entwurf beeinflussende Verhalten vorauszusagen, d.h. Überhitzungserscheinungen infolge einer sich ausbildenden thermischen Schichtung zu erkennen bzw. den zur Kühlung benötigten Energiebedarf abzuschätzen. Man erkennt, dass in der betrachteten Zeitperiode eine Fensterlüftung in den oberen Büroräumen nicht möglich ist, da zwischen benachbarten Bereichen Temperaturunterschiede von bis zu 7°C auftreten können. Andererseits könnten die Büroräume von kühleren

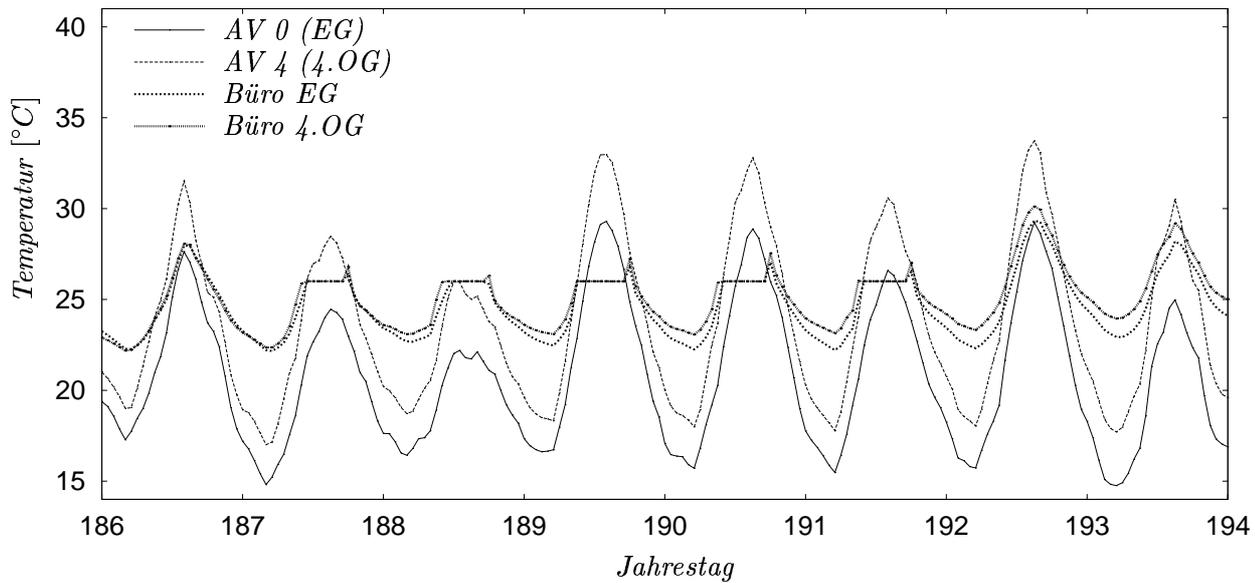


Abbildung 2.24: Beeinflussung des angrenzenden Bürotraktes

Temperaturen in der Nacht profitieren (Nachtkühlung).

2.4.7 Vergleich zwischen Mehrknoten- und CFD-Modell

Es werden nun das detaillierte (Mehrknoten-)Modell und das CFD-Modell anhand einer Fallstudie miteinander verglichen, indem für je einen charakteristischen Sommertag im Juli und einen Wintertag im Januar folgende Konfigurationen untersucht werden:

1. *Sommertag, passive Kühlung, keine Verschattung.* In dieser Situation ist die Ausbildung einer thermischen Schichtung von untergeordneter Bedeutung, da in der Regel mit einer Luftdurchmischung zu rechnen ist. Es kann die Effizienz einer natürlichen Lüftungsstrategie bei vollem Energieeintrag betrachtet werden.
2. *Sommertag, passive Kühlung, Verschattung.* Bei dieser Konfiguration kann untersucht werden, inwieweit sich eine thermische Schichtung der Luftmassen bzw. ein Warmluftpolster unter dem Dach infolge Strahlungsabsorption an der oberen Verschattungseinrichtung (Sonnensegel) ausbilden wird, was zu Überhitzungserscheinungen in den Büros der oberen Etagen führen kann.
3. *Wintertag, Lüftungsklappen geöffnet, keine Verschattung.* Dieser Fall stellt eine Extremsituation hinsichtlich ungünstiger Komfortbedingungen dar.
4. *Wintertag, Lüftungsklappen geschlossen, keine Verschattung, unbeheizter Zustand.* Anhand dieser Situation kann der winterliche Kaltluftabfall an der Fassade und der Raumkomfort im unbeheizten Zustand untersucht werden. Eine durch einen Kaltluftabfall induzierte Strömung reagiert im allgemeinen sehr labil auf andere Einflüsse (beispielsweise das Öffnen einer Türe) und ist durch Zuschalten der Fassadenheizung 'umkehrbar' [91].

Hierfür werden die Lösungsvektoren des detaillierten SMILE-Modells unter Verwendung der in Abschnitt 2.4.2 vorgestellten Methodik als Randbedingungen des CFD-Modells gesetzt. Um einen Vergleich zwischen den mit beiden Verfahren ermittelten *Lufttemperaturen* zu ermöglichen, wird die mittlere Lufttemperatur eines zum Mehrzonenmodell korrespondierenden Luftvolumens jeweils durch Bildung eines Mittelwertes aus je fünf horizontalen Ebenen des CFD-Temperaturfeldes berechnet. Zur Bestimmung des vertikalen Netto-*Luftmassenstromes* durch das Atrium wird das CFD-Modell weiterhin durch fünf Ebenen in den Höhen $4.3m$, $7.9m$, $11.5m$, $15.1m$ und $18.7m$ in sechs Teilvolumina unterteilt. Für jede der Konfigurationen wurde eine gekoppelte Simulation eines Tages in einstündigen Schritten vorgenommen, wobei die quasi-stationäre Lösung eines Zeitschrittes jeweils als Anfangsbedingung gesetzt wurde. Die Rechenzeit für die gekoppelte Simulation eines Tages beträgt auf einem Pentium 4 Rechner mit 2 GFlop/s etwa 10 Stunden. Im Folgenden werden nun die Unterschiede beider Modelle exemplarisch dargestellt und die Ergebnisse kritisch bewertet.

Situation 1. In Diagramm 2.25 sind die mit beiden Verfahren ermittelten mittleren Lufttemperaturen der einzelnen Luftvolumina in einstündigen Schritten für Situation 1 dargestellt. Abbildung 2.28 zeigt die Mittelwerte dieser Daten.

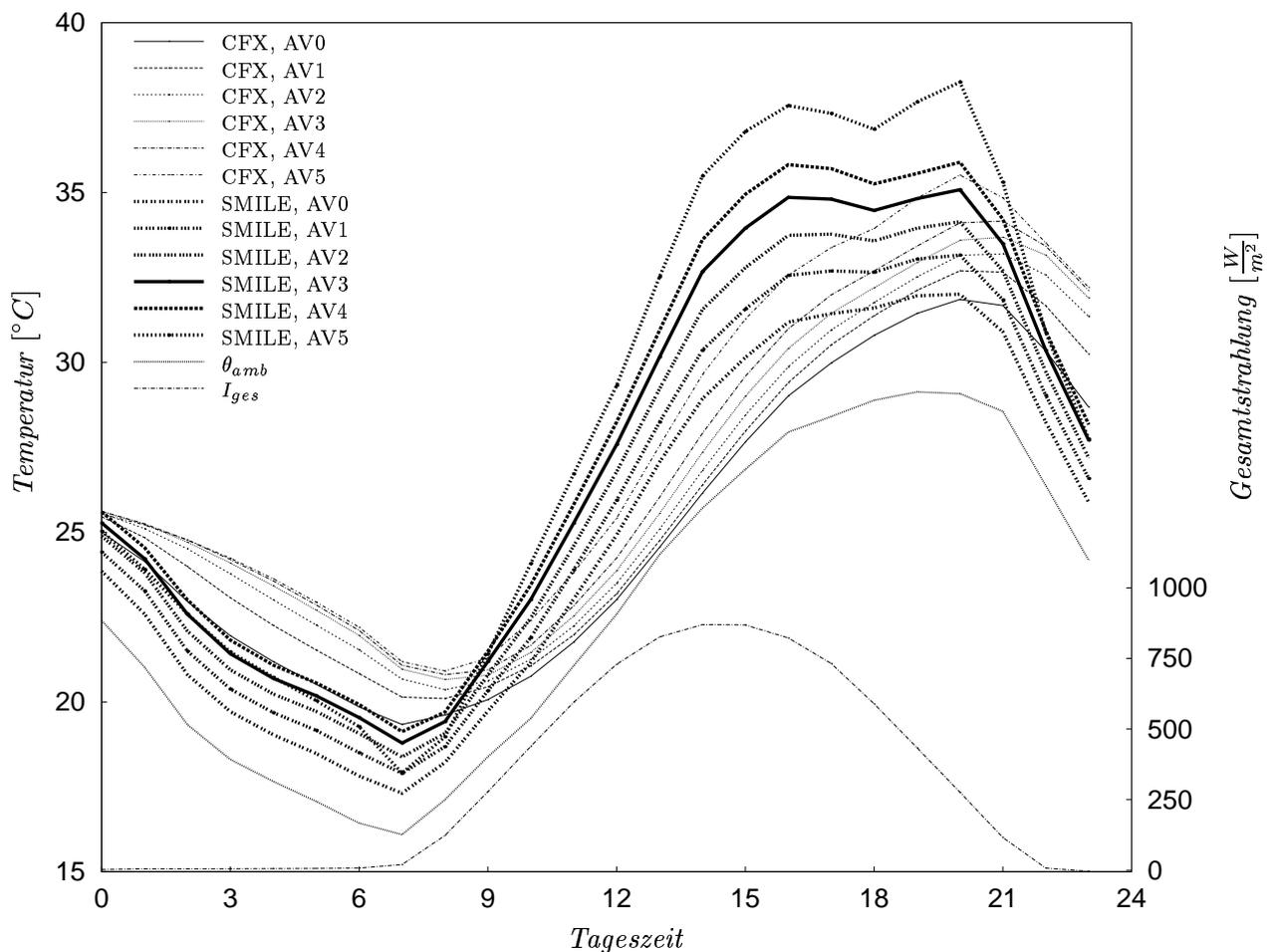


Abbildung 2.25: Mittlere Lufttemperaturen in den einzelnen Luftvolumina, Situation 1.

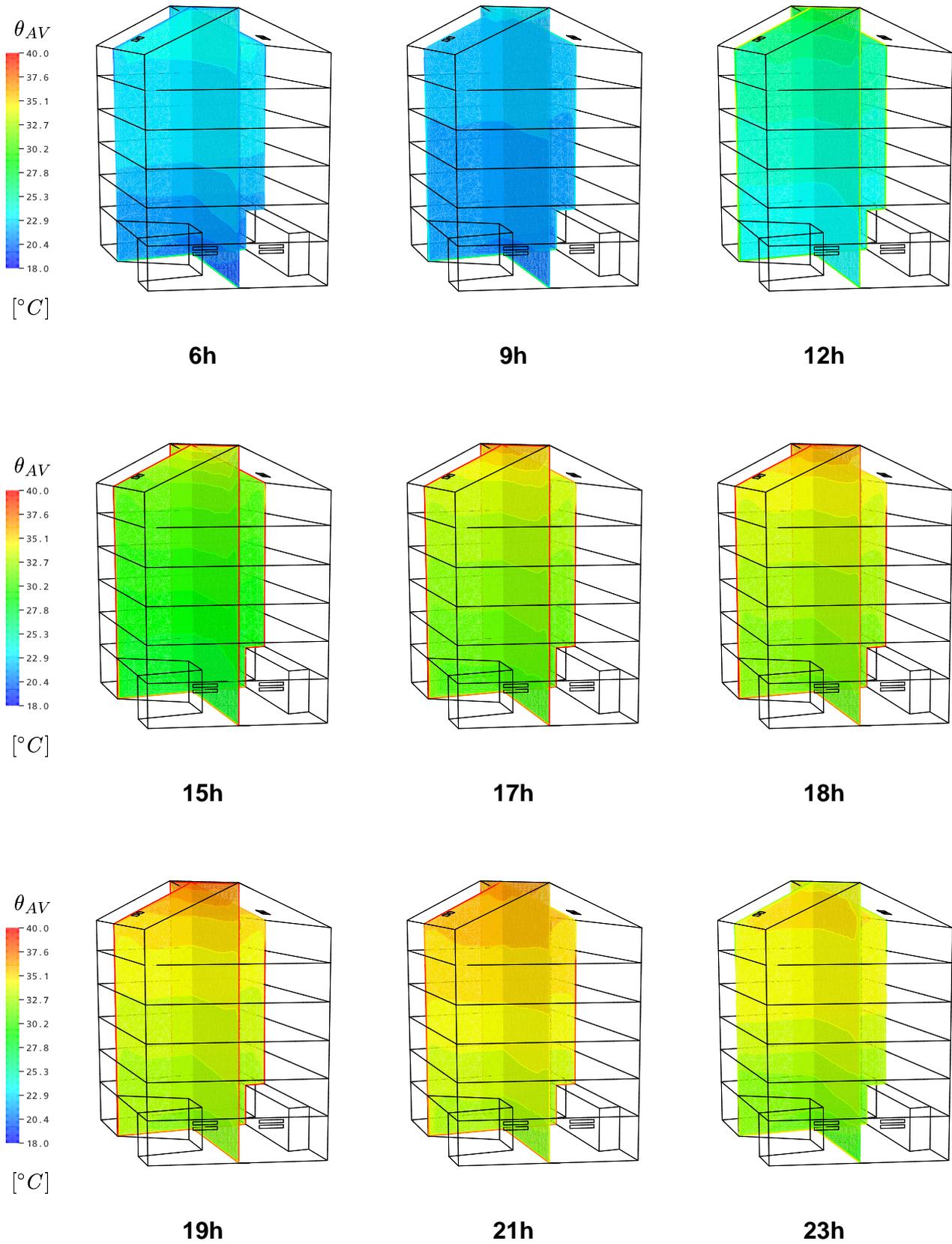


Abbildung 2.26: Zeitliche Entwicklung der Temperaturverteilung im Atrium (Situation 1)

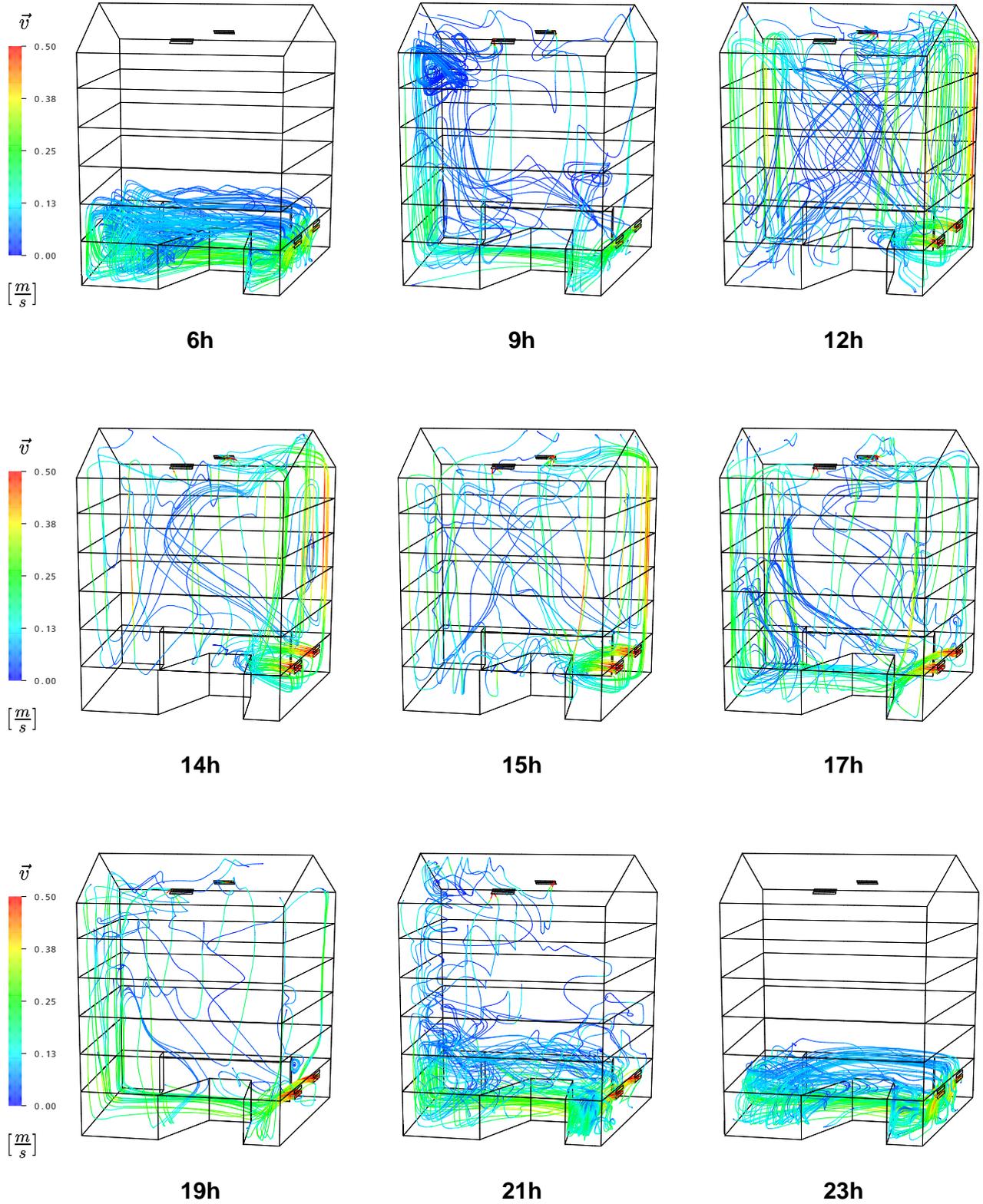


Abbildung 2.27: Stromlinienverteilung des gemittelten Geschwindigkeitsfeldes (Situation 1). Die Stromlinien werden an zwei der unteren Lufteinlässe injiziert.

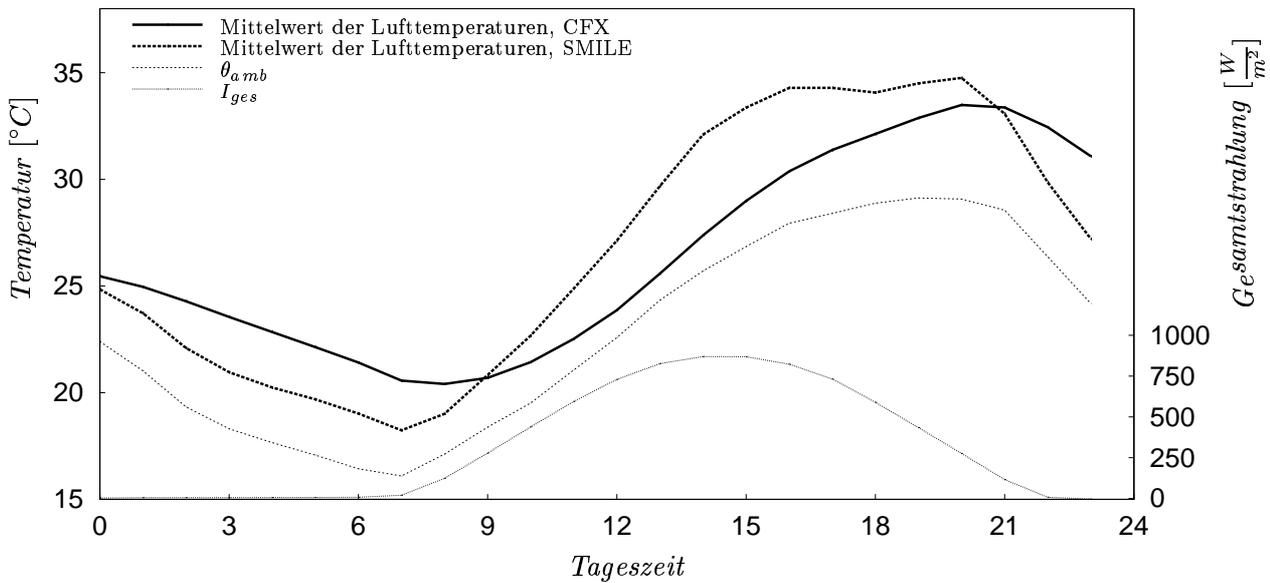


Abbildung 2.28: Mittelwerte der jeweiligen Temperaturverläufe aus Abb. 2.25.

Man erkennt, dass das Mehrzonenmodell zu den Zeiten mit solarer Einstrahlung höhere Lufttemperaturen voraussagt als das CFD-Modell. Die Unterschiede in der Temperaturverteilung liegen offensichtlich darin, dass das Mehrzonenmodell, auch bei einer Verfeinerung durch vertikal angeordnete Druckknoten, die lokalen Strömungsvorgänge nicht aufzulösen vermag. In diesem Fall bildet sich infolge des Luftaustausches und der Verteilung der Oberflächentemperaturen eine Konvektionsströmung aus, die das gesamte Volumen erfasst.

Abbildung 2.26 demonstriert die zeitliche Entwicklung der Temperaturverteilung im Atrium für Situation 1, Abbildung 2.27 die Verläufe von Stromlinien des gemittelten Geschwindigkeitsfeldes, die (der Übersichtlichkeit halber) an zwei der vier unteren Lufteinlässe injiziert werden. Die Farbe der Stromlinien korrespondiert mit der Strömungsgeschwindigkeit. Bei dieser durch einen hohen Anteil an Direktstrahlung geprägten Situation macht sich die gleichmässige Verteilung der einfallenden Solarstrahlung auf alle Flächen bemerkbar. Tatsächlich wird im unteren Teil des Atriums wesentlich mehr Strahlung absorbiert, womit die Auftriebskräfte und die empfundene Temperatur unterbewertet werden.

Als Gründe für die Abweichungen können weiterhin einerseits die im Mehrzonenmodell enthaltenen Infiltrationswerte (Fugenundichtigkeiten) genannt werden, die im CFD-Modell vernachlässigt sind bzw. deren Behandlung nicht pauschal möglich ist, andererseits der Kompressibilitätseffekt durch die Verwendung des kompressiblen Modells in CFX. Letztgenannter ist auf Grund kleiner Machzahlen aber sehr klein.

Situation 2. An dieser Stelle wird der Einfluss der kurzwelligen Solarstrahlung besonders deutlich, der beispielsweise auch in [29] untersucht worden ist. Das Gebäudemodell in SMILE wandelt einfallende Direkt- und Diffusstrahlung komplett in Diffusstrahlung um und verteilt diese anschliessend gewichtet nach dem Produkt von Fläche und Absorptionsgrad [134]. Auch

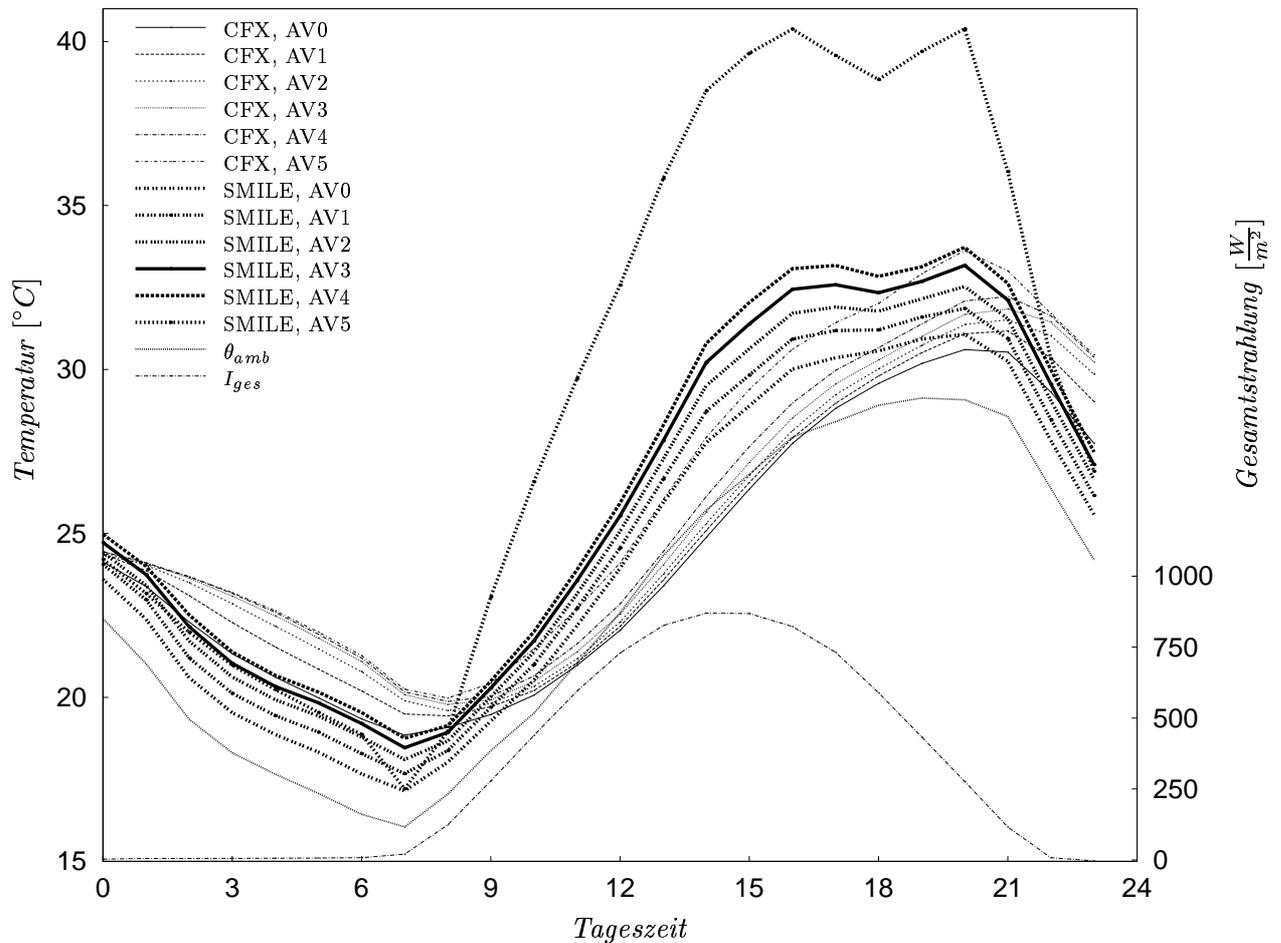


Abbildung 2.29: Mittlere Lufttemperaturen in den einzelnen Luftvolumina, Situation 2.

die Berechnung des langwelligen Strahlungsaustausches erfolgt mit einem nicht-geometrischen Modell. Diese nach FEIST für viele Situationen ausreichende Näherung [68] impliziert in diesem Fall einen Fehler, da die Ausbildung von Auftriebsströmungen bzw. einer thermischen Schichtung massgeblich von der Verteilung der Oberflächentemperaturen beeinflusst wird.

Weiterhin wurde in SMILE die an der Verschattungseinrichtung absorbierte und konvektiv an den Raum abgegebene Energie als konvektiver Quellterm pauschal in die Bilanz des obersten Luftvolumens eingebracht. Seitens CFX wurde dieser Anteil nicht berücksichtigt, da kein geeignetes Modell für die Bestimmung der Oberflächentemperaturen der Verschattungseinrichtung verfügbar ist und andererseits Art und Position des Sonnensegels unbekannt sind. Aus diesem Grund wird die dargestellte Entwicklung einer thermischen Schichtung unterbewertet. Der Einfluss des genannten Quellterms ist in Abbildung 2.29 klar ersichtlich und die Abweichungen in Abbildung 2.30 sind damit erklärbar. Die ermittelten Maximaltemperaturen stimmen aber gut mit den in [91] veröffentlichten Messwerten überein.

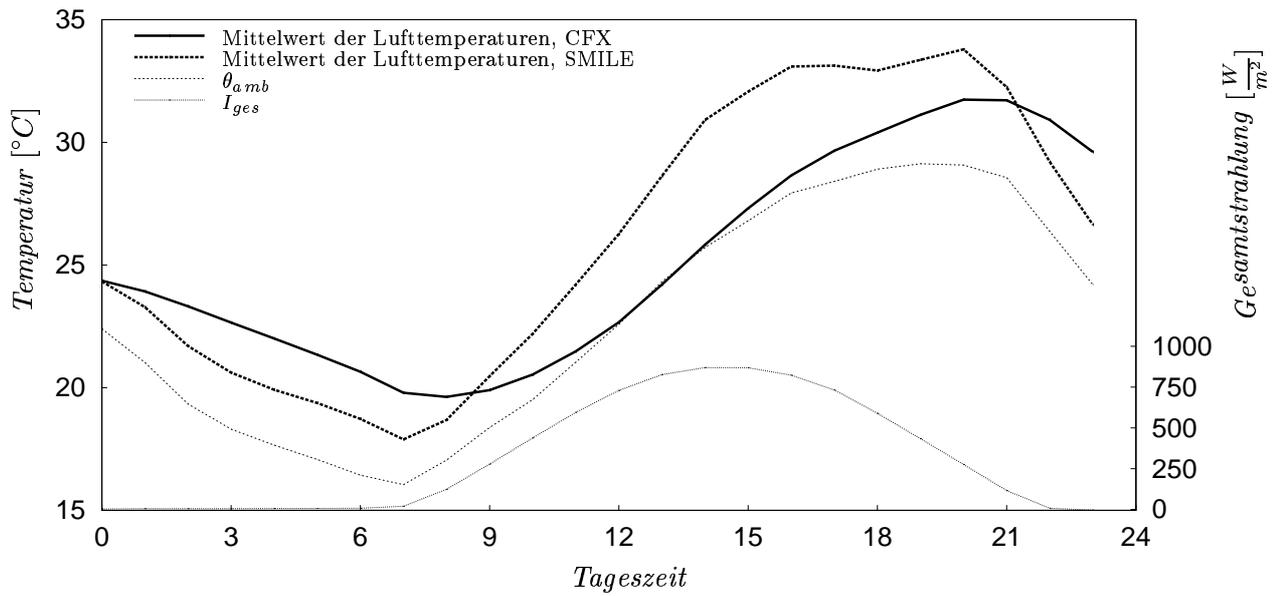


Abbildung 2.30: Mittelwerte der jeweiligen Temperaturverläufe aus Abb. 2.29 (Situation 2).

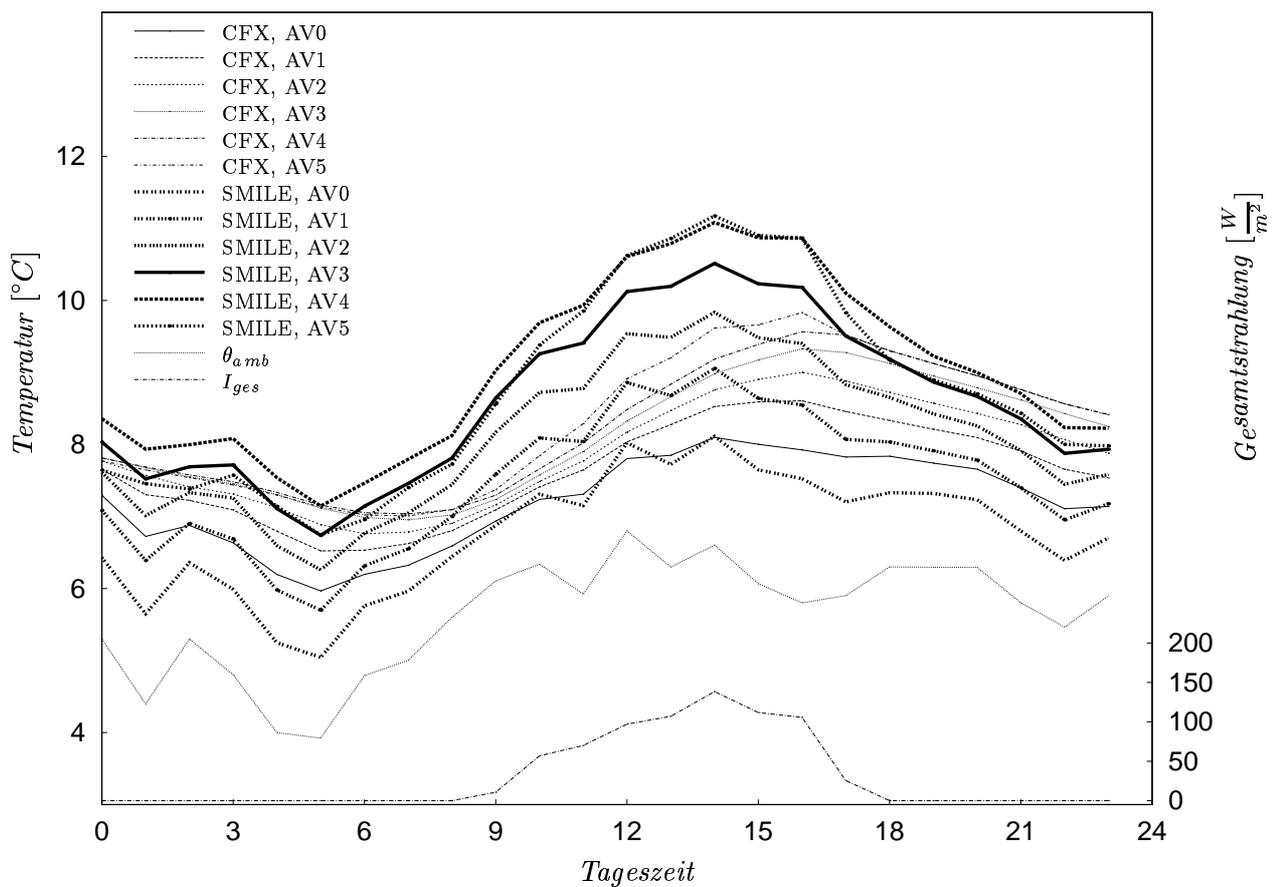


Abbildung 2.31: Mittlere Lufttemperaturen in den einzelnen Luftvolumina, Situation 3.

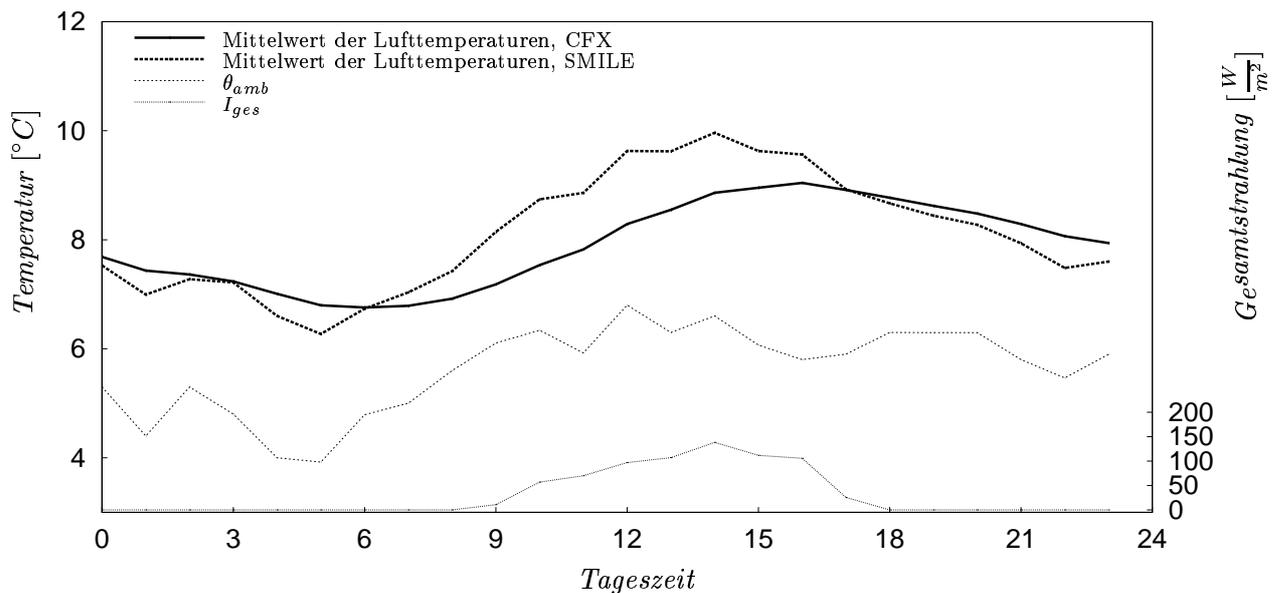


Abbildung 2.32: Mittelwerte der jeweiligen Temperaturverläufe aus Abb. 2.31 (Situation 3).

Situation 3. In den Abbildungen 2.31 und 2.32 sind zunächst der Vollständigkeit halber die Ergebnisse der gekoppelten Simulationen für den Fall 'Winter' bei geöffneten Klappen dargestellt (Situation 3). Auch bei den für die Wintermonate charakteristischen geringen Einstrahlungsverhältnissen sind wiederum Abweichungen zwischen den Lufttemperaturen erkennbar. Bedingt durch die flach einfallende Solarstrahlung wird diese Energie üblicherweise an den Flächen der oberen Etagen absorbiert (vgl. Abb. 2.7). Dieser Effekt wird durch die nicht-geometrische Strahlungsberechnung nicht berücksichtigt. Weiterhin kann die durch die geöffneten Klappen induzierte Luftströmung vom Mehrzonenmodell nicht aufgelöst werden.

Situation 4. Im Folgenden soll nun abschliessend der Kaltluftabfall an der Fassade bei geschlossenen Lüftungsklappen (Situation 4) betrachtet werden. Der Kaltluftabfall wurde auch bereits von SCHÄLIN untersucht und die gemessenen und berechneten Geschwindigkeitsverläufe auf verschiedenen Höhen im Atrium in Abhängigkeit des Abstandes von der Glasfassade in [91] veröffentlicht.

Wie zuvor wurden auch in diesem Fall die Randbedingungen mit Hilfe des SMILE-Gebäudemodells ermittelt. Die Fassadentemperatur wurde wie in [91] korrespondierend zu den Messwerten zu durchschnittlich 8°C gewählt. Für die in Abbildung 2.33 (links) ersichtlichen maximalen Luftgeschwindigkeiten im Bereich der Fassade wurden hier ebenfalls Werte in einer Größenordnung von etwa $0.5 \frac{\text{m}}{\text{s}}$ erhalten. Abbildung 2.33 (rechts) zeigt die dazugehörige Temperaturverteilung. Die Verhältnisse können als gut durchmischt bezeichnet werden, die Unterschiede der Lufttemperaturen im Inneren des Atriums betragen etwa 1.5K . Auf Bodenniveau des Atriums sind somit im unbeheizten Zustand leichte Zugerscheinungen infolge der Luftgeschwindigkeiten und -temperaturen zu erwarten.

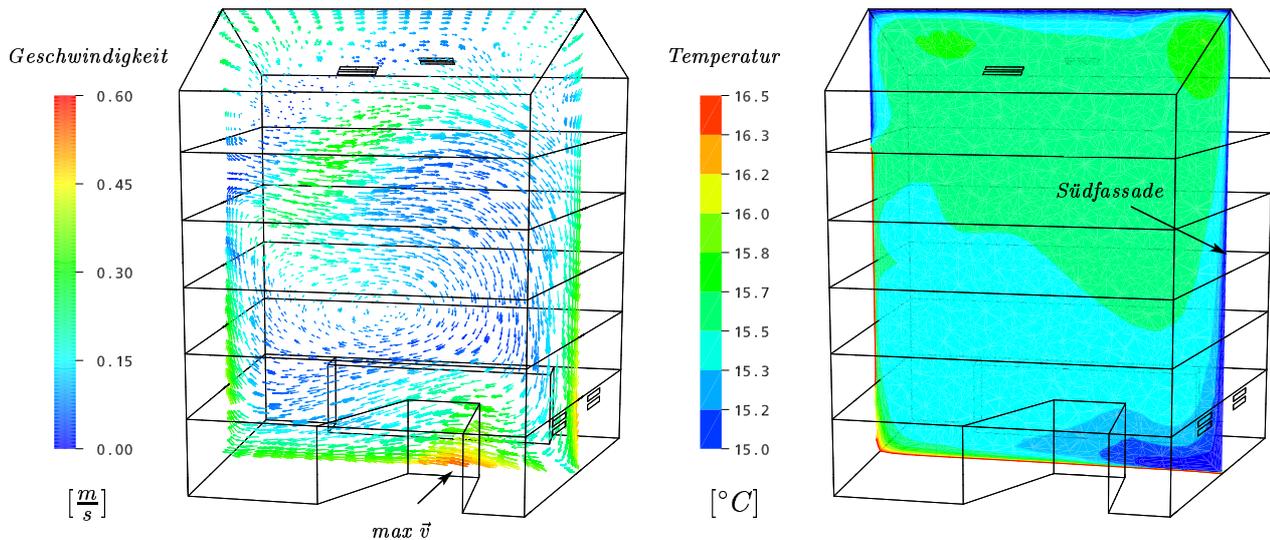


Abbildung 2.33: Kaltluftabfall an der Fassade (Fall 4), Klappen geschlossen. **Links:** Gemitteltetes Geschwindigkeitsfeld in Ebene senkrecht zur Fassade, **rechts:** Temperaturverteilung.

2.4.8 Postprozessing: Komfortanalyse

Anhand von Situation 4 (Winter, geschlossene Klappen) soll nun demonstriert werden, wie mit Hilfe der vorhandenen Simulationsdaten eine lokale Komfortanalyse durch Bestimmung des in Abschnitt 2.2 vorgestellten *PPD-Indexes* vorgenommen werden kann. Der nach Formel (2.3) berechnete Index zur Darstellung lokaler Zugserscheinungen wird auf zwei horizontalen Ebenen, einmal in Bodennähe (0.4m) und einmal in Höhe des Oberkörper-/Kopfbereiches (1.7m), visualisiert und ist in Abbildung 2.34 dargestellt. Man erkennt deutlich eine Beeinträchtigung der Nutzer im mittleren 'bodennahen' Bereich, wenn die Fassadenheizung nicht aktiv ist.

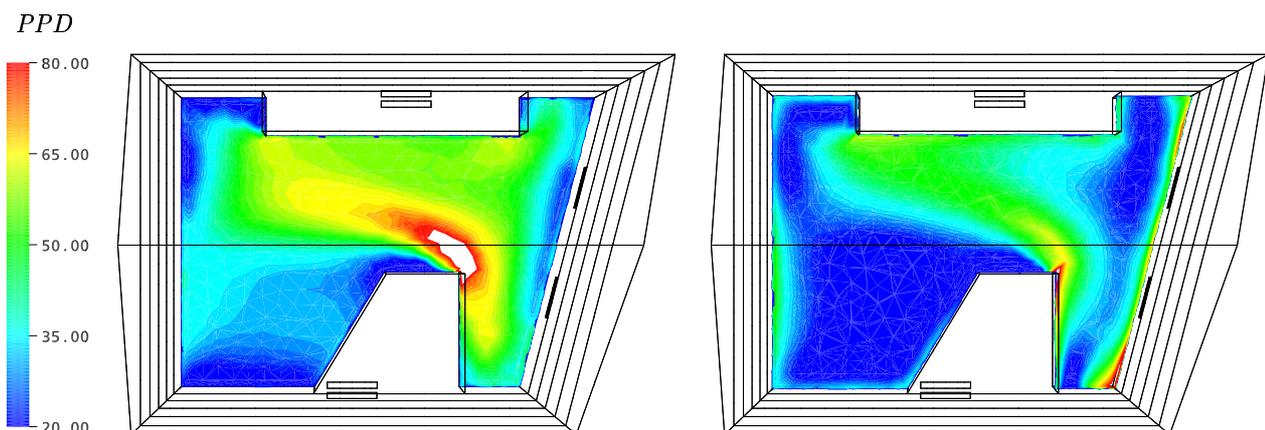


Abbildung 2.34: Visualisierung des aus den Simulationsdaten berechneten PPD-Indexes (Fall 4). **Links:** Höhe der Ebene: 0.4m, **rechts:** Höhe der Ebene: 1.7m

2.5 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

In diesem Kapitel wurden Raumluchtströmungen anhand typischer Varianten, wie z.B. Doppelfassaden und verglasten Hallen, charakterisiert und auf ihre Bedeutung hinsichtlich Wärmeverlust und Behaglichkeitskriterien wurde hingewiesen. Als Antriebskräfte natürlich belüfteter Gebäude wurden Druckdifferenzen infolge des dynamischen Winddruckes an der Gebäudehülle und Dichteunterschiede, die hauptsächlich durch Temperaturgradienten verursacht werden ('Stapeleffekt'), identifiziert. Zur näherungsweise Berechnung des thermischen Verhaltens von Gebäuden unter Berücksichtigung der thermischen Trägheit wurde ein Verfahren vorgestellt, das auf der Kombination eines Finite-Volumen-Ansatzes zur Bilanzierung der instationären Wärmeströme durch die Gebäudestruktur und eines Druckknotennetzwerkes zur Ermittlung der Enthalpieströme des interzonalen Luftwechsels beruht. Bei der Diskretisierung wurden eine einheitliche Raumluchttemperatur und stationäre Strömungsverhältnisse angenommen und der Impuls vernachlässigt. Die Untersuchung der thermischen Schichtung in grossen verglasten Hallen (Atrien) kann in bestimmten Fällen durch eine Approximation des vertikalen Temperaturverlaufes mit mehreren Knoten erfolgen; die Anwendung vereinfachter 1-Knoten-Rechenmodelle ist hier nicht praktikabel. Um quantitative Aussagen über lokale Strömungsvorgänge (z.B. den Kaltluftabfall) treffen zu können, deren Behandlung insbesondere zur Berechnung des konvektiven Wärmeüberganges in der wandnahen Grenzschicht von Bedeutung ist, ist deshalb eine hochauflösende Simulation mit CFD-Verfahren nötig, wie anhand der Vorstudie einer gekoppelten Simulation gezeigt werden konnte. Die Qualität der Ergebnisse wird dabei von der Genauigkeit der Auflösung der physikalischen Effekte massgeblich beeinflusst, wie z.B. von der Berechnung der Strahlungsverteilung (geometrisches oder nicht-geometrisches Modell), die für die Ausbildung von Auftriebsströmungen in verglasten Hallen hauptsächlich verantwortlich ist.

Durch den Aufwand, der mit einer detaillierten Modellierung bzw. Vernetzung und der Kopplung zwischen dimensionsreduzierten und hochauflösenden Verfahren verbundenen ist, werden diese Simulationstools in der Praxis noch selten eingesetzt. Zudem ist die (oft manuelle) Übertragung von Ergebnissen ein mühsamer und fehleranfälliger Prozess. Was fehlt, ist ein Werkzeug, das direkt an ein räumliches geometrisches Bauwerksmodell angebunden werden kann und auch in der Lage ist, die strukturellen und semantischen Informationen des Modells zur Generierung von Eingabedaten für die hier angesprochenen Simulationsverfahren konsistent aufzubereiten. Das folgende Kapitel zeigt einen Lösungsansatz für diese Problematik auf.

Kapitel 3

Geometrische, topologische und semantische Gebäudeanalyse und Diskretisierung

Im letzten Kapitel wurden Simulationstechniken zur partitionierten Lösung des Mehrfeldproblems bei der dynamischen Simulation des thermischen Verhaltens von Gebäuden motiviert. Dabei wurde festgestellt, dass eine Anbindung der Simulationsverfahren an ein räumliches geometrisches Bauwerksmodell

- zur Reduktion des Aufwandes bei der Generierung von Eingabedaten,
- zur Schnittstellendefinition hinsichtlich des Informationsaustausches während eines Kopplungsprozesses und
- zur Wahrung der Konsistenz zwischen gleichzeitig eingesetzten, mehrdimensionalen Simulationsmodellen

benötigt wird.

Nach einer knappen Einführung in die Grundlagen der Graphentheorie, der geometrischen Modellierung und der Produktmodellierung im Bauwesen wird in Abschnitt 3.4, dem Schwerpunkt dieses Kapitels, detailliert auf die Analyse eines Bauwerksmodells hinsichtlich Geometrie, Topologie und Semantik eingegangen, um die Voraussetzungen im Bereich des Präprozessings für eine Zonierung und Diskretisierung zu schaffen.

Hauptanliegen ist es dabei, die Durchgängigkeit der Kette von der abstrakten Modellbildung bis hin zum jeweiligen diskreten Modell (Mehrzonen- und/oder Strömungsmodell) im Sinne des in Kapitel 1 geforderten, integrativen Konzeptes zu gewährleisten. Das Vorgehen ist dabei in folgende Schritte gliedert:

- Überführung der geometrischen Informationen eines Bauwerksproduktmodells in ein Volumenmodell (Abschnitt 3.3),
- Zerlegung in ein sogenanntes Verbindungsmodell (Abschnitt 3.4.3),
- Extraktion von Luftvolumen und Hüllfläche eines Gebäudes (Abschnitt 3.4.4),

- Identifikation von Bauteilen (Abschnitt 3.5.1),
- Zonierung (Abschnitt 3.5.2) und
- Vernetzung und Diskretisierung (Abschnitt 3.5.4).

3.1 Grundlagen

3.1.1 Einführung in die Graphentheorie

Bevor auf die Grundlagen der Graphentheorie [45, 139, 178, 191] eingegangen wird, die für die Beschreibung von Topologien bei der geometrischen Modellierung von Körpern von Interesse ist, und die insbesondere als Basis für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Analyse und Interpretation von Gebäudedaten dienen wird, werden zunächst einige in diesem Zusammenhang verwendete Begriffe aus dem Bereich der Mengenlehre kurz erläutert. Die Struktur dieser Übersicht folgt dabei der Darstellung von PAHL und DAMRATH [139].

3.1.1.1 Mengentheoretische Begriffsdefinitionen

Kartesisches Produkt. Die Reihenfolge der Aufzählung der Elemente einer Menge ist definitionsgemäss ohne Bedeutung, so dass $\{a, b\} = \{b, a\}$. Allgemein können aber Beziehungen zwischen Elementen von Mengen bestehen. Dabei kann die Reihenfolge bei der Betrachtung von Mengen entscheidend sein. Ein *geordnetes Paar* (a, b) bezeichnet zwei Elemente a und b , deren Reihenfolge wesentlich ist. Unter dem *kartesischen Produkt* (auch: *direktes Produkt*) $A \times B$ zweier Mengen A und B versteht man die Menge der geordneten Paare (a, b) , die mit $a \in A$ und $b \in B$ gebildet werden können.

Unäre und binäre Relationen. Man unterscheidet *unäre* (*einstellige*) und *binäre* (*zweistellige*) Relationen. Eine *unäre* Relation auf der Menge M ist die Menge aller Elemente x , für die eine Relation Rx wahr ist; sie ist Teilmenge von M . Eine *binäre Relation* aRb definiert den booleschen Wert einer Verknüpfung eines geordneten Paares zweier Elemente a und b . Die Teilmenge R der Paare (a, b) , für die der Wert der Relation *wahr* ist, heisst Relation auf A und B und kann beispielsweise als Matrix dargestellt werden. Die Eigenschaften einer Relation werden insbesondere durch die Teilmenge $R \subseteq M \times M$ des kartesischen Produktes einer Menge M mit sich selbst, für die der Wert der Relation aRb wahr ist, bestimmt. Für die nachfolgende Analyse sind folgende Eigenschaften von Interesse (mit $a, b, c \in M$):

$$\begin{aligned}
 R \text{ ist reflexiv} & \quad :\Leftrightarrow \bigwedge_a (aRa) \\
 R \text{ ist symmetrisch} & \quad :\Leftrightarrow \bigwedge_a \bigwedge_b (aRb \Rightarrow bRa) \\
 R \text{ ist asymmetrisch} & \quad :\Leftrightarrow \bigwedge_a \bigwedge_b (aRb \Rightarrow \neg bRa) \\
 R \text{ ist transitiv} & \quad :\Leftrightarrow \bigwedge_a \bigwedge_b \bigwedge_c (aRb \wedge bRc \Rightarrow aRc)
 \end{aligned}$$

Unter einer *homogenen binären* Relation versteht man die Menge aller geordneten Paare, für die der Wert der zweistelligen Verknüpfung xRy der Elemente $x \in M$ und $y \in M$ wahr ist, d.h. beide Faktoren des kartesischen Produktes sind gleich:

$$R := \{(x, y) \in M \times M \mid xRy\} \subseteq M \times M \quad (3.1)$$

Bei einer *heterogenen binären* Relation hingegen wird die Relation xRy der aus zwei verschiedenen Mengen stammenden Elemente $x \in A$ und $y \in B$ betrachtet:

$$R := \{(x, y) \in A \times B \mid xRy\} \subseteq A \times B \quad (3.2)$$

Zusammengesetzte Relationen. Relationen werden anhand gleicher Eigenschaften zu *Relationstypen* klassifiziert. Von Interesse ist dabei eine Verkettung von Relationen, die einer Multiplikation von zwei Relationsmatrizen nach dem *Falkschen Schema* [139] entspricht und später im Zusammenhang mit der Suche von Wegen benötigt werden wird. Als *Kettung* oder *zusammengesetzte Relation* $R \circ S$ von zwei Relationen $R \subseteq A \times B$ und $S \subseteq B \times C$ bezeichnet man die Menge der geordneten Paare $(a, c) \in A \times C$, für die es ein gemeinsames Element in B gibt:

$$S \circ R := \{(a, c) \in A \times C \mid \bigvee_{b \in B} (aRb \wedge bSc)\} \quad (3.3)$$

Äquivalenzklassen. Bei der später beschriebenen Bildung von Zusammenhangskomponenten wird von Äquivalenzklassen gesprochen werden. Unter einer *Äquivalenzklasse* versteht man eine Teilmenge einer Menge M , wenn diese paarweise äquivalente Elemente enthält. Äquivalenzklassen werden durch ein beliebiges Element, einen sogenannten *Repräsentanten* $[a]$, beschrieben. Die *Äquivalenzrelation* $\ddot{A} \subseteq M \times M$ ist dabei reflexiv, symmetrisch und transitiv.

$$[a] := \{x \in M \mid (a, x) \in \ddot{A}\} \quad (3.4)$$

Eine *Quotientenmenge* bezeichnet in diesem Zusammenhang eine Menge, deren Elemente die Äquivalenzklassen einer Menge M für die Äquivalenzrelation \ddot{A} sind:

$$M / \ddot{A} := \{[x] \mid x \in M\} \quad (3.5)$$

Verbindungen. Weiterhin von Bedeutung ist der Begriff einer *Verbindung* $aV_R b$ von zwei Elementen a und b durch die Relation $R \subseteq M \times M$ in M durch das n -Tupel $(x_1, x_2, \dots, x_n) \in M^n$, wenn alle geordneten Paare (x_i, x_{i+1}) in R enthalten sind und $x_1 = a, x_n = b$. Die Anzahl $n-1$ heisst die *Länge der Verbindung*. Zwischen a und b kann es dabei mehr als eine Verbindung mit unterschiedlichen Längen geben. Diese Eigenschaft wird im nächsten Abschnitt bei der Bestimmung von *Hüllen* von Relationen von Bedeutung sein.

3.1.1.2 Grundbegriffe der Graphentheorie

Mathematische Grundlage der Graphentheorie stellt die *Relationenalgebra* dar. Ein Graph kann begrifflich als ein aus *Knoten* und *Kanten* bestehendes Gebilde klassifiziert werden, deren Bedeutung von seiner Anwendung abhängt. Verknüpfungen von Elementen in Relationen können mit Hilfe eines *Graphendiagrammes* visualisiert werden, wobei Knoten, zwischen denen eine Beziehung besteht, durch Kanten verbunden werden. Man unterscheidet *gerichtete* und *ungerichtete* Kanten und *Schlingen*, d.h. Knoten, die mit sich selbst verbunden sind (*reflexive* Relation).

Hüllen. Für die in Abschnitt 3.4 folgenden Untersuchungen werden insbesondere homogene binäre Relationen eine Rolle spielen. In diesem Zusammenhang wird es weiterhin wichtig sein, diesen Relationstyp $R \subseteq M \times M$ um weitere Elemente des kartesischen Produktes $M \times M$ zu erweitern. Eine sogenannte *Hülle* erhält damit erweiterte Eigenschaften, die die Relation nicht besitzt.

- **Reflexive Hülle.** Eine *reflexive Hülle* $\langle R \rangle_r$ von $R \subseteq M \times M$ erhält man, indem R mit den Elementen $(x, x) \in M \times M$ (der *Einheitsrelation* I) vereinigt wird, d.h. alle Schlingen hinzugefügt werden.

$$\langle R \rangle_r = R \sqcup I \quad (3.6)$$

$$I := (e_{ij}) \quad \text{mit} \quad e_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq j \\ 1 & \text{für } i = j \end{cases} \quad (3.7)$$

- **Symmetrische Hülle.** Eine *symmetrische Hülle* $\langle R \rangle_s$ von $R \subseteq M \times M$ entspricht der Vereinigung der Relation R mit der Transponierten R^T . Anschaulich kann durch diese Vereinigung die Richtung der Kanten im Graphen entfernt werden.

$$\langle R \rangle_s = R \sqcup R^T \quad (3.8)$$

- **Transitive Hülle.** Eine *transitive Hülle* $\langle R \rangle_t$ oder kurz R^+ enthält alle Elemente $(x, y) \in M \times M$, die in M nicht nur benachbart, sondern allgemein Verbindungen (vgl. 3.1.1.1) durch R mit Längen ≥ 1 aufweisen. Verbindungen können dabei durch *Potenzen*, d.h. durch Verkettung einer Relation mit sich selbst dargestellt werden (vgl. auch 3.1.1.1). Allgemein enthält eine Potenz $R^m = R \circ \dots \circ R$ (*m-fach*) alle *Verbindungen der Länge m* zwischen zwei Elementen von M . Die Menge aller Verbindungen in M durch R mit der Länge $m \leq s$ erhält man somit durch Vereinigung der Verbindungsrelationen:

$$R^+ = \langle R \rangle_t = R \sqcup R^2 \sqcup \dots \sqcup R^s \quad \text{mit } s = \text{Stabilitätsindex} \quad (3.9)$$

s ist dabei der *Stabilitätsindex*, d.h. der kleinste Exponent, für den sich das Ergebnis der Vereinigung (3.9) durch zusätzliche Terme R^m mit $m > s$ nicht ändert.

Zur Analyse einer Gebäudetopologie werden insbesondere Kombinationen bzw. Verschachtelungen verschiedener Hüllenformen benötigt. Eine *reflexiv-transitive Hülle* R^* erhält man somit nach Gl.(3.10).

$$R^* = \langle R \rangle_{rt} = I \sqcup R \sqcup R^2 \sqcup \dots \sqcup R^s \quad (3.10)$$

Beispiel. Abbildung 3.1 zeigt exemplarisch einen nicht zyklensfreien Graphen und dessen Adjazenzrelation R .

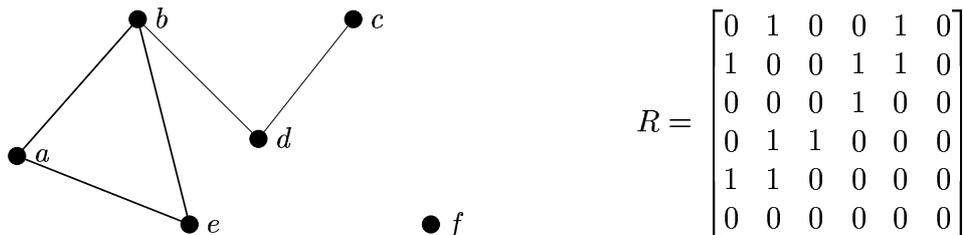


Abbildung 3.1: Beispiel: Einfacher Graph mit Zyklus und Adjazenzrelation R

Die transitive Hülle R^+ und die reflexiv-transitive Hülle R^* ergeben sich somit zu

$$R^+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad R^* = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} .$$

Klassifizierung. Anhand ihrer verschiedenen Eigenschaften können Graphen in folgende Klassen unterteilt werden, vgl. [139] und [52]. Im Rahmen dieser Arbeit sind dabei insbesondere *einfache* und *schlichte* Graphen von Interesse.

- **Schlichte (gerichtete) Graphen.** Ein Graph $G = (V; R)$ wird definitionsgemäss als *schlicht* bzw. *gerichtet* bezeichnet, wenn die homogene binäre Relation $R \subseteq V \times V$ die Kantenmenge des Graphen ist. Ein geordnetes Paar (x, y) der Knotenmenge V entspricht dabei einer gerichteten Kante vom Anfangsknoten $x \in V$ zum Endknoten $y \in V$.
- **Einfache (ungerichtete) Graphen.** Handelt es sich bei der Relation um eine *antireflexive* und *symmetrische* Relation S , wird der Graph als *einfach* bzw. *ungerichtet* bezeichnet. Eine solche Relation heisst auch *Nachbarschafts-* oder *Adjazenzrelation*. Antireflexiv bedeutet schlingenfrei, d.h. es gibt keine Knotenpaare (x, x) und es gilt $I \subseteq \overline{R}$ (\overline{R} bezeichnet das *Komplement* von R). Bei einer symmetrischen Relation befinden sich zwischen zwei verschiedenen Knoten entweder keine oder ein Paar entgegengesetzt gerichteter Kanten, die zu einer ungerichteten Kante zusammengefasst werden. Es gilt $R = R^T$. Jedem schlichten Graphen $G = (V; R)$ kann ein einfacher Graph $G_E = (V; S)$ zugeordnet werden.
- **Bipartite Graphen** beschreiben Beziehungen zwischen Elementen aus zwei disjunkten Knotenmengen V_1 und V_2 mit den Kantenmengen $R_1 \subseteq V_1 \times V_2$ und $R_2 \subseteq V_2 \times V_1$ durch heterogene binäre Relationen. Kanten werden mit den geordneten Paaren $(x, y) \in R_1$ und $(y, x) \in R_2$ bezeichnet. Bipartite Graphen finden beispielsweise Anwendung bei der Ablaufplanung im Bauwesen, indem Bauvorgänge und Bauzustände als Knotenmengen dargestellt werden [172], wobei zeiterfordernde Geschehen mit definiertem Anfang und Ende in DIN 69900 definiert werden.
- **Multigraphen.** Im Gegensatz zu schlichten Graphen stellen bei *Multigraphen* Kanten keine Relationen auf Knoten dar, sondern sind als eigenständige Elemente eines Graphen definiert. Nach [139] heisst ein Gebilde $G = (V, K; A, B)$ Multigraph, wenn V die Knotenmenge, K die Kantenmenge und $A, B \subseteq K \times V$ rechtseindeutige binäre Relationen sind. A enthält dabei die Anfangsknoten und B die Endknoten. Eine Relation ist *rechtseindeutig*, wenn die Aussagen aRb und cRb nur für $a = c$ wahr sind.
- **Hypergraphen.** Ein *Hypergraph* besteht aus Knoten und Hyperkanten, wobei eine *Hyperkante* eine ungerichtete Kante ist, die mehrere Knoten miteinander verbindet. Ein Gebilde $G = (V, K; M)$ heisst Hypergraph, wenn $M \subseteq K \times V$ eine heterogene binäre

Relation ist und die Knoten der Hyperkanten spezifiziert (*Inzidenz*). Beispiel für einen Hypergraphen ist die Gesamtheit eines U-Bahn Netzes mit Haltestellen als Knoten und den Strecken als ungerichtete Kanten, die von mehreren Linien befahren werden können.

Struktureigenschaften. Die Struktureigenschaften von schlichten und einfachen Graphen werden durch verschiedene Formen des Zusammenhangs bestimmt, insbesondere kann mit Kenntnis der transitiven Hülle untersucht werden, ob ein Graph *Zyklen* enthält, welche kürzesten *Wege* es gibt, und welche Auswirkungen *Schnitte* im Graphen haben. Ein offener *Kantenzug*, d.h. eine Folge zusammenhängender Kanten mit verschiedenem Anfangs- und Endknoten, wird dabei als *Weg* bezeichnet.

Für die Algebraisierung ist es von Vorteil, einen Weg von einem Knoten x zu einem Knoten y mit einer eigenen Relationsmatrix xy^T darzustellen. Beispielsweise ergibt sich für die Relation "Gibt es einen Weg von b nach c ?" des Graphen aus Abbildung 3.1

$$b c^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{mit} \quad b = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad c = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} .$$

Die nachfolgenden Betrachtungen von schlichten Graphen lassen sich teilweise auch auf einfache Graphen übertragen, da diese als Sonderfall betrachtet werden können, wobei ihre Adjazenzrelation symmetrisch und antireflexiv ist.

Bei einem *Zyklus* handelt es sich um einen geschlossenen Kantenzug mit identischem Anfangs- und Endknoten. Eine Schlinge ist ein Zyklus mit Länge 1, ein zyklischer Graph ohne Schlingen heisst *echt*. Für die weitere Betrachtung wird u.a. die Analyse folgender Struktureigenschaften von Bedeutung sein:

- Es gibt genau dann einen nichtleeren Weg von x nach y , wenn $xy^T \sqsubseteq R^+$.
- Es gibt genau dann einen Zyklus der Länge $n > 0$ durch x , wenn $xx^T \sqsubseteq R^n$.
- Es gibt genau dann einen Zyklus durch x und y , wenn $xy^T \sqsubseteq R^+ \sqcap R^{+T}$.

In diesem Sinne unterscheidet man

- *azyklische* (zyklenfreie) Graphen, wenn ein Graph keine Zyklen enthält, R^+ asymmetrisch ist und

$$R \sqcap R^{+T} = 0 \quad , \quad (3.11)$$

- *antizyklische* Graphen, wenn ein Graph keine echten Zyklen enthält, aber nicht notwendigerweise schlingenfrei ist, R^+ antisymmetrisch (identitiv) ist und

$$R \sqcap R^{+T} \sqsubseteq I \quad \text{und} \quad (3.12)$$

- *zyklische* Graphen, wenn jeder nichtleere Weg zu einem Zyklus gehört, R^+ symmetrisch ist und

$$R^+ = R^{+T} \quad . \quad (3.13)$$

Bei einfachen Graphen muss beachtet werden, dass aufgrund der Symmetrie der Adjazenzrelation eine Vielzahl *trivialer Zyklen*, d.h. Wege, die mehrfach vor- bzw. rückwärts durchschritten werden, gefunden werden können. Diese Wege sind für die Analyse echter Zyklen ohne Bedeutung. Auf die Lösung dieser Problematik wird später eingegangen.

Eulersche und Hamiltonsche Wege. Enthält ein *einfacher* Weg bzw. Zyklus, d.h. ein nicht-leerer Weg ohne mehrfach enthaltene Kanten, alle Kanten eines Graphen, so nennt man dies einen *Eulerschen Weg* bzw. *Zyklus*. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von *Untergraphen*. Ein *Hamiltonscher Weg* bzw. *Zyklus* ist ein *elementarer* Weg bzw. Zyklus, d.h. ohne mehrfache Knoten, in dem alle Knoten eines schlichten Graphen enthalten sind.

Grad eines Knotens. Unter dem *Grad* eines Knotens versteht man die Anzahl der Kanten, die von einem Knoten ausgehen. Dabei wird zwischen dem *Ausgangs-* bzw. *Eingangsgrad*, $g^+(v)$ bzw. $g^-(v)$, unterschieden.

Bewertete Graphen. Als *bewertet* oder *gewichtet* bezeichnet man einen Graphen, wenn Kanten hinsichtlich spezifischer Eigenschaften bewertet oder gewichtet werden (auch *Netz* genannt). Beispielsweise spielt die Suche nach kürzesten Wegen in Netzen bei der Analyse von Verkehrsströmen oder der Auslegung von Netzfahrplänen eine Rolle; im Rahmen der Optimierungstheorie werden etwa Flüsse in Netzen bestimmt.

3.1.1.3 Zusammenhang von Graphen

Für die im Rahmen der topologischen Strukturanalyse (vgl. Abschnitt 3.4) implementierte Algorithmik ist es erforderlich, Graphen auf ihren Zusammenhang hin zu untersuchen und diese ggf. in *Untergraphen* zu zerlegen. Man unterscheidet bei schlichten Graphen *strengen*, *pseudostrengen* und *schwachen* Zusammenhang. Enthält eine Relation nur Zusammenhänge gleichen Typs, spricht man von einer *Zusammenhangsrelation*.

- Zwei Knoten x und y hängen *streng* zusammen, wenn beide voneinander erreichbar sind, d.h. $x y^T \sqsubseteq R^* \sqcap R^{*T}$; ein Graph hängt streng zusammen, wenn

$$R^* \sqcap R^{*T} = E \quad , \quad \text{wobei} \quad (3.14)$$

$$E := (e_{ij}) \quad \text{mit} \quad e_{ij} = 1 \quad \forall i, j \quad (3.15)$$

als *Allrelation* bezeichnet wird.

- *Pseudostreng* zusammenhängend heisst, dass x von y oder y von x erreichbar ist und $x y^T \sqsubseteq R^* \sqcup R^{*T}$; ein Graph hängt pseudostreng zusammen, wenn

$$R^* \sqcup R^{*T} = E \quad . \quad (3.16)$$

- Bei einem *schwachen* Zusammenhang hängen zwei Knoten in ihrem symmetrischen Graphen $(V; R \sqcup R^T)$ streng zusammen, d.h. $x y^T \sqsubseteq (R \sqcup R^T)^*$. Ein Graph hängt schwach zusammen, wenn gilt

$$(R \sqcup R^T)^* = E \quad . \quad (3.17)$$

Grundsätzlich sind diese Betrachtungen zwar auch auf einfache Graphen übertragbar, wobei sich, wie bereits erwähnt, Vereinfachungen durch die Symmetrieeigenschaften der Adjazenzrelation Γ ergeben. Eine Unterscheidung zwischen strengem, pseudostrengem bzw. schwachem Zusammenhang ist deshalb nicht möglich.

- Zwei Knoten x und y werden als *einfach zusammenhängend* bezeichnet, wenn $x y^T \sqsubseteq \Gamma^*$; ihr einfacher Graph hängt einfach zusammen, wenn

$$\Gamma^* = E \quad . \quad (3.18)$$

Zerlegung in Zusammenhangskomponenten. Eine der obigen Zusammenhangsrelationen nutzend, ist ein Graph zusammenhängend, wenn seine Äquivalenzrelation (vgl. Abschnitt 3.1.1.1) identisch mit der Allrelation E ist. Ist ein Graph nicht zusammenhängend, so kann er eindeutig in zusammenhängende Untergraphen, sogenannte *Zusammenhangskomponenten* zerlegt werden. Nach [139] bietet sich hierfür folgender Algorithmus an:

1. Zerlegung der Knotenmenge V in die Menge K ihrer Zusammenhangsklassen durch Bildung der Äquivalenzrelation Z . Eine Zusammenhangsklasse $[x]$ enthält somit alle Knoten von V , die mit x zusammenhängen. Die Zerlegung kann als unäre Relation aufgefasst werden:

$$[x] = Z x \quad (3.19)$$

2. Bestimmung der *Abbildung* Φ der Knotenmenge K auf die *Quotientenmenge* K der Zusammenhangsklassen:

$$\Phi : V \longrightarrow K \quad \text{mit} \quad K = \frac{V}{Z} \quad (3.20)$$

3. Mit Hilfe der Abbildung Φ kann nun der *reduzierte Graph* $G_K = (K; R_K)$ bestimmt werden. Die Relation R_K erhält man durch die Multiplikation

$$R_K = \Phi^T R \Phi \quad . \quad (3.21)$$

4. Schliesslich können die *Zusammenhangskomponenten*, d.h. zusammenhängende Untergraphen $G_k := (V_k, R_k)$ des Graphen, gebildet werden, wobei eine Knotenmenge V_k jeweils alle Knoten einer Zusammenhangsklasse $[x]$ enthält.

Bei der Zerlegung einfacher Graphen wird entsprechend eine *einfache Zusammenhangsrelation* $Z = \Gamma^*$ verwendet; man erhält *einfache Zusammenhangskomponenten*.

Schnitte in einfachen Graphen. Da für die Analyse von Gebäudetopologien insbesondere einfache Graphen eine Rolle spielen werden, werden im Folgenden die Besonderheiten von Schnitten in einfachen Graphen betrachtet.

Soll zwischen azyklischen und zyklischen Graphen unterschieden werden, muss die Adjazenzrelation Γ in Anteile gesplittet werden, die nur Brückenkanten bzw. nur Zykluskanten, Γ_B bzw. Γ_Z , enthalten. Die Adjazenzrelation ist somit $\Gamma = \Gamma_B \sqcup \Gamma_Z$ mit $\Gamma_B \cap \Gamma_Z = \emptyset$. Als *Brückenkante* bezeichnet man dabei eine ungerichtete Kante zwischen zwei Knoten, wenn diese ausschliesslich durch diese Kante verbunden werden können. Eine *Zykluskante* ist sinngemäss eine in einem Zyklus enthaltene Kante. Diese Aufteilung ist wichtig, da eine symmetrische Adjazenzrelation triviale Zyklen enthalten kann (vgl. Abschnitt 3.1.1.2, Struktureigenschaften), und somit die für schlichte Graphen geltenden Bedingungen nicht anwendbar sind.

Unter Verwendung der Äquivalenzrelation $Z = \Gamma_Z^*$ kann ein einfacher Graph nun analog zu dem Procedere bei schlichten Graphen in einfache zyklische Zusammenhangskomponenten 'zerschnitten' werden. Zwei Knoten können dabei als *einfach zyklisch zusammenhängend* identifiziert werden, wenn $x y^T \sqsubseteq \Gamma_Z^*$. Ihr Graph hängt einfach zyklisch zusammen, wenn

$$\Gamma_Z^* = E \quad . \quad (3.22)$$

Blöcke und Artikulationsknoten. Ein *Block* bezeichnet einen Untergraphen, wenn dieser *elementar zyklisch zusammenhängend* ist, d.h., wenn zwei Knoten identisch, benachbart, oder in einem elementaren Zyklus enthalten sind. Ein solcher Zyklus enthält keine *Artikulationsknoten*, d.h. Knoten, die jeweils als einzig mögliches Verbindungselement zwischen zwei unterschiedlichen Knoten existieren. Ein Block heisst *echt*, wenn er in keinem weiteren Block als Untergraph enthalten ist. Zwei verschiedene Blöcke haben dabei entweder keinen oder genau einen gemeinsamen Knoten (Artikulationsknoten).

3.1.2 Grundlagen der geometrischen und topologischen Modellierung

Bei der rechnergestützten geometrischen Modellierung von Bauwerken, dem sogenannten *Computer Aided Geometric Design (CAGD)*, wird historisch bedingt zwischen einem *zeichnungs-* und *modellorientierten* Ansatz unterschieden. Obwohl CAD Systeme heutzutage einen hohen Entwicklungsstand erreicht haben und insbesondere auch den letztgenannten Aspekt unterstützen, stellt die Beschränkung auf die zweidimensionale Zeichenarbeit immer noch eine weitverbreitete Lösung in Ingenieurbüros dar [26]. Im Folgenden soll auf die Methode der Volumenmodellierung eingegangen werden, da diese die Basis des weiter unten definierten Bauwerksmodells und somit des numerischen Simulationsmodells darstellen wird. Dabei ist es von Bedeutung, zwischen den Begriffen Geometrie, Topologie und Semantik zu unterscheiden.

Die *Geometrie* beschreibt die (geometrische) Lage von Punkten, den Verlauf und die Gestalt von Linien, die Form von Flächen und die Gestalt von Körpern im Raum. Beispielsweise können Körper in der Oberflächendarstellung als Polyeder beschrieben und daraus, durch geometrische Attributierung, kompliziertere Geometrien erzeugt werden. In diesem Zusammenhang sind Freiformkurven wie *Bézierkurven*, *B-Splines* oder *NURBS (Non Uniform Rational B-Splines)* und Freiformflächen zu nennen. Auf den *geometrischen* Teilaspekt wird u.a. in der Arbeit von BRÖKER [26] eingegangen.

Die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Punkten, Kanten und Flächen werden durch die *Topologie* bestimmt. Abgesehen davon, dass die Analyse von Nachbarschaftsbeziehungen zwischen geometrischen Objekten im Rahmen der rechnerinternen Darstellung durch Fließkommazahlen problematisch sein kann (Rundungsfehler), ist die Topologie *grundlegender* als die Geometrie, denn Körper mit gleicher Topologie können unterschiedliche geometrische Informationen tragen (Invarianz) [31]. Die Topologie wurde Ende des 19. Jahrhunderts von HENRI POINCARÉ (1854-1912) begründet und stellt die 'allgemeinste Form' der Geometrie dar [28, 83]. Die Topologie ist dort von Bedeutung, wo *qualitative* Lagebeziehungen von Körpern zueinander entscheidend sind. Metrische Grössen, d.h. Längen bzw. Winkel, finden hier keine bzw. nur *indirekt* Berücksichtigung (Bsp. Radialkante, siehe unten). Die Betrachtung topologischer Lagebeziehungen wird insbesondere bei den weiter unten betrachteten Oberflächenmodellen eine Rolle spielen. Die im vorangegangenen Abschnitt vorgestellte Graphentheorie stellt dabei die Basis für die topologische Beschreibung geometrischer Modelle dar.

Für die folgenden Betrachtungen gehen wir nun in der Regel von *starrten Körpern* im Sinne von BUNGARTZ [31] aus, d.h. von beschränkten, abgeschlossenen und regulären Körpern, die translations- und rotationsinvariant sind. Im Laufe der späteren Analyse von Bauwerksmodellen werden dabei vorzugsweise 'echt' dreidimensionale Körper, eben *Volumenkörper*, eine Rolle spielen. Infolge von Operationen auf den Modellen kann es aber vorkommen, dass auch 'baumelnde' Kanten oder Flächen entstehen, weshalb diese hier nicht a priori ausgeschlossen werden. Das Modell muss somit in der Lage sein, auch nicht reguläre Körper beschreiben zu können.

Darüber hinaus können im Laufe des weiter unten beschriebenen Zerlegungsprozesses Körper gebildet werden, die die *Mannigfaltigkeitsbedingungen* verletzen, d.h. die dann der Klasse der

physikalisch nicht realisierbaren (zusammenhängenden) Gebilde zuzurechnen sind. Man unterscheidet *manifold* und *non-manifold* Körper.

Nach ZEIDLER [83] können die Unterschiede mit Hilfe der Eigenschaften *topologischer Räume*, d.h. Teilmengen des \mathbb{R}^n bzw. Mannigfaltigkeiten, die sich bei *Homöomorphismen* nicht ändern, erklärt werden. Ein topologischer Raum ist dabei der allgemeinste Raumtyp, in dem sich grundlegende Begriffe der Analysis noch formulieren lassen. Er bezeichnet eine Menge X mit einer auf ihr erklärten Topologie T , wenn ein System von Teilmengen von X offene Mengen sind, so dass gilt: X und die leere Menge sind offen und die Vereinigung beliebig vieler und der Durchschnitt endlich vieler offener Mengen sind wieder offen. Eine Abbildung $f : X \rightarrow Y$ heisst *homöomorph*, wenn f bijektiv (umkehrbar eindeutig) ist und f und ihre Umkehrfunktion stetig sind bzw. offene Mengen auf offene Mengen abbilden. Homöomorphismen eines topologischen Raumes T sind anschaulich *'gummiartige Verbiegungen von T , bei denen keine Risse auftreten'*. Abbildung 3.2 zeigt anhand des *Jordanschen Kurvensatzes*, dass Homöomorphismen schon im zweidimensionalen Raum nicht trivial sein können. Das Komplement einer *Jordankurve* C besteht aus zwei disjunkten Gebieten, dem Inneren und dem Äusseren [83].

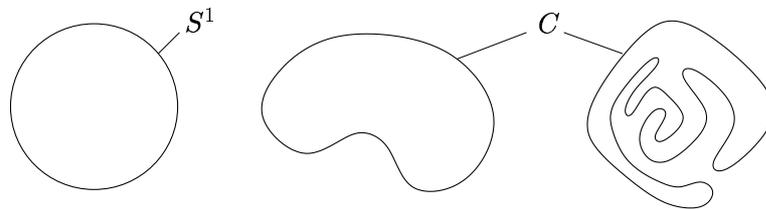


Abbildung 3.2: Eine Jordankurve C ist eine Menge des \mathbb{R}^2 , die zu einer Kreislinie S^1 homöomorph ist [83]. Das anschaulich klare topologische Problem ist mathematisch aufwändig zu untersuchen, da beispielsweise Kurven auch nicht-konvex sein können.

Als n -dimensionale *Mannigfaltigkeit* bezeichnet man nun einen topologischen Raum, in dem jeder Punkt $x \in X$ eine Umgebung besitzt, die homöomorph zu einer offenen Menge des \mathbb{R}^n oder des Halbraumes $H^n := \{(x_1, \dots, x_m) \in \mathbb{R}^n \mid x_m \geq 0\}$ ist [26]. Abbildung 3.3 zeigt ein Beispiel eines Körpers, der anschaulich die *manifold* Bedingung nicht erfüllt: Der Körper enthält auch Punkte, die eine Umgebung besitzen, die nicht homöomorph zur zweidimensionalen offenen Vollkugel sind. Im Beispiel lässt sich jede offene Umgebung eines Punktes auf der markierten Kante weder eindeutig abbilden auf eine offene Menge in \mathbb{R}^n , noch auf einen Punkt, der am

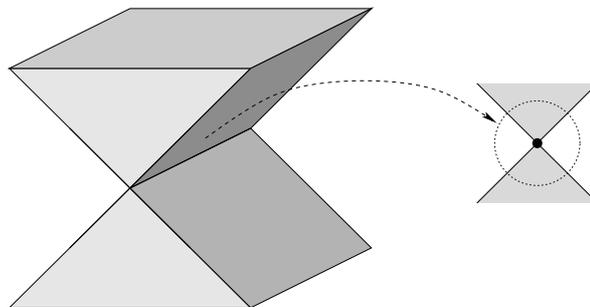


Abbildung 3.3: Körper mit nichtmannigfaltiger Umgebung

Rande eines Halbraumes definiert ist. Wie auch solche Körper in einer Datenstruktur behandelt werden können, wird weiter unten beschrieben.

Weiterhin können Körper mit *semantischen Informationen* belegt werden. Auf diese speziellen Eigenschaften wird in Abschnitt 3.2 eingegangen, wobei der Begriff der Produktmodellierung erläutert wird. Dabei wird es von Interesse sein, Körper nicht mehr als Akkumulation von Punkten, Kanten und Flächen zu betrachten, sondern (zusammengesetzte) geometrische Primitive als abstrakte Objekte, beispielsweise als 'Wand' oder 'Decke', identifizieren zu können, und somit weitere Attributierungen zuzulassen.

Im Folgenden wird ein Überblick über die verschiedenen geometrischen Modelle und ihre Datenstrukturen gegeben, insoweit sie im Rahmen dieser Arbeit verwendet, implementiert oder angewendet wurden. Der Abschnitt folgt der Darstellung von BUNGARTZ, GRIEBEL und ZENGER [31]. Dabei wird zwischen *direkten* und *indirekten Darstellungsschemata* unterschieden. Für weiterführende Ausführungen sei auf die entsprechende Literatur verwiesen [1, 31, 66, 125].

3.1.2.1 Direkte Darstellungsschemata

Bei direkten Darstellungsschemata wird zwischen folgenden Varianten unterschieden. Alle Verfahren besitzen dabei die gemeinsame Eigenschaft, dass Volumenkörper durch Zusammenfügen von (teilweise parametrisierten) Primitiven erzeugt werden, die mit dem jeweiligen Schema generiert worden sind.

Normzellen-Aufzählungsschema. Man unterscheidet zwischen dem *uniformen Normzellen-Aufzählungsschema* und dessen Verallgemeinerung, dem *blockstrukturierten Zellzerlegungsschema*. Das uniforme Schema bzw. die einzelnen Blöcke des blockstrukturierten Schemas teilen den Raum bzw. Raumabschnitt in ein Gitter gleich grosser Zellen ein. Im zweidimensionalen Fall spricht man in Analogie zur Rastergraphik von einer *Pixelmatrix*, im dreidimensionalen Fall von einer *Voxelmatrix*. Abbildung 3.4 demonstriert anschaulich die Darstellung einer Fläche bzw. eines Körpers durch Mengen von Zellen. Die Mittelpunkte der Zellen entsprechen den Koordinaten in der Matrix. Anschaulich genügt eine Bit-Matrix zur Speicherung der Informationen 0 und 1, je nachdem, ob es sich z.B. um einen 'Fluid-' oder 'Strukturknoten'

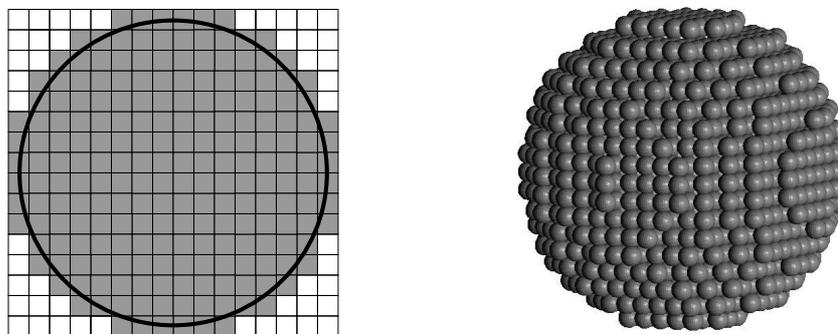


Abbildung 3.4: Beispiel: Approximierung einer Kreisfläche (links) bzw. einer Kugel (rechts) mit Hilfe des Normzellen-Aufzählungsschemas.

handelt. Die Speicherkomplexität des Verfahrens bei Verwendung einer Bit-Matrix ist $\mathcal{O}(n^D)$ mit $D = \text{Anzahl der Raumdimensionen}$.

Im weiter unten beschriebenen Diskretisierungsprozesses eines Strömungsgebietes wird es ausreichend sein, lediglich die Oberfläche eines Volumenkörpers zu approximieren. Um ein Volumenmodell zu beschreiben, müsste dann das Innenvolumen mit Pixeln bzw. Voxeln gefüllt werden. Dies kann nach der Auswahl eines 'Saatpunktes' im Inneren algorithmisch beispielsweise mit Hilfe eines rekursiven Füll-Algorithmus, der im Zusammenhang mit dem Verfahren von BRESENHAM [24] eingesetzt wird, oder mittels *Scan-Line-Algorithmen* [31] realisiert werden. Weiterhin ist es möglich, Körperoberflächen Randbedingungen zuzuweisen, indem die bitweise Repräsentation durch die Speicherung von Integer-Werten und einer entsprechenden Inzidenztabelle erweitert wird (vgl. Abschnitt 3.5.4).

Oktalbäume (Octrees). Um den inhärenten Speicherplatzbedarf des Aufzählungsschemas um eine Größenordnung auf $\mathcal{O}(n^{D-1})$ zu reduzieren¹, bietet sich die Variante des hierarchischen und rekursiven *Oktalbaumschemas* an.

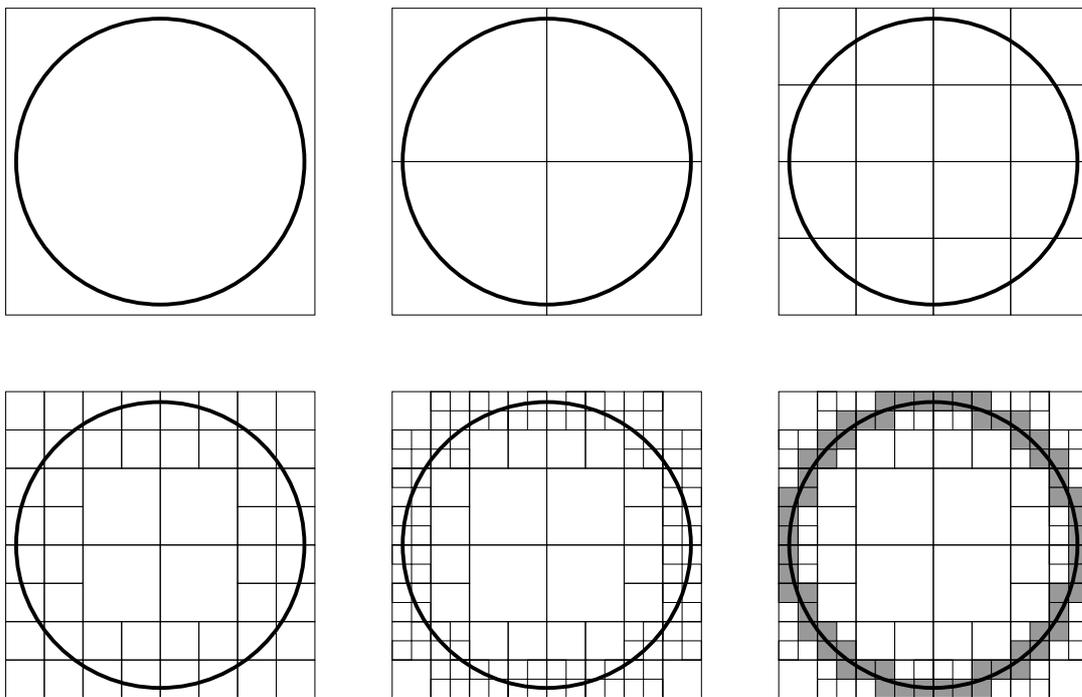


Abbildung 3.5: Approximation eines Kreises mit Hilfe eines *Spacetrees*. Der dargestellte *Quadralbaum* stellt das zweidimensionale Analogon zum Oktalbaum dar. Orthogonale Schnitte in Oktalbäumen können als *Quadralbäume* dargestellt werden.

Hierfür wird zunächst eine sogenannte *Bounding-Box*, d.h. ein ausreichend grosser, den Volumenkörper umschliessender Würfel, gebildet. Dieser Würfel wird solange rekursiv in acht Teilwürfel halber Kantenlänge unterteilt, bis ein Würfel jeweils ganz innerhalb oder ganz ausserhalb des Volumenkörpers liegt oder bis eine vom Benutzer vorgegebene Genauigkeit, d.h.

¹('gutartige' Berandungen, d.h. beispielsweise keine fraktalen Geometrien, vorausgesetzt)

eine minimale Kantenlänge h , erreicht wurde [31]. Den Würfeln entsprechen *Knoten* in der Datenstruktur, nicht mehr weiter unterteilte Würfel werden als *Blätter* bezeichnet. Die *Tiefe* t eines Baumes ist bestimmt durch den maximalen Abstand, den ein Blatt von der *Wurzel*, dem sogenannten *Root-Oktanten*, besitzt. Mit einem Baum der Tiefe t kann folglich eine Genauigkeit $h = \mathcal{O}(2^{-t})$ erzielt werden. Im dreidimensionalen Fall weist die Baumdatenstruktur eine achtfache Verästelung auf. Mit Ausnahme der Wurzel besitzt jeder Knoten genau einen Vorgänger. Durch die uniforme Unterteilung sind die lokalen Positionen einzelner Knoten und Blätter im Raum dabei eindeutig bestimmt. Schnitte im Baum erzeugen *Unterbäume*, wobei ein herausgeschnittener Knoten zur Wurzel wird [73]. Wird der Grössenunterschied benachbarter Elemente im geometrischen Sinne kleiner oder gleich einer gegebenen Schranke gewählt (üblicherweise Faktor 2), spricht man auch von *geglätteten Bäumen* [38].

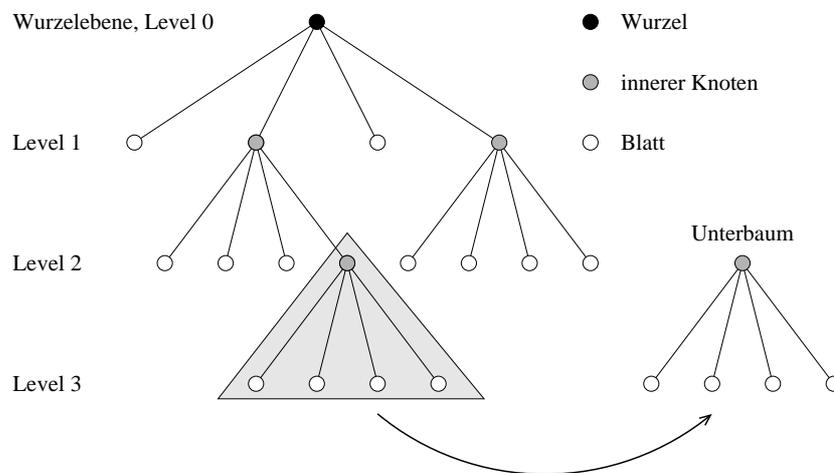


Abbildung 3.6: Organisationsschema von Baumdatenstrukturen nach [38]

Im Sinne von Abschnitt 3.1.1 handelt es sich bei der Oktalbaumstruktur um einen *schlichten Graphen* mit azyklischer Adjazenzrelation $R_{vv} \subseteq V \times V$, wobei V die Menge aller Knoten und Blätter bezeichnet.

$$R_{vv} := \{(v_i, v_j) \in V \times V \mid level(v_j) = level(v_i) + 1\} \quad (3.23)$$

Das Oktalbaumschema wird bei der Diskretisierung des Strömungsgebietes, die in Abschnitt 3.5.4 besprochen wird, eine wichtige Rolle spielen, indem es zur Generierung einer uniformen Voxelmatrix eingesetzt werden wird. Bei der Implementierung einer Oktalbaumstruktur stellt nach [31] für den allgemeinen Fall die nun effizient zu realisierende Operation den Test dar, ob ein Würfel jeweils innerhalb oder ausserhalb eines Körpers liegt, oder ob er dessen Rand schneidet. Für den (geometrischen) Diskretisierungsprozess ist es aber ausreichend, nur die Körperoberfläche zu approximieren. Ausgehend von einem in der Oberflächendarstellung (*B-rep* Modell, vgl. Abschnitt 3.1.2.2) vorliegenden Volumenkörper kann die algorithmische Komplexität der Schnittmengenoperationen dabei reduziert werden, da der Volumen/Volumen-Test anschaulich durch einen Fläche/Volumen- und einen Fläche/Fläche-Test ersetzt werden kann. Wird anstelle der allgemeinen Oberflächendarstellung ein *Facettenmodell* eingesetzt, reduziert sich der Aufwand weiter, wie in [106] gezeigt wurde.

Zur Speicherung kann die Oktaalbaumstruktur unter Verwendung der *Tiefen-* oder *Breiten-suchtechnik* linearisiert werden. Organisationsprinzipien von Baumdatenstrukturen wurden beispielsweise von FRANK in [73] untersucht.

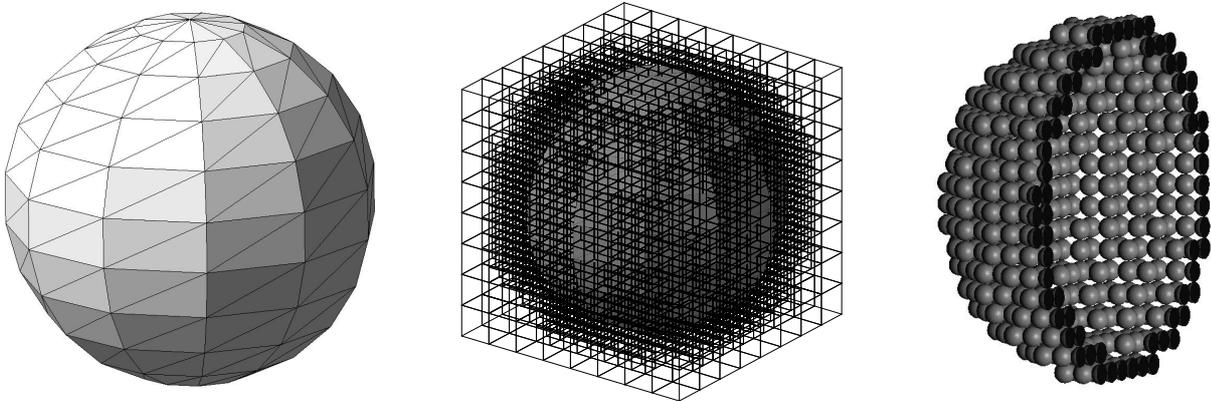


Abbildung 3.7: Beispiel: Approximierung einer Kugeloberfläche mit Hilfe des Oktaalbaumschemas. Ausgangspunkt stellt ein Facettenmodell der Oberfläche dar (links). Zur Diskretisierung wurde ein Baum der Tiefe 4 verwendet (Mitte). Im rechten Bild ist das resultierende Voxelmodell im aufgeschnittenen Zustand dargestellt.

Constructive Solid Geometry (CSG). Beim *CSG-Schema* handelt es sich um ein operatives Volumenmodell, wobei ein Körper als Ergebnis sukzessiver boolescher Mengenoperationen (Durchschnitt, Vereinigung, Differenz) über gegebenen geometrischen Primitiven dargestellt wird. Die geometrischen Primitive können dabei komplexere Gestalt annehmen, indem diese auch als *Makros* parametrisierbar sein können. Die Entstehungsgeschichte eines Körpers (die 'Wurzel') ist Bestandteil der Datenstruktur, die als Binärbaum, mit Primitiven in den Blättern und Operatoren als inneren Knoten, implementiert werden kann. Üblicherweise wird das Schema zur Auswertung in ein Oberflächenmodell überführt, wobei die Evaluierung des Modells rechenintensiv sein kann. Insbesondere die booleschen Operationen werden im Zusammenhang mit der in Abschnitt 3.4.3 beschriebenen Zerlegung eines Bauwerksmodells Anwendung finden.



Abbildung 3.8: *CSG-Schema*: Konstruktion eines Objektes aus geometrischen Primitiven

Verschiebegeometrie- und Interpolationsschema. Mit Hilfe des *Verschiebegeometrie-schemas*, dem sogenannten *Sweeping-Modell*, kann ein Volumenkörper definiert werden, indem ein gegebenes zweidimensionales Objekt längs einer Verschiebekurve bewegt wird. Der überstrichene Raum entspricht einem Volumenkörper, der auch oft als $2\frac{1}{2}D$ -Körper bezeichnet wird. Je nach Bildungsgesetz unterscheidet man zwischen *Translations-* und *Rotationskörpern*. Stellen jedoch *zwei* Flächen den Ausgangspunkt dar, aus denen ein resultierender Körper gebildet

werden soll, spricht man von einem *Interpolationsschema* (auch: *Lofting-Verfahren*). Die Menge der Punkte, die auf einer Linie oder allgemeinen Kurve zwischen zwei beliebigen Punkten beider Flächen liegen, bilden dabei den Volumenkörper [31]. Beide Verfahren werden u.a. in Abschnitt 3.4.3 bei der Bildung des sogenannten Verbindungsmodells eine Rolle spielen.

3.1.2.2 Indirekte Darstellungsschemata

Wird ein Volumen nicht direkt, sondern durch seine Kanten oder Oberfläche modelliert, spricht man von *indirekter Darstellung*. Man unterscheidet zwischen *Drahtmodellschema* (*wireframe model*) und *Oberflächenmodell*.

Drahtmodellschema. Der Nachteil eines Darstellungsschemas, das Körper nur über (gekrümmte) Kanten beschreibt, ist die sich zwangsläufig ergebende Mehrdeutigkeit modellierter Körper und die Möglichkeit, auch 'nicht sinnvolle' Körper zu entwerfen. Abbildung 3.9 demonstriert dies anhand eines Beispiels. Weiterhin können verdeckte Linien nicht eliminiert werden und es ist nicht möglich, Schnittlinien bzw. -flächen zu berechnen. Das Schema ist aus diesen Gründen zur Volumenmodellierung ungeeignet. Viele CAD Systeme bieten aber Drahtmodellschemata an, da diese einerseits die Grundlage zur Oberflächenmodellierung darstellen, andererseits beispielsweise für die Darstellung von Schnitten zwischen Volumenkörpern usw. benötigt werden.

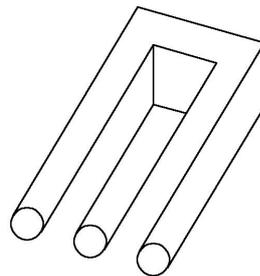


Abbildung 3.9: Beispiel eines 'Nonsense'-Drahtobjektes

Oberflächendarstellung. Hierbei wird die Oberfläche eines Körpers in eine endliche Menge durch Kanten begrenzter ebener oder gekrümmter Teilflächen zerlegt und der Körper somit *indirekt* durch seine Berandung repräsentiert. Wie eingangs erwähnt, enthält die Oberflächendarstellung *geometrische* und *topologische* Informationen.

Die mathematische Kurven- und Flächenbeschreibung kann als geometrische Attributierung verstanden werden und analytisch oder parametrisch erfolgen. Durch die Verwendung von Freiformkurven und -flächen wird eine hohe Genauigkeit bei der geometrischen Beschreibung gekrümmter Kurven bzw. Flächen erreicht. Auch wenn zunächst die mathematische Definition der geometrischen Formen von zentraler Bedeutung zu sein scheint, werden weiterhin topologische Informationen benötigt, um den Zusammenhang von und die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen Punkten, Kanten und Flächen zu definieren, womit sich insgesamt ein mehrschichtiges und hierarchisches Vorgehen ergibt. Die Verteilung der Informationsdichte zwischen Topologie und Geometrie variiert dabei je nach Anwendungsfall: Während beispielsweise im Karosseriebau aufwändige Flächenbeschreibungen benötigt werden, siehe z.B. in [130],

so überwiegt im Bauwesen die Bedeutung von Relationen zwischen einer grossen Anzahl von Bauteilen mit meist einfacher(er) Geometrie [21].

Sollen nun starre Körper im Sinne oben genannter Definition modelliert werden, muss die Oberflächendarstellung folgende drei *hinreichenden Gültigkeitsbedingungen* erfüllen, um zu gewährleisten, dass diese Körper 'echte' dreidimensionale Volumenkörper darstellen, die den Raum in zwei disjunkte Gebiete unterteilen, von denen eines, nämlich das Innere, endlich ist:

- Die Oberfläche eines Körpers muss *geschlossen* sein, d.h. sie darf keine Unterbrechungen in Kanten oder Löcher in Teilflächen (ausgenommen Durchdringungen wie z.B. beim Torus) aufweisen. In Abschnitt 3.4, dem Schwerpunkt dieses Kapitels, wird ein Verfahren vorgestellt, wie mit Hilfe einer graphentheoretischen Analyse die Geschlossenheit eines Oberflächenmodells untersucht werden kann.
- Jede Teiloberfläche muss *orientierbar* sein, d.h. zwei wohlunterscheidbare Seiten besitzen. Die Frage der Orientierbarkeit kann in der Datenstruktur nach MÄNTYLÄ durch Einführen von *Halbkanten* gelöst werden [125]. Unter der Konvention nach aussen zeigender Flächennormalen werden Halbkanten im mathematisch positiven Sinn entlang des Flächenrandes angeordnet. Stossen zwei Flächen gleicher Orientierung aneinander, so sind nach MÖBIUS ihre Halbkanten stets entgegengesetzt orientiert. Abbildung 3.10 demonstriert dies anschaulich. Beispiel einer nicht orientierbaren Fläche ist das Möbiusband [31].

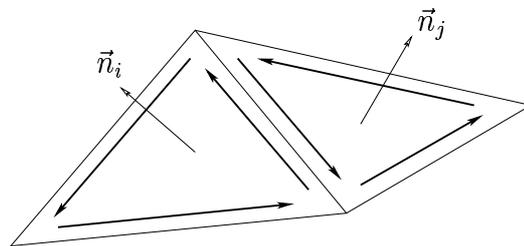


Abbildung 3.10: Gesetz von MÖBIUS nach [31]

- Keine Existenz von Punkten, in denen sich die Oberfläche selbst schneidet, d.h. Teilflächen dürfen sich nur an den Rändern schneiden.²

3.1.2.3 Datenstrukturen

Vorteil der *Boundary-Representation-Struktur (B-rep)* ist, dass die Elemente explizit gegeben sind, womit ein direkter Zugriff auf die Datenelemente, anders als beim CSG-Schema, gegeben ist. Die mitunter komplizierte Datenstruktur wird in Analogie zur topologischen Struktur der Geometrie gewählt und kann mit Hilfe von *vef-Graphen*³ dargestellt werden. Die Modellierung von *non-manifold* Körpern, wie beispielsweise hohler oder nicht zusammenhängender Objekte, ist dabei grundsätzlich möglich.

²Diese Bedingung ist beispielsweise bei der Kleinschen Flasche, siehe z.B. in [31], verletzt.

³vertex, edge, face

Ein *vef-Graph* G_{vef} beschreibt die topologische Struktur eines geometrischen Modells, indem er allgemein die Menge der Knoten V (*vertices*), Kanten E (*edges*) und Flächenstücke F (*faces*) über Adjazenzrelationen R miteinander in Beziehung setzt. Knoten im Graphen entsprechen Elementen aus den Mengen V , E oder F .

$$G_{vef} = (V, E, F; R) \quad (3.24)$$

Für die Bildung von Relationen gibt es eine Vielzahl von Möglichkeiten, wenn man die aus den Mengen $\{V, E, F\}$ bildbaren kartesischen Produkte betrachtet. Eine graphische Übersicht ist beispielsweise in [31] zu finden. Bei der Auswahl zu speichernder Relationen ist nun ein Kompromiss zwischen *Speicherplatzbedarf* und *Zugriffsgeschwindigkeit* zu suchen. Mit anderen Worten, es ist zu entscheiden, welche Relationen benötigt werden, um einen Körper gerade eindeutig zu beschreiben, und welche Relationen zweckmässigerweise mindestens vorgehalten werden sollten, um die Realisierung effizienter Algorithmen zu ermöglichen.

Bestimmte Relationen lassen sich durch andere ausdrücken. Aufgrund unterschiedlicher Mächtigkeiten erweist es sich dabei als vorteilhaft, zusammengesetzte Relationen über die Menge der Kanten E zu verknüpfen [124]. Beispielsweise ist es ausreichend, die Relationen $R_{ev} := \{(e_i, v_i) \in E \times V\}$ und $R_{ef} := \{(e_i, f_i) \in E \times F\}$ zu speichern, um daraus alle anderen Relationen berechnen zu können. Bezogen auf die Anzahl der Kanten n_e beträgt die Speicherkomplexität gerade $4n_e$. Um aber die an einem Knoten v_i angrenzenden Flächen f_i bestimmen zu können, sind $\mathcal{O}(n_e)$ Speicherzugriffe nötig: Zur Berechnung der Relation $R_{vf} = R_{ve} \times R_{ef}$ wird zunächst die Relation R_{ve} benötigt, die durch Untersuchung aller Paare (e_i, v_i) ermittelt werden muss. Speichert man hingegen zusätzlich R_{ve} und R_{fe} , womit die Speicherkomplexität auf $8n_e$ wächst, hängt die Berechnung von R_{vf} nun *linear* von lokalen Grössen ab [31].

Um einen Mittelweg zwischen den angesprochenen Extremen Speicherkomplexität und Zugriffszeit bei gleichzeitig maximaler *Redundanzfreiheit* auszuwählen, wurden in der Vergangenheit eine Reihe unterschiedlicher Datenstrukturen vorgeschlagen. Da die Auswahl einer geeigneten Datenstruktur entscheidend für das Gelingen der in Abschnitt 3.4.4 dargestellten Algorithmik ist, werden die wichtigsten Strukturen im Folgenden dargestellt:

- **Half-Edge-Modell.** Beim einfachen *Halbkanten-Modell* von [125] wird eine Kante dem Namen entsprechend in zwei Halbkanten unterteilt, vgl. Abb. 3.11. Jede Halbkante wird einem Flächenstück zugeordnet, somit sind pro Kante nur zwei benachbarte Flächenstücke zugelassen. Dem in Abbildung 3.10 motivierten Gesetz von MÖBIUS folgend, sind die Richtungen der Halbkanten entgegengesetzt orientiert. Es können nur Objekte modelliert werden, die stets die manifold Bedingung erfüllen.
- **Winged-Edge-Modell.** Zusätzlich zu den oben genannten Relationen R_{ev} und R_{ef} wird bei der *Winged-Edge-Datenstruktur* die Relation $R_{ee'} \subset R_{ee}$, die benachbarte und jeweils die gleiche Fläche berührende Kanten miteinander in Beziehung setzt, gespeichert. Dazu kommt noch eine Knoten- und eine Flächenliste mit jeweils (nur) einem Verweis auf eine Kante. Die Speicherkomplexität beträgt nach BUNGARTZ [31] nun $8n_e + n_v + n_f$, und die zur Bestimmung nicht gespeicherter Relationen benötigte Rechenzeit ist nur von lokalen Grössen abhängig.

- **Half-Winged-Edge-Modell.** Im Unterschied zur *Winged-Edge*-Datenstruktur wird bei der *Half-Winged-Edge*-Struktur nach [13] die Relation $R_{ee'}$ durch $R_{ee''}$ ersetzt. Da in der Relation $R_{ee'}$ pro Kante auf vier Nachbarkanten verwiesen wird, von denen jeweils zwei dieselbe Fläche begrenzen, wird in $R_{ee''}$ nur jeweils diejenige Nachbarkante gespeichert, die auf die betrachtete Kante, bezogen auf die jeweilige Fläche, im Uhrzeigersinn folgt. Die Speicherkomplexität lässt sich damit um $2n_e$ reduzieren [31].
- **Radial-Edge-Modell.** Bei dem von WEILER [202, 203] vorgeschlagenen Modell wird die Halbkante durch eine *Radialkante* ersetzt, an der beliebig viele Flächenstücke anliegen können, womit auch eine Teilmenge der non-manifold Körper beschrieben werden kann. Teilmenge deshalb, da durch den Ansatz nicht das Problem isolierter Flächenstücke bzw. Körper gelöst wird [21]. Benachbarte Kanten werden in einer lokalen zyklischen Ordnungsstruktur verwaltet, womit ein *geometrisches* Kriterium zur Bewertung der topologischen Nachbarschaftsverhältnisse hinzukommt.
- **HalbFKanten-Struktur.** Um die Objektmengen der manifold und non-manifold Körper gemeinsam abbilden zu können, wird von BORKNER in [21] eine erweiterte *B-rep*-Struktur vorgeschlagen. Zur Identifikation komplexer Strukturen wird ein topologischer Relationentyp eingeführt, wobei nicht mehr der Nachbarschaft von Primitiven zueinander, sondern deren *Genealogie* (Erzeuger-Verwender-Prinzip) Bedeutung beigemessen wird. Ein (topologisches) Strukturelement 'Seed' ermöglicht eine 'Erreichbarkeit auf Knotenmengen', indem dieses als 'Berandung' eines Knotens verstanden wird, d.h. keine geometrische Information trägt. Das geometrisch abstrakte Strukturelement der *HalbFKante* löst die Radialkante ab und ermöglicht die Darstellung von Hohlräumen in Körpern. Eigenschaften wie die enorme Speicherkomplexität wirken sich dabei negativ auf die Verwendbarkeit des Modells in der Praxis aus.

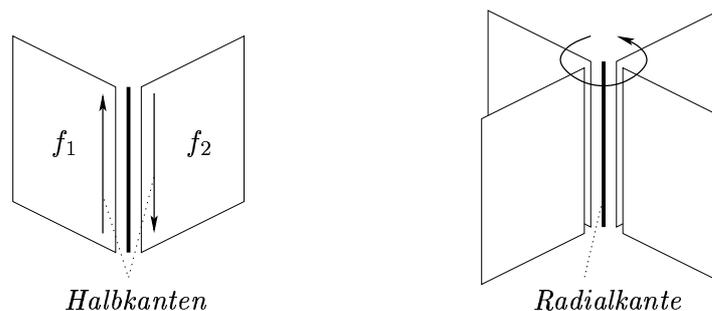


Abbildung 3.11: **Links:** Halbkanten-Modell, **rechts:** Radialkanten-Modell

Als Forderung an eine Datenstruktur ergibt sich nun, dass die Anwendung von Operatoren auf ein Modell nicht aus der Objektmenge der darstellbaren Körper hinaus führt, sondern diese auch weiterhin darstellbar bleiben [21]. Es erweist sich als notwendig, dass eine Datenstruktur nicht nur *manifold*, sondern auch *non-manifold* Körper beschreiben kann. Einige der genannten Datenstrukturen werden in einer Reihe von CAD-Systemen erfolgreich eingesetzt. Bei den in der Praxis eingesetzten Modellen werden dabei viele der Schwachstellen der oben genannten Modelle behoben, indem die Strukturen in geeigneter Weise miteinander *kombiniert*

werden. Abschnitt 3.1.2.5 zeigt ein Beispiel einer Implementierung, indem der in dieser Arbeit eingesetzte Geometriemodellierkern *ACIS* vorgestellt wird. Für einen vertiefenden Überblick über Datenstrukturen sei auf [13, 21, 31, 125, 202] verwiesen.

3.1.2.4 Topologische Invarianten: Die Eulersche Charakteristik

Nach [83] versteht man unter einer *topologischen Invariante* eine ganze Zahl, die sich bei Homöomorphismen nicht ändert. Auf topologische Räume übertragen bedeutet dies, dass diese nicht homöomorph sein können, wenn für sie eine topologische Invariante unterschiedliche Werte annimmt. Die *Eulersche Charakteristik* $\chi(M)$ nach Gl. (3.25) ist eine topologische Invariante für eine als Zellkomplex dargestellte n -dimensionale Mannigfaltigkeit M . Sie hängt nicht von der Art der Zellzerlegung von M ab. Ein *Zellkomplex* bezeichnet dabei eine Menge aus α_q paarweise disjunkten ' q -Zellen'. Beispielsweise ist ein reguläres Polyeder eine 3-Zelle bestehend aus 0-Zellen (Punkten), 1-Zellen (Kanten) und 2-Zellen (Flächen).

$$\chi(M) := \sum_{q=0}^n (-1)^q \alpha_q \quad (3.25)$$

Ein Vergleich mit der *Formel von Euler (1752)*, $n_v - n_e + n_f = 2$, die für den Fall regulärer konvexer Polyeder gilt und die auf dem Rand vorkommende Anzahl der Knoten, Kanten und Flächen betrachtet, liefert:

$$\chi(P_{regular}) = 2 \quad (3.26)$$

Der Ausdruck wurde von dem zu Beginn des Kapitels erwähnten französischen Mathematiker 1893 erweitert und wird als *Euler-Poincaré-Formel* bezeichnet. Hierbei ist n_s die Anzahl der Zusammenhangskomponenten der Oberfläche, n_h die Anzahl der Löcher durch den Körper und n_r die Anzahl der Löcher in den einzelnen Flächen [27]:

$$n_v - n_e + n_f = 2(n_s - n_h) + n_r \quad (3.27)$$

Formel (3.27) kann somit als *notwendiges* Kriterium zur Beschreibung gültiger konvexer Polyeder (mit Durchdringungen) mit Hilfe einer *vef*-Graphenstruktur verstanden werden.

Weiterhin können sogenannte *Aufbauoperatoren* definiert werden, die den direkten Zugriff auf eine *vef*-Struktur verwehren. Kann ein Benutzer ein Modell nur noch über diese Operatoren manipulieren, wird erreicht, dass das Ergebnis seiner Operationen stets Gl. (3.27) erfüllt. Diese *Euler-Operatoren* können als Vektoren der *Euler-Ebene*, einer 5-dimensionalen Hyperebene, die vom 6-dimensionalen Gitterraum der Variablen aus Gl. (3.27) $\in \mathbb{N}^6$ aufgespannt wird, interpretiert werden. Gültige Darstellungen von Körpern können als Punkte in der Ebene dargestellt werden. Das Vorgehen ist beispielsweise in [31] ausführlich beschrieben. Nachteilig ist dabei, dass auch nicht sinnvolle Objekte als Zwischenergebnis erhalten werden können. Euler-Operatoren haben sich in der Praxis als nicht brauchbar erwiesen.

Zusammenfassend ist das als notwendig zur Beschreibung konvexer Polyeder formulierte Kriterium *nicht hinreichend* für den allgemeinen Fall. Mit anderen Worten heisst das, dass die Kenntnis topologischer Informationen alleine nicht zur vollständigen Beschreibung von

Körpern ausreicht, sondern dass auch geometrische Daten benötigt werden [31]. Die manifold Bedingung ist somit eine notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung. In Abschnitt 3.4 wird ein Lösungsansatz für dieses Problem gegeben.

3.1.2.5 Beispiel eines Geometriemodellierers: ACIS

In Abschnitt 3.1.2.3 wurden die wichtigsten Merkmale von Datenstrukturen im Zusammenhang mit der topologischen Modellierung geometrischer Modelle vorgestellt und dabei festgestellt, dass eine Kombination mancher Eigenschaften sinnvoll ist. Die Datenstruktur des Geometriemodelliererkerns *ACIS* ermöglicht die Darstellung von manifold und non-manifold Körpern und kombiniert das Halbkanten- mit dem Radial-Edge-Modell.

Bei *ACIS*⁴ handelt es sich nun um einen objektorientierten, in der Sprache C++ implementierten, *hybriden B-rep*-Modellierer mit umfassender 3D Modellierungsfunktionalität, der die Grundlage zahlreicher kommerzieller CAD/CAM/CAE-Systeme darstellt [27]. Er bietet neben komfortabel nutzbaren API-Funktionen⁵ die Möglichkeit, direkt auf *ACIS*-Klassen und Methoden zuzugreifen bzw. von diesen zur Entwicklung eigener Applikationen abzuleiten (*Direct Object Interface*). *Hybrid* bedeutet dabei, dass auch direkte Darstellungsschemata wie das CSG-Modell unterstützt werden, d.h. aus Volumenmodellen Flächen- und Drahtmodelle ableitbar sind. Weiterhin sind auch für die Visualisierung umfangreiche Funktionalitäten vorhanden, indem ein sogenannter *Facetter* die Tesselation von Objekten in zu rendernden Szenen zur Laufzeit gestattet. Somit kann mit *ACIS* unter 'überschaubarem Aufwand' eine graphisch-interaktive Modellierungsumgebung erstellt werden, wenn geeignete, beispielsweise auf *Open-GL* [137] basierende, Visualisierungsbibliotheken verwendet werden, wie in Kapitel 1.4 bereits angesprochen wurde.

Eines der Hauptmerkmale der Klassenhierarchie von *ACIS* ist die Unterteilung in *Geometrie-* und *Topologieklassen*. Weiterhin kennt man *mathematische Klassen* zur Definition der Lage von Körpern im Raum bzw. zur Durchführung von Transformationen und Klassen zur Verwaltung von *Körperattributen* [36, 37]. Basisklasse aller geometrisch/topologischen Beschreibungen ist die Klasse *ENTITY*.

Bei den *Geometrieklassen* unterscheidet man zwischen *abstrakter* und *konstruktiver Geometrie*. Die abstrakten Geometrieklassen, wie *APOINT*, *CURVE*, *SURFACE*, *PCURVE*, besitzen virtuelle Funktionen für geometrische Grundfunktionalität (Transformation, Skalierung, etc.), womit alle davon abgeleiteten Geometrieklassen, wie beispielsweise *VERTEX*, *STRAIGHT*, *PLANE*, diese Funktionalitäten implementieren müssen. Die konstruktiven Klassen, wie *comp-curve*, *cone*, *straight*, *ellipse*, *plane*, *sphere*, enthalten dabei die eigentliche mathematische (analytische und/oder parametrische) Kurven- bzw. Flächenbeschreibung.

Um den qualitativen Zusammenhang zwischen geometrischen Primitiven beschreiben zu können, stehen die *Topologieklassen* zur Verfügung, deren hierarchischer Aufbau Abbildung 3.12 entnommen werden kann. Die höchste Stufe stellt ein *BODY* dar, der mehrere disjunkte Objekte, sogenannte *LUMPS*, vereinigt. Ein *LUMP* ist eine *zusammenhängende* Region im Raum, die aus ein-, zwei- oder dreidimensionalen Entities oder einer Kombination daraus besteht. Die Organisation in *BODIES* und *LUMPS* ermöglicht es, auch nicht-reguläre Körper zu beschreiben.

⁴*ACIS* ist nach seinen Autoren *Alan Grayer*, *Charles Lang* und *Ian Brad* benannt und wird von der Firma *Spatial Technology* mit Sitz in Boulder, Colorado, USA, vermarktet [2].

⁵*API = Application Programming Interface*

Die nächste Stufe darunter wird von den *SHELLS* und *SUBSHELLS* gebildet, die eine Menge über ihre Randkanten bzw. -punkte zusammenhängender *FACES* aggregieren. *SUBSHELLS* werden dabei nur für interne Zwecke genutzt. Ein *WIRE* stellt eine Menge zusammenhängender *EDGES* dar, die keiner Fläche zugeordnet werden können bzw. für die Darstellung von Drahtmodellen genutzt werden.

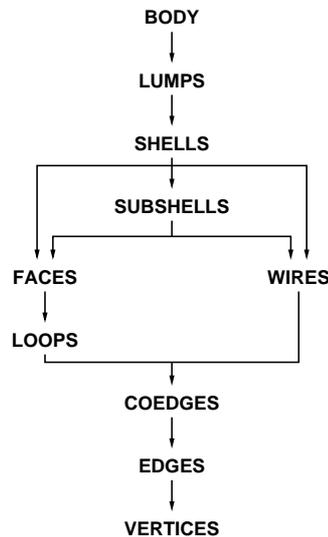


Abbildung 3.12: Hierarchische Einteilung der Topologieklassen in ACIS nach [37]

Ein Objekt mit direktem Bezug zur Geometrie ist das *FACE*, indem es einen Verweis auf ein geometrisches Flächenobjekt trägt. Es kann als zweidimensionales Analogon zum *BODY* interpretiert werden. Ein *FACE* aggregiert einen oder mehrere *LOOPS* und kennt eine *Orientierung*, die der zugrundeliegenden Oberflächenbeschreibung entsprechen kann oder nicht. Stellt ein *FACE* eine (auch teilweise) Begrenzung eines Volumens dar, ist es *einseitig*, sonst *zweiseitig*. Mit Hilfe von *LOOPS* wird die polygonale Berandung einer Teilfläche durch eine Menge von *COEDGES* definiert, die offen oder geschlossen sein kann. *COEDGES* werden im mathematisch positiven Sinn um einen nach aussen zeigenden Normalenvektor der zugrundeliegenden *FACE* orientiert bzw. umgekehrt, wenn es sich bei einem *LOOP* um ein Loch in einer Fläche handelt. Die Konzepte der *Radial-Edge*- und der *Halbkanten*-Strukturen werden umgesetzt, indem *COEDGES* auf ihre zugrundeliegende *EDGE* verweisen und *EDGES* wiederum eine zyklische Liste von *COEDGES* als sogenannte *Partner-Coedges* speichern. *EDGES* können somit prinzipiell redundanzfrei vorgehalten werden. Die Reihenfolge der Partner-Coedge-Liste wird dabei entsprechend Abb. 3.11 gewählt, wobei die Reihenfolge der geometrischen Anordnung der Flächenstücke an der gemeinsamen Kante als Ordnungskriterium dient. In Abschnitt 3.4.4 wird ein ähnliches Vorgehen anhand einer eigenen Implementation ausführlich erläutert. Ein Verweis auf die geometrische Kurvenbeschreibung wird in einer *EDGE* gespeichert, die durch keinen, einen oder mehrere *VERTICES* begrenzt wird. Wie bei der Fläche kann die Orientierung in oder entgegengesetzt der zugrundeliegenden Kurvengeometrie sein. Der *VERTEX*, als unterstes Element in der Hierarchie, besitzt eine Referenz auf einen kartesischen Punkt im Raum [2, 27, 37, 187, 188].

In Zusammenhang mit dem *Radial-Edge*-Schema und der Strukturierung in *BODIES* und *LUMPS* ist es damit anschaulich möglich, auch non-manifold Körper zu modellieren. Es sei darauf hingewiesen, dass zwar grundsätzlich ein *redundanzfreies* Modell erstellt bzw. verwaltet werden kann, dies in der Regel in *ACIS* aber durch den Benutzer bzw. Programmierer *explizit* sichergestellt werden muss. Aus diesem Grund wird es später nötig sein, ein *ACIS*-Modell 'zu kollabieren', wie in Abschnitt 3.4.4 besprochen wird. Auf welche Art und Weise der Geometriemodellierkern *ACIS* in das Softwarekonzept dieser Arbeit eingebunden wird, wurde in Kapitel 1.4 bereits angesprochen. Gründe für die Auswahl von *ACIS* als Basis des rechnerinternen geometrischen Modells werden in Abschnitt 3.3 erörtert.

3.2 Produktmodellierung im Bauwesen

3.2.1 Begriffsdefinition

Im vorherigen Abschnitt wurde im Zusammenhang mit CA(G)D-Systemen zwischen einem zeichnungs- und modellorientierten Ansatz unterschieden. Beim Übergang zum modellorientierten Ansatz wird nun die Funktion des Computers als 'elektronische Zeichenmaschine' abgelöst, indem das *Metamodell*, d.h. das im Rechner darstellbare Modell des Modells einer realen Szene, durch intelligente(re) Objekte erweitert wird [111]. Ein Bauteil, beispielsweise eine Wand, wird somit nicht mehr als Ansammlung von Punkten, Linien und Flächen verstanden, sondern als ein mit Semantik ausgestattetes Objekt, das von sich 'weiss', was es ist, welche Eigenschaften es besitzt und wie es mit weiteren Objekten zu interagieren hat. Beispielsweise können bei Änderungen von Fenstern bzw. Türen, die einer Wand zugeordnet sind, die Rohbauöffnungen automatisch angepasst werden oder Anschlüsse und Verbindungen zwischen einzelnen Wänden entsprechend modifiziert werden.

Weiterhin ist es erstrebenswert, die unterschiedlichen Sichtweisen der am Planungsprozess Beteiligten, aus denen sich unterschiedliche Modelle zur Planung ableiten, in einem übergeordneten Bauwerksmodell zusammenzuführen. Ein sogenanntes *Produktdatenmodell* ermöglicht den (idealerweise durchgängigen) Austausch von Modelldaten und fördert somit die Zusammenarbeit zwischen den einzelnen Disziplinen, indem Redundanz in der Datenhaltung, die häufig zu Mehraufwand, Fehlern (erneute modellspezifische Dateneingabe) und Inkonsistenzen führt, vermieden werden kann. Gerade im Bauwesen sieht man sich mit einer Vielzahl technischer Spezialbereiche und Produktionsabläufe konfrontiert. So arbeiten üblicherweise Architekten, Bauingenieure im weitesten Sinne (d.h. nicht nur Statiker), Haustechniker, Elektroingenieure, Bauherren und Objektverwaltungen zusammen [98]. Ein Produktdatenmodell erlaubt es nun, die Anzahl der zur Kommunikation zwischen den individuellen Softwaresystemen nötigen $m \cdot n$ Schnittstellen auf (idealerweise) $m + n$ Interfaces, die dann ein übergeordnetes Datenmodell bedienen, zu reduzieren [153].

Ein *Produktmodell* enthält definitionsgemäss alle Daten zur Planung und Herstellung eines Gebäudes, alle Informationen, die während des Entstehungsprozesses und weiteren Lebenslaufes des Gebäudes, d.h. innerhalb der Nutzungsphase incl. Instandhaltung und Instandsetzung, anfallen, bis hin zur Entsorgung. Das Datenschema eines solchen Modells wird als *Produktdatenmodell* bezeichnet; durch Instantiierung erhält man ein spezifisches *Produktmodell*.

Produktmodelle sind üblicherweise hierarchisch in Schichten strukturiert, wobei das Datenmodell in *Partialmodelle* mit wohldefinierten Schnittstellen unterteilt wird. Bekannte Vertreter von Produktdatenmodellen sind der hauptsächlich in Maschinenwesen und Automobilindustrie vertretene Standard *STEP (Standard for the Exchange of Product Model Data)* [103, 104, 105] und die sich im Bereich des Bauwesens zu etablieren beginnenden *Industry Foundation Classes*, kurz *IFC*, der *International Alliance for Interoperability (IAI)* [100].

3.2.2 STEP – ISO 10303

STEP ist ein umfangreiches Normenwerk, das seit 1994 als ISO 10303 von der *International Organization for Standardization* im Technischen Komitee 184 (Industrial Automation Systems and Integration) dokumentiert wird. Ziel der Entwicklung ist die Abbildung aller Phasen im Lebenszyklus eines Produktes in einer von Rechnern darstellbaren Form, um die zahlreichen im Produktentwicklungsprozess verwendeten Modelle zu einer implementierungsneutralen Produktbeschreibung zusammenzufassen [6]. Die Norm ist in eine Reihe von eigenständigen Teilspezifikationen gegliedert und enthält neben einer Definition von Methoden zur Produktmodellierung auch Werkzeuge zu ihrer Anwendung. Um die Daten konsistent, zentral und redundanzfrei verfügbar zu machen, ist die Idee von STEP, zusätzlich das Datenschema selbst, d.h. den Aufbau des Datenmodells, mit auszutauschen [111].

STEP setzt sich aus *Beschreibungs- und Implementierungsmethoden, Methoden zur Konformitätsprüfung, Informationsmodellen* zur Beschreibung der Produktdatenmodelle und sogenannten *Anwendungsprotokollen* zusammen. Die in den Beschreibungsmethoden enthaltene Beschreibungssprache *EXPRESS* entstand dabei in Anlehnung an die Programmiersprache PASCAL, besitzt einen objektorientierten Ansatz und dient als Spezifikationsprache zur Modellierung von Datenstrukturen. Die in den Informationsmodellen definierten Basismodelle und ihre anwendungsspezifischen Erweiterungen werden in den Anwendungsprotokollen (AP) zu branchenspezifischen Produktdatenmodellen zusammengefügt. Beispielsweise ist hier das AP 225 (Building Elements Using Explicit Shape Representation) zu nennen. Für einen detaillierteren Überblick sei auf ANDERL [5, 6] verwiesen.

3.2.3 Die Industry Foundation Classes (IFC) – ISO/PAS 16739

Der Schwerpunkt von STEP liegt auf dem Austausch geometriebeschreibender Daten im Maschinenwesen, womit STEP im Bauwesen wenig Beachtung findet.⁶ Mit dem Ziel der Produktivitätssteigerung im Planungsprozess im Bauwesen wurden deshalb von der IAI, einem zunächst losen Zusammenschluss führender Organisationen in den USA und seit 1995 einer öffentlichen Organisation, ein eigenständiges Produktdatenmodell, die *Industry Foundation Classes (IFC)* entwickelt. Nach [98] hat die IAI es sich zur Aufgabe gemacht, ein (plattformunabhängiges) Basismodell zur gemeinsamen Datennutzung im Bauwesen zu erstellen, welches den Datenaustausch und die gemeinsame Datennutzung in der Bauindustrie (engl. 'AEC', Architecture, Engineering and Construction) und im Facilities Management (FM) unterstützt.

⁶Beispielsweise kennt die Spezifikation von STEP nicht die im Bauwesen zur Definition geometrischer Objekte häufig verwendeten Extrusionsmodelle; die IAI wiederum verzichtet auf die Beschreibung der im Maschinenbau benötigten NURBS Freiformkurven.

Nationale Gruppen sind in sogenannten 'Chapters' organisiert, die an einer Reihe von Projekten zur Erweiterung des IFC Objektmodells arbeiten, wie z.B. in den Projekten BS-8 (HVAC extension), BS-7 (building performance monitoring) oder ST-7 (load definition and rating). Die IFC definieren ein integriertes, objektorientiertes und semantisches Modell aller Komponenten, Attribute, Eigenschaften und Beziehungen innerhalb des Produktes 'Gebäude' und sammeln alle Informationen bezüglich Entwurf und Entstehungsgeschichte, weiterhin Daten über den gesamten Lebenszyklus bis hin zum Rückbau [100]. Historisch gesehen wurden bei der Entwicklung die Erfahrungen aus den ESPRIT-Projekten IMPACT, ATLAS [9, 19] und COMBI [35, 165, 166] berücksichtigt [53]. Das IFC Produktdatenmodell wird mit Hilfe der Beschreibungssprache *EXPRESS* nach ISO 10303 Teil 11 (STEP) spezifiziert [104] und als Textdatei nach ISO 10303 Teil 21 veröffentlicht [105]. Um die komplexen Beziehungen zwischen Objekten besser darstellen zu können, bedient man sich einer graphische Variante, *EXPRESS-G*, die eine Teilmenge der *EXPRESS*-Konstrukte darstellen kann.

Die Architektur der IFC sieht einen hierarchischen, modularen Ansatz vor, der das Modell in vier Schichten (Layer) strukturiert, deren Detaillierungsgrad von unten nach oben zunimmt [101]:

- *Resource Layer*. Diese 'low-level' Schicht enthält Klassen, beispielsweise zur Beschreibung von Geometrien, die unabhängig von ihrem Anwendungsbereich sind und von anderen Klassen der höheren Level genutzt werden.
- *Core Layer*. In der zweiten Schicht wird das Kernel und dessen Erweiterungen, die 'Core Extensions' definiert. Sie beschreibt die grundlegende Struktur des IFC Objektmodells; ihre Konzepte werden in den folgenden Layern referenziert und weiter spezialisiert.
- *Interoperability Layer*. Dieser enthält Schemata, die Konzepte und Objekte definieren, die innerhalb von mindestens zwei AEC-Anwendungsbereichen gemeinsame Verwendung finden und somit Interoperabilität zwischen den Domänen gewährleisten.
- *Domain Layer*. In dieser Schicht findet die Spezialisierung für den konkreten Anwendungsbereich statt.

Beispielsweise werden alle geometrischen 'Entities', wie z.B. Wände, Stützen oder Platten, von der Klasse *IfcProduct* gesammelt. Diese Objekte teilen Eigenschaften wie ihre Position im Raum *IfcLocalPlacement* oder ihre Darstellungsart *IfcProductRepresentation*. Die Klasse *IfcProduct* kann bis zu einem dedizierten Level in Unterklassen unterteilt werden, die im *Resource Layer* angeordnet sind. Beispiele sind ein Richtungsvektor, *IfcDirection*, oder die Koordinaten eines kartesischen Punktes, *IfcCartesianPoint*.

Erste kommerzielle Implementierungen basier(t)en auf der im Herbst 1998 vorgestellten Release 1.5.1, deren Ziel zunächst der Austausch von Rohbaudaten war, wie sie üblicherweise im Detaillierungsgrad M 1:100 verfügbar sind. Die im Frühjahr 1999 vorgestellte Release 2.0 wurde hinsichtlich der Bereiche Haustechnik und baubetrieblicher Prozesse wie Facilities Management und Kosten-/Ablaufplanung erweitert. Version 2.0 wurde im Oktober 2000 durch die Release 2x ersetzt. Im Vergleich zur Version 1.5.1 wurde der Umfang der Spezifikationen umfassend erweitert, indem eine Reihe neuer Anwendungsbereiche hinzukam (ausführlich

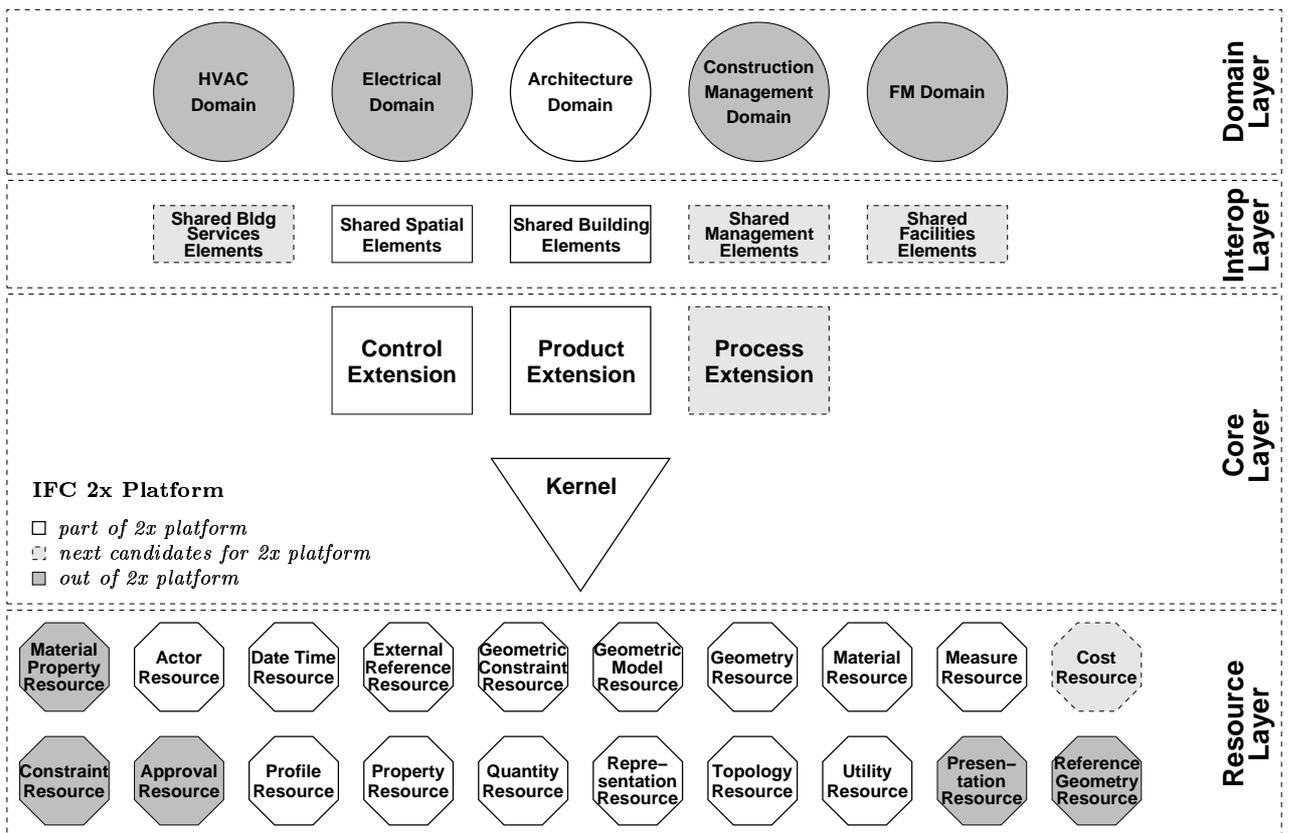


Abbildung 3.13: Strukturierung der IFC 2x Spezifikation nach [100]

beispielsweise in [101] beschrieben). Durch die Weiterentwicklung einiger der grundlegenden Konzepte, insbesondere am Core Layer, sind die Versionen 1.5.1 und 2x dabei grundsätzlich inkompatibel [100]. Der hierarchische Aufbau der IFC 2x Spezifikation kann Abbildung 3.13 entnommen werden, wobei Spezifikationen, die von der IAI als ausgereift angesehen werden, Teil der sogenannten *IFC 2x Plattform* sind und dadurch über einen grösseren Zeitraum hinweg unverändert bleiben sollen. Seit November 2002 ist die IFC 2x Plattform als ISO/PAS 16739 registriert [100]. Führende Softwarehersteller bieten gegenwärtig Schnittstellen zu einer Teilmenge des Schemas der IFC 2x Plattform, basierend auf sogenannten 'Views', an [3, 185], die es erlauben, einen Teil der Komplexität des Modells zu verstecken. Dabei stehen in der Regel geometriebeschreibende Objekte im Vordergrund, weitere Charakteristiken, wie Materialeigenschaften, werden meist (noch) nicht unterstützt. Beispielsweise bieten die Firmen Autodesk mit dem *Architectural Desktop (ADT)* oder *Revit*, Graphisoft mit *ArchiCAD* oder Nemetschek mit *Allplan* Schnittstellen zu ihren Produkten an, die für IFC 2x zertifiziert sind [185].

Für einen vertiefenden Einblick, insbesondere bezüglich Schemaerweiterungen (aktuell: Release 2x Edition 2) oder der IfcXML-Spezifikation, sei auf die Internetseite der IAI [100] und die Referenzen darin oder beispielsweise die Arbeit von NEUBERG [132] verwiesen.

3.3 Überführung von Produktmodelldaten in ein Volumenmodell

Für den Diskretisierungsprozess hinsichtlich Mehrzonen- und Strömungsmodell ist es erforderlich, die in einem Produktmodell enthaltenen geometrischen Daten in ein *B-rep* Volumenmodell zu überführen. In den folgenden Abschnitten wird zunächst besprochen, warum *ACIS* als geometrisches Kernsystem ausgewählt wurde, welche Schritte nötig sind, um auf die geometrischen Informationen aus dem IFC Modell zugreifen zu können, und welche Funktionalität im Prototypen implementiert wurde.

3.3.1 Auswahl von ACIS als geometrisches Kernsystem

Grundsätzlich bieten sich im Rahmen dieser Arbeit zwei Möglichkeiten an, um unter überschaubarem Aufwand eine Anbindung an das IFC Datenmodell zu realisieren: Einerseits durch die Verwendung eines bauspezifischen Programmsystems mit Modellierungsfunktionalität, das die IFC Release 2x unterstützt und über eine geeignete C++ Programmierschnittstelle verfügt, andererseits durch die Implementierung einer Schnittstelle zwischen einem geometrischen Kernsystem, wie z.B. *ACIS*, und einer sogenannten *Toolbox*.

Die Erfahrungen nutzend, die in dem DBU-Projekt '*Kopplung von thermischer Gebäudesimulation und Raumluftströmungssimulation mit CAAD-Programmen über den IFC-Standard zur energetischen Gebäudeoptimierung*' [43] gemacht wurden, wurde die ursprüngliche Idee, eine Anbindung an den ADT von Autodesk über die Programmierschnittstelle OMF⁷ zu realisieren, verworfen. In diesem Projekt wurden unter anderem im ADT Eigenschaftssätze (PropertySets) von Bauelementen erweitert, die für eine thermische Simulation relevant sind, und eine Materialdatenbank und die Möglichkeit einer Zonierung hinzugefügt. Beispielsweise ist es problematisch, dass Räume im ADT durch eine obere und untere Begrenzung und ihre lichte Raumhöhe definiert werden, Referenzen auf raumbegrenzende Objekte (und deren Öffnungen) dabei aber keine Berücksichtigung finden. Das der Anforderung einer Zonierung entsprechende IFC-Objekt *IfcZone* kann nicht erzeugt bzw. gespeichert werden, womit Objekte wie *IfcSpace* 'zweckentfremdet' werden müssten.

Das Produktmodell des ADT besitzt zwar Gemeinsamkeiten mit der IFC Spezifikation, entspricht dieser aber grundsätzlich nicht (Zielkonflikt zwischen Produktbindung und Interoperabilität bei der Entwicklung des ADT). In [43] wurde die Anbindung des ADT-Objektmodells an die IFC Spezifikation hinsichtlich der Aufgabenstellung als unzureichend bewertet, wobei diese insbesondere nicht durch Drittanbieter erweitert werden kann. Damit begäbe man sich bei diesem Weg in ein strenges Abhängigkeitsverhältnis zu einem sehr leistungsfähigen, aber (so gesehen) 'proprietären' Softwareprodukt.

Weiterhin werten bauspezifische CAD-Systeme das Wissen aus, wie IFC Objekte zueinander in Relation stehen, d.h. es herrscht eine Diskrepanz zwischen der IFC Repräsentation und den daraus generierten Objekten (z.B. beim Verschnitt von Wänden) zur weiteren Bearbeitung und Visualisierung im CAD System. Da in dieser Arbeit die geometrische und topologische Analyse

⁷ *Object Modeling Framework (OMF)*, eine mit *ObjectARX* realisierte Erweiterung von AutoCAD

eines Bauwerksmodells und nicht dessen Modellierung im Vordergrund steht, ferner durch die Verwendung von *ACIS* Synergieeffekte zu anderen Projekten am Lehrstuhl für Bauinformatik, vgl. z.B. [156, 160], auftraten, wurde das geometrische Kernsystem *ACIS* ausgewählt. Somit können auch allgemeinere Geometrien, die beispielsweise im Bereich der Strukturmechanik von Bedeutung sind, vgl. [26, 51, 130], behandelt werden, womit die Beschränkung auf ebene Flächen entfällt, die bei Verwendung des ADT in Verbindung mit dessen Geometrikern *AModeler* [10] entstünde.

In Abschnitt 1.4 wurde das Softwarekonzept zur Anbindung des Geometrikerns *ACIS* bereits vorgestellt. Beim Entwurf der Datenbankbindung wurde dabei darauf geachtet, dass die Vorteile des IFC-Objektmodells erhalten bleiben, indem die im Produktmodell definierten Eigenschaften und Attribute von Objekten weiterhin verfügbar sind.

3.3.2 Werkzeuge: Toolboxes

Um komfortabel mit den in einer physikalischen Datei abgelegten Instanzen eines IFC Produktdatenmodells arbeiten zu können und um den Aufwand des 'Parsens' dieser Daten zu verringern, stehen sogenannte *Toolboxen* als Werkzeug zur Verfügung. Diese *Toolboxen* bilden ein mit Hilfe von EXPRESS spezifiziertes IFC Schema auf eine C++ Klassenstruktur ab und stellen eine Programmierschnittstelle zum Zugriff auf und zur Verwaltung von IFC Instanzen zur Verfügung. Die Softwareschnittstellen werden entweder dynamisch aus dem EXPRESS Schema generiert oder stellen eine feste Implementierung dar (sogenannte frühe Bindung).

Die Implementationen *QualiSTEP* des französischen Forschungsinstitutes CSTB⁸ und *SCL* des NIST⁹ stellen freie Bibliotheken dar. *QualiSTEP* (<http://cic.cstb.fr/ilc/CSC>) bietet keine adäquate Unterstützung für IFC 2x, und die Weiterentwicklung der C++ Bibliothek *SCL* (<http://ats.nist.gov/scl>) wurde eingestellt. Als kommerziell erhältliche *Toolboxen* sind das Produkt *ECCO-Toolkit* der Karlsruher Firma PD Tec (<http://www.pdtec.de>) und die ehemals von Concad entwickelte *EUROSTEP Toolbox* (<http://www.eurostep.com>) zu nennen, die beide eine feste Bindung an eines der IFC Schemata 1.5.1 oder 2x darstellen. Weiterhin werden von der Firma Prostep (<http://www.prostep.com>) diverse Tools zur Entwicklung von auf STEP basierenden Anwendungen angeboten.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die *EUROSTEP Toolbox Classic* verwendet [61]. Die *Toolbox* bildet dabei EXPRESS Datentypen auf C++ Konstrukte ab. Beispielsweise werden Basisdatentypen als Klassen dargestellt, die Aggregationen *bag*, *list*, *set* und *array* als entsprechende Template-Klassen implementiert und Schnittstellen zu Entities, die den Vererbungsmechanismus unterstützen und referenzierbar sind, werden mit Hilfe sogenannter Handle-Klassen umgesetzt. Eine weiterführende Beschreibung und ein Anwendungsbeispiel zur *EUROSTEP Toolbox* wird beispielsweise in [114] gegeben. Im Folgenden wird nun knapp erläutert, wie innerhalb des IFC Modells auf die im Rahmen dieser Arbeit benötigten geometrischen Objekte zugegriffen werden kann.

⁸Centre Scientifique et Technique du Bâtiment, Frankreich

⁹National Institute of Standards and Technology, USA

3.3.3 Überführung von IFC Daten in ein Volumenmodell

Bauteilform und -struktur. Alle die Form von Bauteilobjekten bestimmenden Eigenschaften, wie z.B. von *IfcWall*, werden von der Klasse *IfcBuildingElement* mit entsprechend vererbten Attributen bestimmt. *IfcGloballyUniqueID* identifiziert dabei jedes Objekt eindeutig, *IfcLocalPlacement* bestimmt die lokale Position¹⁰, *IfcProductRepresentation* definiert die Form eines Bauteils mit Hilfe von Unterklassen, die Informationen bezüglich Geometrie und exakter Position im Raum enthalten, *IfcMaterialSelect* gibt Auskunft über Art und Zusammensetzung des Materials (z.B. den Schichtaufbau), mit *IfcRelConnectsElements* werden Beziehungen zwischen Objekten beschrieben, und *IfcRelVoidsElement* referenziert Öffnungen, die Teil eines Objektes sind.

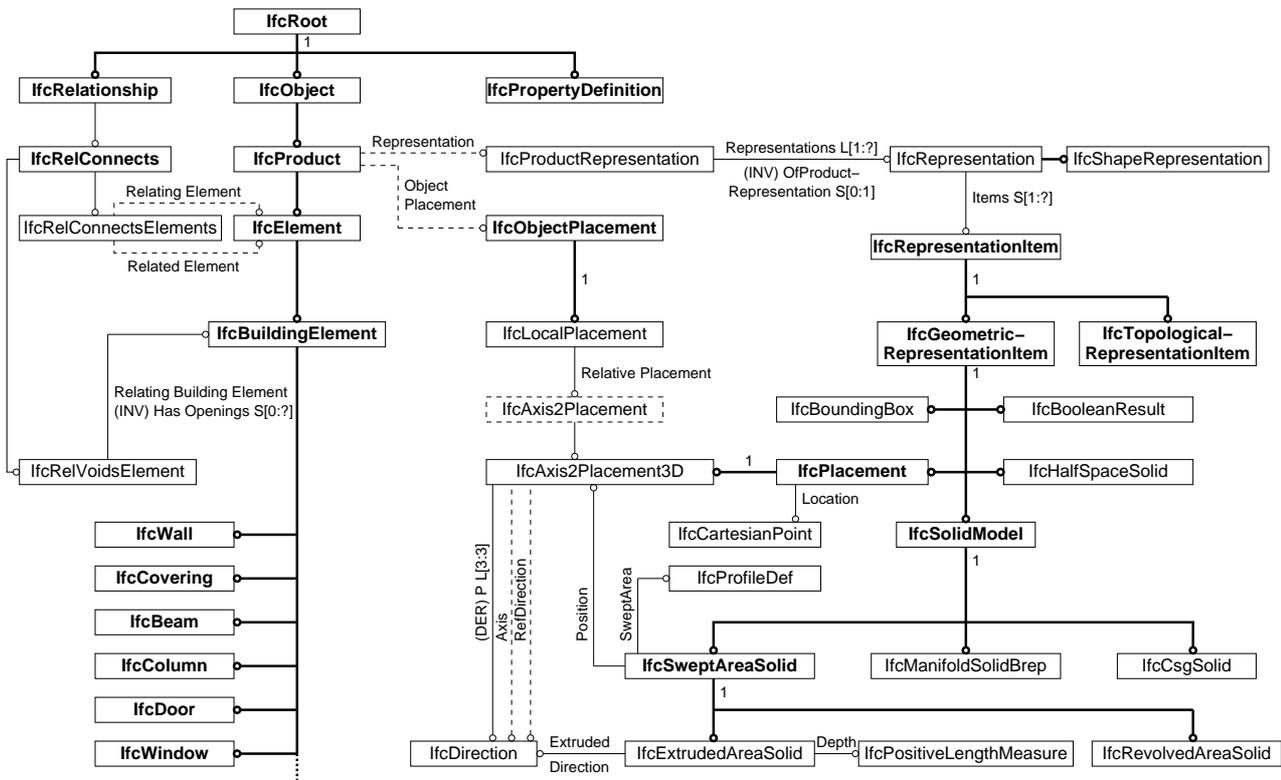


Abbildung 3.14: Auszug aus der EXPRESS-G Darstellung im Kontext der Klasse *IfcBuildingElement* des IFC 2x Schemas, das in [102] veröffentlicht ist.

Um nun geometrische Informationen zu extrahieren, müssen *IfcProductRepresentation*-Objekte entsprechend analysiert werden. Diese 'Entities' enthalten eine Liste kontextabhängiger *IfcShapeRepresentations*, die jeweils sogenannte *IfcGeometricRepresentationItems* aggregieren. Letztere stellen die Basisklasse zahlreicher geometrischer Darstellungsarten dar und fixieren die räumliche Position mit Hilfe eines *IfcPlacement* Entities. Geometrische Repräsentanten können dabei beispielsweise als *IfcHalfSpaceSolid*, *IfcSolidModel* oder als *IfcBooleanResult* definiert werden. Prinzipiell besitzt jedes Objekt zumindest eine Beschreibung in Form einer *IfcBoundingBox*. Zur räumlichen Darstellung werden in der Regel manifold Volumenkörper

¹⁰durch einen Punkt (*Location*) und zwei Richtungsvektoren (*RefDirection* und *Axis*)

eingesetzt, die mit der abstrakten Klasse *IfcSolidModel* beschrieben werden. Spezialisierungen sind ein Sweeping-Modell (*IfcSweptAreaSolid*), die abstrakte *B-rep*-Klasse *IfcManifoldSolidBrep* oder ein CSG-Modell. Beispielsweise kann ein Wandobjekt, dessen Geometrie unter Verwendung des als *IfcExtrudedAreaSolid* spezialisierten Sweeping-Modells definiert ist, generiert werden, indem eine Grundfläche *IfcProfileDef* am Ort *IfcAxis2Placement3D* definiert wird und diese entlang eines Richtungsvektors *IfcDirection* um den Betrag *IfcPositiveLengthMeasure* extrudiert wird. Abbildung 3.14 verdeutlicht den Zusammenhang der Klassenstruktur anschaulich. Dargestellt ist ein Auszug aus der IFC 2x Spezifikation in EXPRESS-G Notation der im Zusammenhang mit Objekten der Bauwerkskonstruktion relevanten Klassen.

Koordinatentransformation. Während der Analyse geometrischer Objekte sind pro Element bis zu vier Transformationen (rotatorisch und translatorisch) durchzuführen, um diese im globalen kartesischen Koordinatensystem zu platzieren. Objekte können dabei relativ oder in Abhängigkeit von einem anderen Objekt (z.B. ein Fenster in einer Wand) positioniert werden. Die Struktur des IFC Modells ist damit nicht geeignet, um auch als rechnerinternes geometrisches Modell eingesetzt werden zu können. Um Redundanzfreiheit zu gewährleisten, ist die Überführung in ein *B-rep Modell* nötig. Es ist anzumerken, dass durch mehrfache Transformationen, bedingt durch die speicherinterne Darstellung von Fließkommazahlen, Rundungsfehler auftreten können.

Wandschichtmodell und Verschneidung. In Abschnitt 3.3.1 wurde bereits angesprochen, dass CAD-Systeme das Wissen auswerten, wie Objekte zueinander in Beziehung stehen. Insbesondere Wandanschlüsse können dabei unterschiedlich ausgebildet werden. Beispielsweise werden im *ADT* Wandenden üblicherweise schräg miteinander verschnitten; *Allplan* verschneidet schichtweise. Die IFC Spezifikation sieht hierfür die Klasse *IfcConnectionGeometry* vor, die die Form einer Bauteilverbindung definiert. Da diese Funktionalität beim Export von IFC Daten in CAD-Systemen bislang nur eingeschränkt verfügbar ist, wurde im Rahmen der Forschungsprojekte *SIMFAS* [154] und [156] und einer Diplomarbeit [119] ein eigenes Verfahren zur Verschneidung von Wandschichten implementiert. Der in Abschnitt 3.4.3 beschriebene Zerlegungsalgorithmus benötigt dabei 'stumpfe' Stöße zwischen den einzelnen Bauteilschichten. Das Vorgehen ist in [119] ausführlich beschrieben.

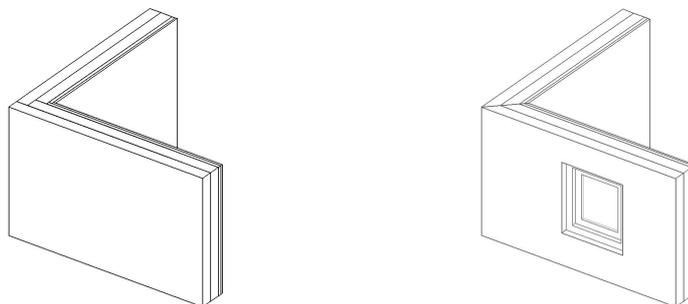


Abbildung 3.15: Verschiedene Möglichkeiten beim Verschneiden von Wandschichten: **links:** schichtweise 'stumpf', **rechts:** schräg.

Für jede Wandschicht eines Wandobjektes wird nun ein entsprechender *ACIS*-Volumenkörper generiert, wobei beim Import die Schichten 'stumpf' miteinander verschnitten werden. Es

können IFC-Geometrien importiert werden, die sowohl als *Sweeping*- als auch als *B-rep*-Modell definiert sind. Die Attribute des Wandobjektes mit seinen Bauteilschichten werden parallel dazu in die Datenbank eingefügt, deren Aufbau in Abschnitt 1.4 beschrieben wurde. Innerhalb der IFC legt das Entity *IfcMaterialSelect* fest, ob der Schichtaufbau als Materialliste oder als Schichtenmodell (*IfcMaterialLayerSetUsage*) definiert ist.

Fenster und Türen. In dem in Abbildung 3.14 dargestellten Schema ist ersichtlich, dass Öffnungen in Objekten mit Hilfe der Klasse *IfcRelVoidsElement* referenzierbar sind. Öffnungen können beispielsweise mit *IfcWindow*- oder *IfcDoor*- Instanzen 'gefüllt' werden. Zur Darstellung stehen eine Reihe von Klassen zur parametrischen Beschreibung von Gestalt und Funktion zur Verfügung [102]. Für eine thermische Simulation sind dabei Parameter wie der Rahmenanteil an der Verglasungsfläche oder bauphysikalische, verglasungsspezifische Daten von Bedeutung. Im Rahmen dieser Arbeit werden lediglich geometriebeschreibende Daten ausgetauscht.

3.3.4 Beispiel: Bürogebäude

Die folgenden Bilder zeigen als Referenzmodell das CAD Modell eines Teils des Uniqa-Hochhauses¹¹, das im CAD-System *Architectural Desktop* modelliert, als *IFC*-Datei exportiert und in ein *ACIS*-Volumenmodell überführt wurde. Der in diesem Beispiel modellierte Gebäudeabschnitt besteht aus 6 Stockwerken (incl. EG), 426 Wänden mit 228 Öffnungen, 288 Fenstern, 24 Türen, 7 Scheiben und 108 Stützen. Die Rechenzeit zur Konvertierung dieses komplexen, aus insgesamt 853 Volumenkörpern bestehenden Modells beträgt auf einem Pentium IV Rechner mit 3 GFlop/s etwa 70 Sekunden.¹² Anhand dieses Anwendungsbeispiels wird in Abschnitt 3.4.5 auch der im Folgenden beschriebene Zerlegungsprozess anschaulich demonstriert werden.

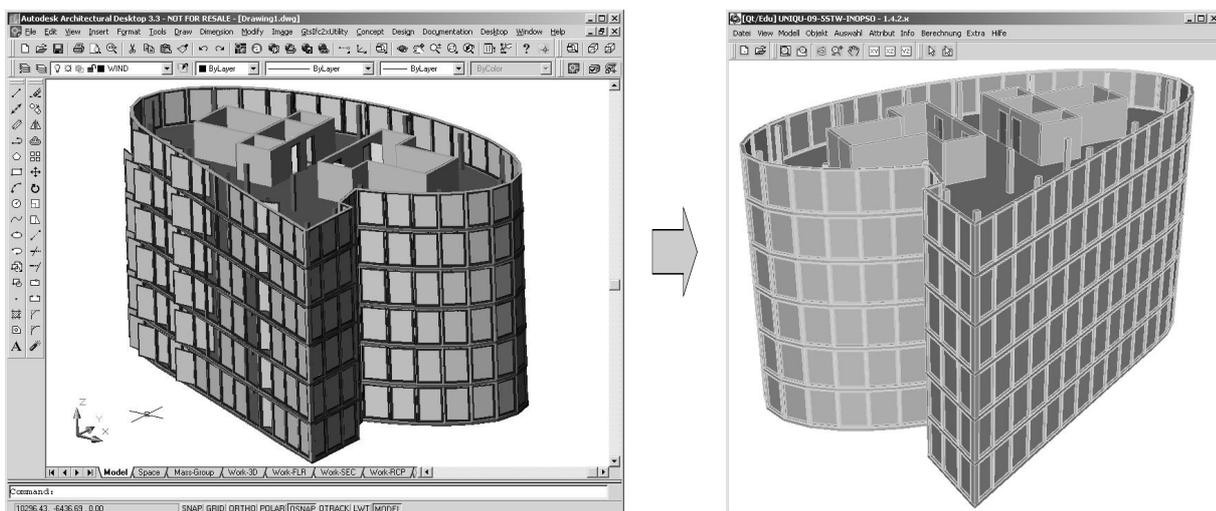


Abbildung 3.16: Überführung eines IFC Modells in ein Volumenmodell. **Links:** CAD Modell im *Architectural Desktop* (ADT), **rechts:** Screenshot der auf den Bibliotheken *ACIS*, *HOOPS* und *QT* basierenden Applikation mit dem importierten Volumenmodell.

¹¹Hauptsitz der Uniqa Versicherung in Wien, Architekt: Neumann

¹²Zum Vergleich: Das Einlesen desselben IFC-Files in den Architectural Desktop 3.3 mit Hilfe der IFC-Utility 2x [99] benötigt etwa 45 Sekunden.

3.4 Graphentheoretische Analyse von Raumtopologie und Gebäudestruktur

3.4.1 Problemstellung: Interpretation von Gebäudedaten

In Kapitel 1 wurde bereits die Thematik angesprochen, wie numerische Simulationsprogramme in computergestützte Konstruktionswerkzeuge integriert werden können. Es wurde festgestellt, dass es wünschenswert ist, geometrische Informationen zu einem Bauwerk als Ausgangspunkt für weitere Anwendungen verwenden zu können. Eine Aufgabenstellung könnte beispielsweise lauten, die Gebäudestruktur für eine statische Berechnung hinsichtlich Topologie und Semantik zu analysieren [156]. In dem hier besprochenen Zusammenhang ist es nun erforderlich, einerseits für die thermische Simulation das Gebäudemodell in Zonen zu unterteilen (Mehrzonenmodell), andererseits für die Berechnung von Raumluftrömungen die exakte Geometrie von Innenraumvolumen zu kennen.

Das zentrale und entscheidende Problem bei der Verarbeitung von geometrischen Informationen, unabhängig davon, ob sie aus einem Produktdatenmodell oder direkt aus dem 3D-Modell eines CAD Systems gewonnen werden, liegt dabei in der *Interpretation* und Nutzbarmachung dieser Daten hinsichtlich der jeweiligen Aufgabenstellung. Grundsätzlich besitzt jede am Konstruktionsprozess und Betrieb eines Bauwerkes teilhabende Disziplin eine unterschiedliche Sichtweise auf ein Modell, entsprechend unterschiedlich sind auch die Herangehensweisen bei der Planung.

Ein Architekt wird zunächst von einem Raummodell ausgehen. Die Funktion einzelner Räume und deren Beziehungen untereinander sind für ihn aber ebenso wichtig wie die Gestaltung der Gebäudehülle und deren Form und Funktion hinsichtlich des Energiehaushaltes und Einflusses auf den Komfort der Nutzer. Ein Raummodell spielt beispielsweise im Brandschutz bei der Erschließung von Fluchtwegen eine wichtige Rolle. Auch für einen Klimaingenieur ist das Raummodell von Interesse, da für eine thermische Simulation eines Gebäudes, neben der Bilanzierung der Wärmeströme durch die Gebäudehülle, auch die (abstrakte oder detaillierte) Betrachtung von Luftströmungen zwischen ausgewiesenen Zonen nötig ist. Bedingt durch normative Vorschriften wird sich ein Statiker hingegen auf eine stark dimensionsreduzierte Sichtweise beschränken. Damit verbunden ist eine Abstraktion von Bauteilen (Platten, Scheiben, Balken) und ihrer Verbindungen untereinander (Gelenk, Auflager, Bettung, etc.). Dieses Tragwerksmodell ist üblicherweise nicht oder nur teilweise kompatibel mit dem Raummodell aus der Sicht eines Architekten.

Aus den unterschiedlichen *Sichtweisen* der am Planungsprozess Beteiligten leiten sich folglich entsprechende *Modelle* zur Planung und Berechnung ab. In Abschnitt 3.2 wurde darauf eingegangen, wie international an der Weiterentwicklung des IFC Produktmodells hinsichtlich der Definition spezifischer Modelle für die individuellen Anwendungsfelder gearbeitet wird. Die Entwicklungen der objektorientierten Schemaerweiterungen sind dabei verschieden weit fortgeschritten. So stehen für die Beschreibung von Komponenten der Heizungs-, Lüftungs- und Klimatechnik (HVAC) bereits detaillierte Klassen zur Verfügung [14], im Bereich der Tragwerksplanung wird intensiv an einer Erweiterung gearbeitet [71, 204]. Warum einzelne Äste des objektorientierten Schemas bereits stark verfeinert sind und andere nicht, liegt nicht

zuletzt daran, dass man auf den ersten Blick die Sicht des Architekten als hinreichend zur Beschreibung der Gebäudetopologie ansehen mag.

In diesem Punkt versucht der folgende Abschnitt einen Beitrag zu leisten, indem mit Hilfe der graphentheoretischen Analyse eines Gebäudemodells ein Werkzeug hinsichtlich der semantischen und topologischen Interpretation der Gebäudestruktur geliefert wird [196, 198].

3.4.2 Definition: Bauteilgraph, Raumflächengraph und Raumgraph

Mit Kenntnis der topologischen und geometrischen Informationen zwischen allen Punkten, Kanten und Flächen, die in der Oberflächendarstellung eines Bauwerksmodells verfügbar sind, unterscheidet man, abhängig von der Speicherung entsprechender Relationen, verschiedene Datenstrukturen. Einige dieser Modelle, wie z.B. die *Radial-Edge*- oder die *Winged-Edge*-Datenstruktur, wurden in Abschnitt 3.1.2 bereits vorgestellt. Es können nun verschiedene Graphen als notwendig identifiziert werden, um die topologische Struktur eines Bauwerks und die Beziehungen zwischen den einzelnen Komponenten analysieren zu können. Dieses Vorgehen ist nötig, da, je nach Ausgangslage, zwar semantische Informationen zu einzelnen Objekten verfügbar sein können, diese aber je nach Anwendungsfall eine Situation nicht immer hinreichend genau wiedergeben. Beispielsweise ist die Verschneidung von Wänden (vgl. Abschnitt 3.3.3) oder die Definition von Auflagerflächen zu nennen.

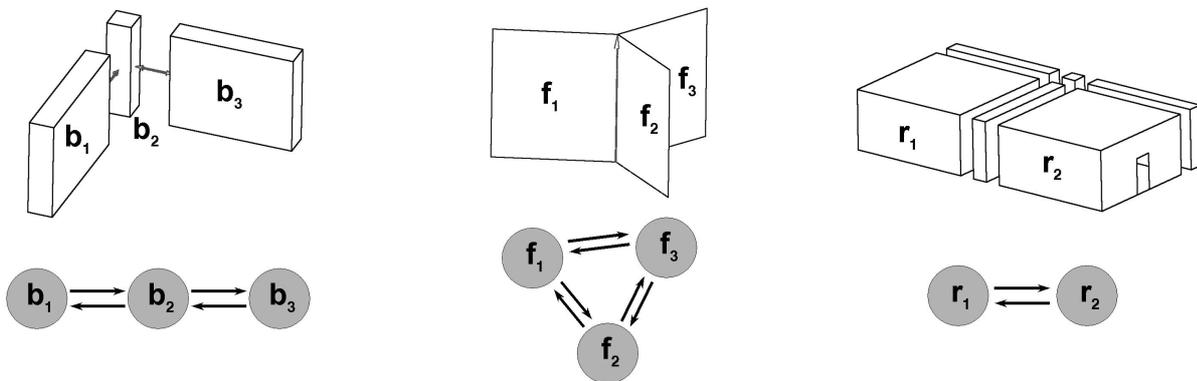


Abbildung 3.17: Bauteilgraph (links), Raumflächengraph (mitte), Raumgraph (rechts)

Ausgehend vom geometrischen Modell eines Bauwerks wird ein sogenannter *Bauteilgraph*¹³

$$G_B = (M_B; R_{PC}) \quad , \quad R_{PC} \subseteq M_B \times M_B \quad (3.28)$$

(vgl. Abb. 3.17 links) erstellt, der die Relation aller flächigen Verbindungen R_{PC} zwischen der Menge der Volumenkörper M_B definiert. Voraussetzung ist eine entsprechende Zerlegung in die Menge der kleinsten gemeinsamen 'Verbindungsobjekte' des Modells, die im folgenden Abschnitt erläutert wird. Die in einer Radial-Edge Datenstruktur verfügbaren Relationen nutzend, können nun die topologischen Beziehungen zwischen den einzelnen Elementen der Menge M_F aller Flächen, die für die Extraktion von Innenraumvolumen bekannt sein müssen, mit

¹³ $B = body$ (Volumenkörper), $PC = plane\ connection$ (flächige Bauteilverbindung)

Hilfe des *Raumflächengraphen*¹⁴

$$G_F = (M_F; R_{NF}) \quad , \quad R_{NF} \subseteq M_F \times M_F \quad (3.29)$$

(vgl. Abb. 3.17 Mitte) abgeleitet werden. Die Relation R_{NF} wird später definiert. Eine wichtige Eigenschaft der Flächen ist hierbei ihre Orientierbarkeit. Mit Kenntnis des Bauteil- und Raumflächengraphen ist es schliesslich möglich, einen *Raumgraphen*¹⁵

$$G_{AV} = (M_{AV}; R_R) \quad , \quad R_R \subseteq M_{AV} \times M_{AV} \quad (3.30)$$

(vgl. Abb. 3.17 rechts) zu erstellen. Ist die Menge aller Innenraumvolumen M_{AV} bekannt, können einzelne Bauteile klassifiziert werden. Beispielsweise sind Wände nun unmittelbar als nach aussen grenzend, zonenbenachbart oder innenliegend identifizierbar. Für die in Abschnitt 3.5.2 beschriebene Zonierung ist es weiterhin erforderlich, die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen einzelnen Bauteilen und Luftvolumen zu kennen. Dies kann mit dem Graphen G_I und der Relation R_I ausgedrückt werden:¹⁶

$$G_I = (M_B, M_{AV}; R_I) \quad , \quad R_I \subseteq M_B \times M_{AV} \quad (3.31)$$

Die folgenden Abschnitte erläutern die zur Ableitung dieser Relationen benötigte Algorithmik.

3.4.3 Zerlegung in ein Verbindungsmodell

Konventionen. Zur Abgrenzung der herkömmlichen Operationen Schnittmenge, Vereinigung und Differenz mit Mengen und Mengensystemen ([28]) von booleschen Operationen werden letztgenannte mit einem "b" indiziert als $\cap_b, \cup_b, \setminus_b$ geschrieben. Weiterhin werden während des Zerlegungsprozesses Ausdrücke zur Beschreibung von Elementbeziehungen benötigt, die Bezug auf die topologischen Unterelemente von Elementen nehmen. Topologische Unterelemente werden mit einem "t" indiziert als \in_t notiert.

Definition des Verbindungsmodells. Zunächst wird das Bauwerksmodell, wie in Abschnitt 3.3 angedeutet, in ein Volumenmodell, d.h. die Gesamtheit $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ aller als *B-rep* Körper (vgl. 3.1.2) aufgebauten Bauteile, überführt. Diese Gesamtheit wird in das *Verbindungsmodell* M_B zerlegt. Aufgrund ihrer unterschiedlichen Semantik werden diese in die Menge der *Kopplungsobjekte* M_K und die Menge der *Differenzobjekte* M_D eingeteilt, vgl. Abb. 3.18. Jedes Kopplungs- und Differenzobjekt ist dabei ein abgeschlossener Körper in \mathbb{R}^3 . Die Menge der Kopplungsobjekte M_K kann weiter unterteilt werden in die Menge der *Verbindungskörper des Ausgangsmodells* M_{K1} und die Menge der *Verbindungskörper des Verbindungsmodells* M_{K2} . Es gilt

$$M_{K1} \subseteq M_K \quad , \quad M_{K2} \subset M_K \quad , \quad M_{K1} \cap M_{K2} = \emptyset \quad \text{und} \quad M_{K1} \cup M_{K2} = M_K \subset M_B \quad . \quad (3.32)$$

¹⁴ $F = \text{face}$ (Fläche), $NF = \text{next (valid neighbouring) face}$ (nächste (gültige Nachbar-)Fläche)

¹⁵ $AV = \text{airvolume}$ (Luftvolumen), $R = \text{room}$ (Raum)

¹⁶ $I = \text{incidence}$ (Inzidenz)



Abbildung 3.18: Zerlegung zweier sich stumpf stossender Bauteile (z.B. Wände) der Menge Ω in *Kopplungs-* und *Differenzobjekte*

Für die r Elemente a_i der Kopplungsobjekte des Ausgangsmodells mit $i = 1, \dots, r$, die s Elemente b_j der Kopplungsobjekte des Verbindungsmodells mit $j = 1, \dots, s$ und die t Elemente d_k der Differenzobjekte mit $k = 1, \dots, t$ gilt dabei anschaulich

$$\bigcup_{i=1, \dots, r} a_i = M_{K1} \subseteq M_K \quad , \quad (3.33)$$

$$\bigcup_{j=1, \dots, s} b_j = M_{K2} \subset M_K \quad \text{und} \quad (3.34)$$

$$\bigcup_{k=1, \dots, t} d_k = M_D \subseteq M_B \quad . \quad (3.35)$$

Die Vereinigung beider Teilmengen M_K und M_D ergibt die Menge der Verbindungsobjekte M_B . Die Menge aller Punkte P_B der n Verbindungsobjekte M_B ist wiederum Teil der Gesamtheit aller Bauteile Ω :

$$M_K \cup M_D = M_B \quad , \quad (3.36)$$

$$P_B \subseteq \Omega \subset \mathbb{R}^3 \quad \text{mit} \quad (3.37)$$

$$P_B = \{x \in \mathbb{R}^3 : x \in v_i \wedge v_i \in M_B\} \quad \forall i = 1, \dots, n \quad ; \quad n = r + s + t \quad (3.38)$$

Für die weitere graphentheoretische Analyse ist bemerkenswert, dass die geometrische Schnittmenge derjenigen Objekte, die nicht der Menge der Kopplungsobjekte zuzurechnen sind, nur gemeinsame Kanten bzw. Knoten, nicht aber gemeinsame Flächen liefert. Diese Darstellungsart hat entscheidende Vorteile:

- Die Zerlegung schafft die Voraussetzung für die graphentheoretische Analyse und automatische Extraktion von Raumluftvolumen, die u.a. für die Gebäude- und Raumlufstromungssimulation benötigt werden.
- Weiterhin erfolgt, im Sinne einer strukturmechanischen Betrachtung von Wechselwirkungen zwischen Bauteilen, der Kraftfluss durch die Struktur ausschliesslich über die flächigen Verbindungen zwischen den Verbindungsobjekten. Dadurch wird eine wesentliche Voraussetzung für eine Partitionierung des Modells in Teilmodelle für eine parallele Bearbeitung und für eine Vernetzung in Hexaeder-Elemente für eine FE-Berechnung geschaffen [156, 159].

Die Darstellung mit Hilfe des *vef*-Graphen¹⁷ nutzend (vgl. Abschnitt 3.1.2), können folgende *Schnittmengen-Typen* klassifiziert werden:

¹⁷ *vertex, edge, face*

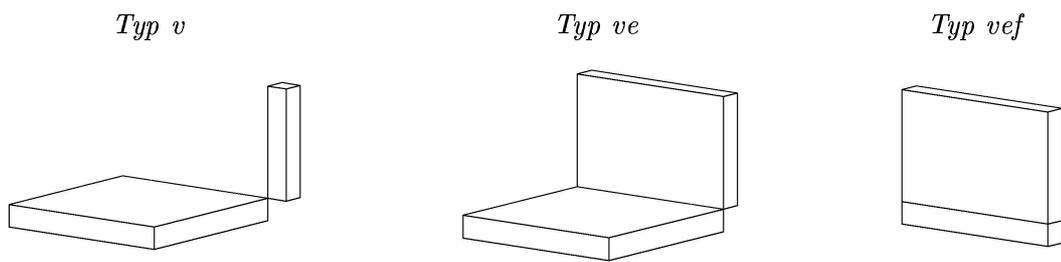


Abbildung 3.19: Schnittmengen-Typen v , ve und vef , die bei der Bestimmung eines Berührungsgraphen von Bedeutung sind

- *Typ vef .* Die Schnittmenge flächig verbundener Bauteile besteht aus Flächen, Kanten und Knoten.
- *Typ ve .* Sind Objekte über eine Kante verbunden, resultiert die Schnittmenge zu Kanten und Knoten.
- *Typ v .* Knotenbenachbarte Objekte haben eine aus Knoten bestehende Schnittmenge.

Somit sind die Schnittmengen, sofern nicht leer, zwischen Differenzobjekten stets vom Typ v oder ve und die Schnittmengen zwischen Kopplungsobjekten bzw. zwischen Differenz- und Kopplungsobjekten vom Typ v , ve oder vef .

Dekomposition. Der Zerlegung geht eine Analyse der Aufbauten und Verschneidungen der Wandschichten aller Wände im Modell voraus. Dabei wird zwischen 'Stirnseiten' und 'Bauteiloberflächen' unterschieden. Der Algorithmus benötigt, wie in Abbildung 3.20 dargestellt, *stumpfe Stösse* zwischen den einzelnen Schichten benachbarter Wände, d.h. die Stirnfläche eines Bauteils ω_i besitzt eine flächige Verbindung mit einer der beiden Bauteiloberflächen des Körpers ω_j (vgl. hierzu auch Abb. 3.15). Der Winkel zwischen den Objekten spielt dabei keine Rolle. Je nach Anwendungsfall handelt es sich bei dem zu zerlegenden Modell um ein Einschichtenmodell (z.B. die tragende Wandschicht für eine statische Berechnung) oder ein Mehrschichtenmodell (z.B. mit Wandaufbauten für eine thermische Simulation). Der Zerlegungsalgorithmus wurde ursprünglich von ROMBERG im Rahmen des DFG Projektes nach [156] eingesetzt und ist u.a. in [158] und [197] ausführlich dargestellt.

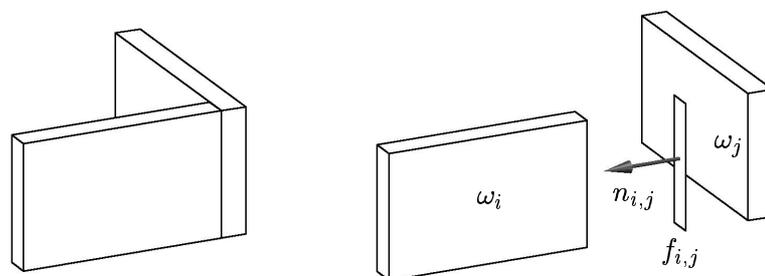


Abbildung 3.20: Bestimmung der Kontaktfläche $f_{i,j}$ und ihres Normalenvektors $n_{i,j}$ zweier sich flächig berührender Bauteile ω_i und ω_j

Das aus B -rep Volumenkörpern bestehende Modell wird nun an allen Orten koinzidierender Bauteile in *Verbindungskörper* zerlegt. Hierfür wird zunächst der relationale Graph

$$G_C = (\Omega; R_C) \quad (3.39)$$

generiert¹⁸, wobei die Relation R_C die Beziehungen zwischen allen n Bauteilen $\omega_i \in \Omega$, $i = 1, \dots, n$, mit flächigen Verbindungen vom Typ *vef* bezeichnet. Die Relation R_C kann dabei unter Verwendung der Funktionalität des verwendeten Geometrikerns *ACIS* aufgestellt werden, indem die Kontaktflächen, die sogenannten *Imprint-Flächen*, ermittelt werden.¹⁹ An den so spezifizierten Orten werden die Bauteile mit Hilfe boolescher Operationen in *Kopplungs-* und in *Differenzobjekte* zerlegt. Das Grundprinzip ist in nachfolgendem Algorithmus 1 dargestellt, wobei alle Elemente, die in der oberen Dreiecksmatrix der symmetrischen Relation R_C enthalten sind (ohne reflexive Beziehungen), durchlaufen werden. Nach Durchlaufen des Algorithmus erhält man das *Differenzmodell* und die Menge der *Verbindungskörper des Ausgangsmodells* M_{K1} . Zur Menge der Kopplungsobjekte gehören aber auch die *Verbindungskörper des Verbindungsmodells* M_{K2} , die in einem zweiten Durchlauf analog zu obigem Schema gewonnen werden können.

Algorithmus A-1 Zerlegung in ein Verbindungsmodell

```

1: for  $i = 0; i < n; i++$  do
2:   for  $j = i + 1; j < n; j++$  do
3:     if  $R_C(i, j) = true$  then
4:       Führe Zerlegung durch:
5:         Erstelle Imprint-Fläche  $f_{i,j}$ 
6:         Erstelle Normalenvektor  $n_{i,j}$ 
7:         Kopiere  $\omega_i$  nach  $\omega'_i$ 
8:         Verschiebe  $\omega'_i$  entlang  $-n_{i,j}$  um  $\Delta d$ 
9:         Kopiere  $\omega_j$  nach  $\omega'_j$ 
10:      Erhalte Verbindungsobjekte durch:
11:         $a_1 := \omega'_i \cap_b \omega'_j \subset M_{K1}$ 
12:         $d_1 := \omega_i \subset M_D$ 
13:         $d_2 := \overline{\omega_j \setminus_b a_1} \subset M_D$ 
14:      end if
15:    end for
16:  end for

```

Basierend auf dem so erhaltenen Verbindungsmodell kann nun der *Bauteilgraph* G_B ($\neq G_C$) erstellt werden, der alle Kopplungs- und Differenzobjekte über ihre flächigen Verbindungen vom Typ *vef* miteinander in Beziehung setzt. Der Bauteilgraph ist ein *einfacher Graph* und somit symmetrisch. Die zugehörige Relation heisst R_{PC} , ihre Bildung wird in Abschnitt 3.4.4 beschrieben.

¹⁸ $C = component$ (Bauteil)

¹⁹ Es bieten sich z.B. die ACIS Funktionen *api_slice()* bzw. *api_imprint()* an, die einen Verschneidungsgraphen zwischen zwei Körpern und somit einen Kantenzug (Drahtmodell) bzw. eine Imprint-Fläche generieren können.



Abbildung 3.21: Zueinander versetzte Bauteile: Der links abgebildete Fall ist zulässig, der rechte aber nicht, da hier bei der Zerlegung die Wandscheibe in mehrere Schichten zerfallen würde. Letztgenannter Fall wird aber dadurch aufgefangen, dass alle Wandschichten zuvor entsprechend miteinander verschnitten werden.

Anmerkungen zur Implementation. Es wird darauf hingewiesen, dass dieser Algorithmus hauptsächlich für die Zerlegung von Objekten konzipiert wurde, die im baupraktischen Zusammenhang relevant sind, wie z.B. Scheiben, Platten, Stützen, Balken, etc. Aufgrund der Komplexität der Thematik wurden dabei einige Fälle ausgeschlossen. Ausgehend von den Daten eines Produktmodells spielen diese Vereinfachungen aber eine meist untergeordnete Rolle, da beispielsweise Wände vor der Zerlegung entsprechend miteinander verschnitten werden.

- Ausgeschlossen werden Bauteile, deren Bauteiloberflächen (Definition siehe oben) aufeinander liegen,
- Bauteile, die sich gegenseitig durchdringen (nichtleere Schnittmenge), und
- Objekte, die zueinander versetzt sind, da dies in mehreren Elementen über die Schichtdicke resultieren würde (vgl. Abb. 3.21).

Die algorithmisch abstrakt formulierte Zerlegung wurde softwaretechnisch umgesetzt, indem die Kontaktflächen mit Hilfe des in Abschnitt 3.1.2 angesprochenen *Sweeping*-Verfahrens zu Verbindungskörpern extrudiert bzw. zwei sich gegenüberliegende Imprint-Flächen unter Verwendung des *Lofting*-Verfahrens zu Volumenkörpern verbunden werden. Der Algorithmus ist dabei unabhängig von den Winkeln, in denen Bauteile zueinander angeordnet sind. Im Rahmen einer Diplomarbeit wurden von [179] zahlreiche Sonderfälle untersucht und implementiert.

Beispiel. Der oben beschriebene Algorithmus soll nun anhand eines Beispiels verdeutlicht werden. Betrachtet wird das in Abb. 3.22 dargestellte Gebilde samt zugehöriger Adjazenzrelation R_C des Graphen G_C , die die flächigen Bauteilverbindungen vom Typ *vef* enthält.

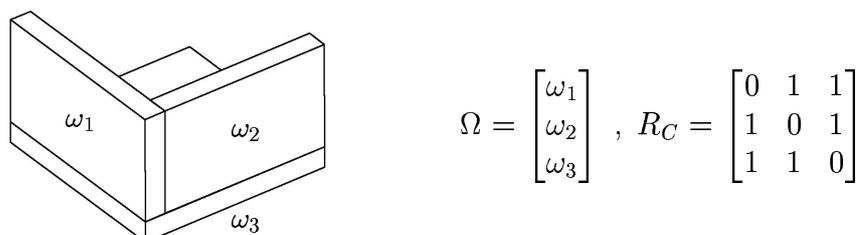


Abbildung 3.22: Ausgangsmodell: Gesamtheit Ω mit Adjazenzrelation R_C

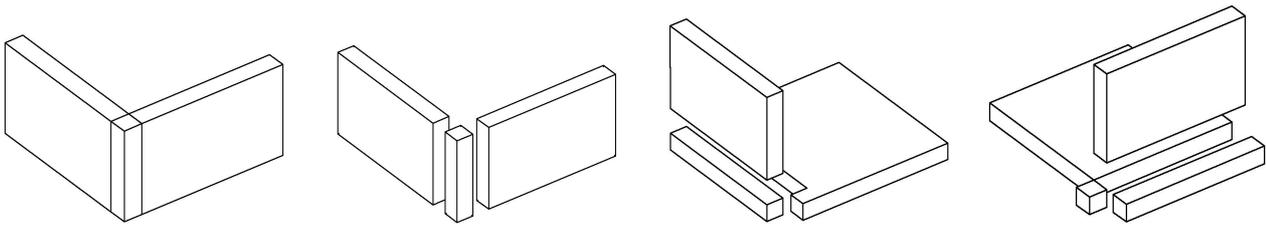
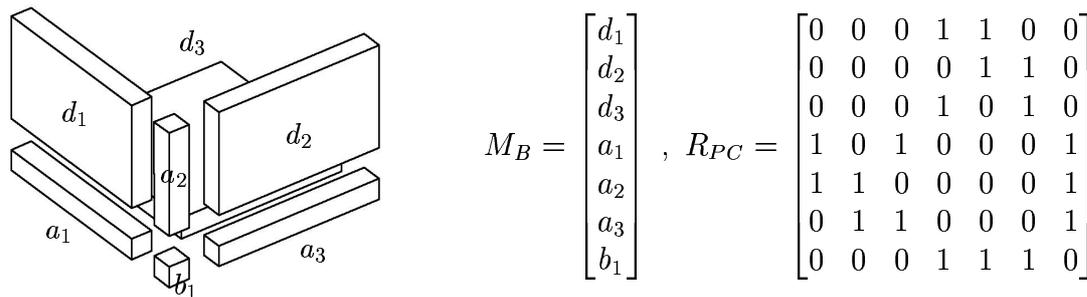


Abbildung 3.23: Zwischenschritte bei der Zerlegung

Abbildung 3.24: Verbindungsmodell und abgeleitete Relation R_{PC} des Bauteilgraphen G_B

Nach Anwendung von Algorithmus 1 entsteht das Verbindungsmodell mit den Kopplungsobjekten des Ausgangsmodells $a \in M_{K1}$, den Kopplungsobjekten des Verbindungsmodells $b \in M_{K2}$ und den Differenzobjekten $d \in M_D$. Die daraus abgeleitete Relation R_{PC} des Bauteilgraphen G_B ist angegeben.

3.4.4 Menge der kleinsten geschlossenen B-rep Volumenkörper

Mit Hilfe der zuvor beschriebenen Zerlegung und durch die Bestimmung des Bauteilgraphen G_B ist es nun möglich, durch die rekursive Betrachtung von Nachbarschaftsbeziehungen zwischen allen (isoliert betrachteten) Flächen der Körper der Menge M_B , die Menge der kleinsten geschlossenen Volumenkörper M_{AV} (d.h. sämtliche Innenraumvolumen und Hüllflächen) im Modell zu finden.

Zur 'Extraktion' von Raumvolumen werden mitunter verschiedene Techniken eingesetzt: Eine bekannte Methode ist es, im Grundriss eines Modells zunächst anhand einer dedizierten Anzahl von Wänden einen geschlossenen Polygonzug zu definieren, daraus eine ebene Fläche zu generieren und diese entlang eines Vektors zu einem Volumenkörper zu extrudieren (Sweeping-Modell). Die Beschränkungen sind offenkundig, da das Procedere eine einheitliche Raumhöhe voraussetzt. Dieses Vorgehen wurde beispielsweise in [43] oder in [145] angewendet. Andere Verfahren bedienen sich eines Algorithmus zur Volumengenerierung mit Hilfe einer *konvexen Hülle*, die aus einer Punktwolke, z.B. aus einzelnen Punkten der Umschließungsflächen bestehend, gewonnen werden kann. Beispielsweise wird in [138] die Implementation eines komplexen inkrementellen Algorithmus für den 3D-Fall vorgestellt. Vereinfachungen, wie z.B. die Annahme der Konvexität, sind dabei eine Restriktion und bestimmen die Anwendung des Verfahrens.

Beide Verfahren werden deshalb als nicht geeignet angesehen, um Raumvolumen zur Ableitung eines Raumgraphen, zur Diskretisierung hinsichtlich einer thermischen Gebäudesimulation, bzw. zur Vernetzung für eine Raumluftrömungssimulation zu erhalten. Die graphentheoretische Analyse bietet dagegen die Möglichkeit, alle geschlossenen und nicht-geschlossenen Körper im Modell zu erkennen, und zwar unabhängig davon, ob es sich um einen konvexen oder konkaven Körper oder eine manifold oder non-manifold Darstellung handelt. Im Rahmen dieser Arbeit werden der Einfachheit halber nun zunächst ebene Flächen betrachtet. Es wird aber darauf hingewiesen, dass der Algorithmus Allgemeingültigkeit besitzt, da die Natur der Analyse rein topologischen Charakter besitzt.

Invertierung aller Flächennormalen. In einem ersten Schritt werden alle Flächen des zerlegten Verbindungsmodells M_B kopiert und ihr Orientierungssinn, d.h. die Richtung des Normalenvektors einer Fläche, invertiert. Die Topologie eines B-rep Modells setzt gewöhnlich voraus, dass die Flächennormalen aus einem Körper heraus zeigen (vgl. Abschnitt 3.1.2). Da nun die Menge aller Innenraumvolumen bzw. Hüllflächen gefunden werden soll, muss anschaulich die Orientierung geändert werden (vgl. Abb. 3.25). Die Flächen werden in der Menge M_F abgelegt.

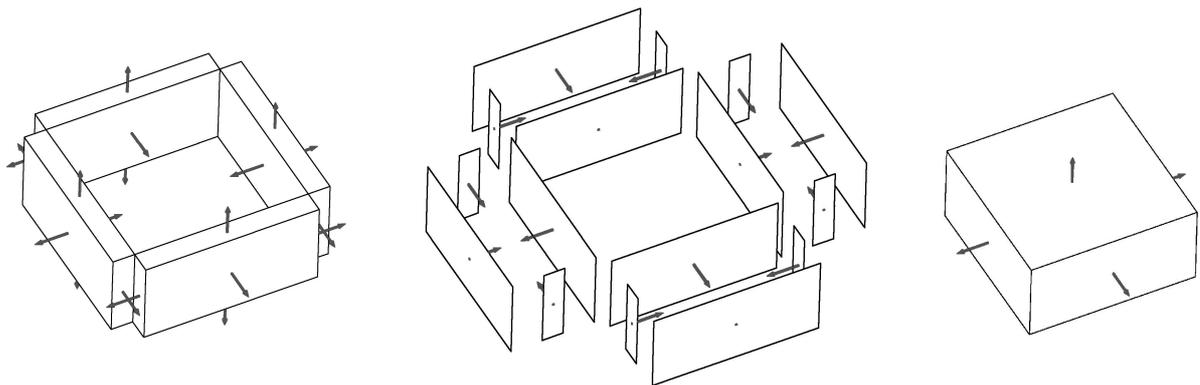


Abbildung 3.25: Invertierung der Orientierung aller Flächen des zerlegten Modells, da nun die Körper der Luftvolumen beschrieben werden sollen

Kollabierung in Radial-Edge Datenstruktur. Da das Gelingen des Verfahrens von der Konsistenz, d.h. der exakten Modellierung der Szene, und der Redundanzfreiheit des Modells abhängt, wird in einem zweiten Schritt das aus dem Bauwerksmodell abgeleitete *B-rep* Modell kollabiert, d.h. in eine eigenständige *Radial-Edge Datenstruktur* überführt (Abb. 3.26). Bei Vorliegen von Modellierungsfehlern liefert das Verfahren, im Gegensatz zu den zuvor benannten Methoden, dabei auch die Menge aller nicht geschlossenen Körper, anhand derer sich diese Fehler unmittelbar erkennen lassen, z.B., indem der Drahtkörper des Randes einer nicht geschlossenen Oberfläche im Konstruktionssystem sichtbar gemacht wird. Unter Modellierungsfehlern versteht man ungewollte Klaffungen oder Überlappungen von Bauteilen. Im Rahmen der Genauigkeit von Fließkommazahlen können sich während des Modellierungsprozesses z.B. durch Transformationen Rundungsfehler einschleichen.

Zur Verwaltung des geometrischen Modells wird der Geometriekern *ACIS* [2] verwendet. Die zum Kollabierungs- und Erkennungsprozess verwendete Datenstruktur entstand deshalb in An-

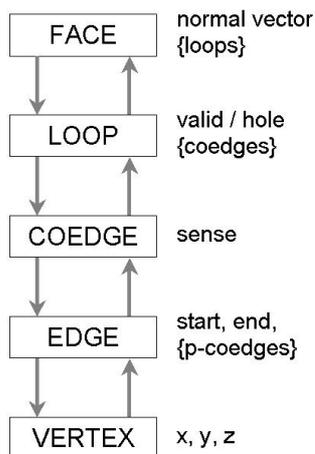


Abbildung 3.26: Radial-Edge Datenstruktur

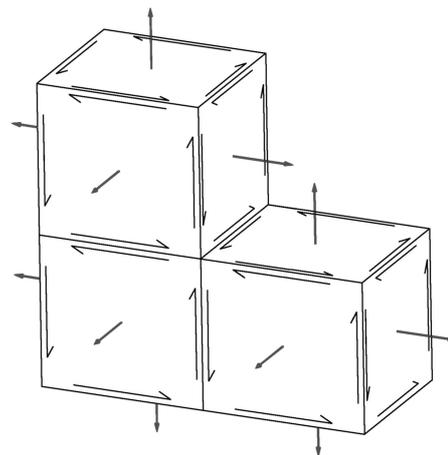


Abbildung 3.27: Orientierung von Flächennormalen, Anordnung von Coedges

lehnung an [37], wobei die nachstehend beschriebene Algorithmik eigenständig ist und neu implementiert wurde. Die extrahierten (geschlossenen und nicht-geschlossenen) Volumenkörper werden anschliessend wieder in *ACIS* Körper transformiert und mit der ursprünglichen Topologie in Beziehung gesetzt und können somit, das in Kapitel 1.4 vorgestellte Konzept nutzend, visualisiert und weiterverarbeitet werden.

Entscheidend ist, dass nach dem Kollabierungsprozess Knoten, Kanten und Flächen *eindeutig* sind, d.h. es darf am selben Ort nur jeweils eine Instanz existieren. Knoten (*Vertices*) besitzen als Geometrie ihre kartesischen Koordinaten, die in einer ϵ -Umgebung verschmolzen werden. Kanten (*Edges*) kennen ihren Start- und Endknoten und die Kurvengeometrie (z.B. die Geradengleichung). Sie besitzen somit eine *Richtung*, was sich hinsichtlich der späteren Betrachtungen als hilfreiches Merkmal herausstellen wird. Das Objekt einer Fläche (*Face*) speichert, falls eben, einen Flächennormalenvektor und eine Liste von sogenannten *Loops*. Ein Loop beschreibt dabei die polygonale Begrenzung einer Teilfläche eines Face, indem eine Liste von *Coedges* aggregiert wird. Weiterhin besitzt es ein Flag *hole* oder *valid*, je nachdem, ob es sich um ein Loch handelt oder nicht. Coedges sind ein rein topologisches Element und zeigen auf ihre zugrundeliegende Kante, wobei ihr Orientierungssinn festlegt, ob sie in dieselbe oder entgegengesetzte Richtung wie ihre Edge zeigen. Eine Kante (*Edge*) aggregiert die Menge aller auf sie zeigenden Coedges, ihre sogenannten *Partner-Coedges* in einer Liste. Abbildung 3.27 zeigt das Merkmal der *Orientierbarkeit* am Beispiel dreier aneinandergrenzender Würfel. Alle Flächennormalen zeigen nach aussen. Coedges sind im mathematisch positiven Sinn um die Flächennormale orientiert. Grenzen zwei Teilflächen einer geschlossenen Oberfläche aneinander, so besitzen die Coedges einer gemeinsamen Kante stets entgegengesetzte Orientierung (Möbius-Gesetz).

Bestimmung von Normalenvektoren. Wie bereits erwähnt, wird eine Fläche von einer Anzahl *Loops* begrenzt. Die Orientierung von Flächenobjekten ist dabei bekannt, da ihr zugehöriger Normalenvektor definitionsgemäss gespeichert wird. Je nach Orientierung eines Loops handelt es sich um einen Teil der Fläche (Flag = *valid*), wenn der Normalenvektor des Loops in

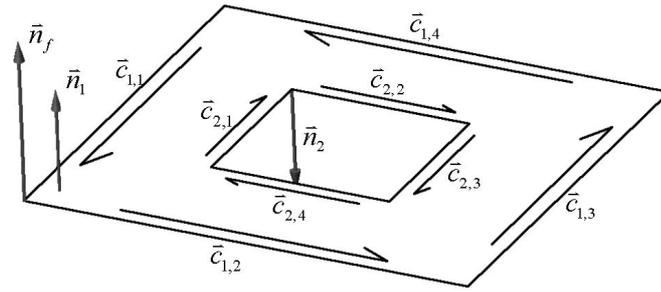


Abbildung 3.28: Identifizierung von Löchern anhand des Orientierungssinns der Flächennormalen von Loops

dieselbe Richtung wie derjenige des übergeordneten *Face* Objektes zeigt, anderenfalls um ein Loch (Flag = *hole*). Abbildung 3.28 verdeutlicht dies anhand eines Beispiels: Das Flag von Loop $L_1 := \{\vec{c}_{1,1}, \vec{c}_{1,2}, \vec{c}_{1,3}, \vec{c}_{1,4}\}$ ist zu *valid* gesetzt, da \vec{n}_f und \vec{n}_1 in dieselbe Richtung weisen. Loop $L_2 := \{\vec{c}_{2,1}, \vec{c}_{2,2}, \vec{c}_{2,3}, \vec{c}_{2,4}\}$ hingegen umrandet ein Loch, da \vec{n}_f und \vec{n}_2 antiparallel sind.

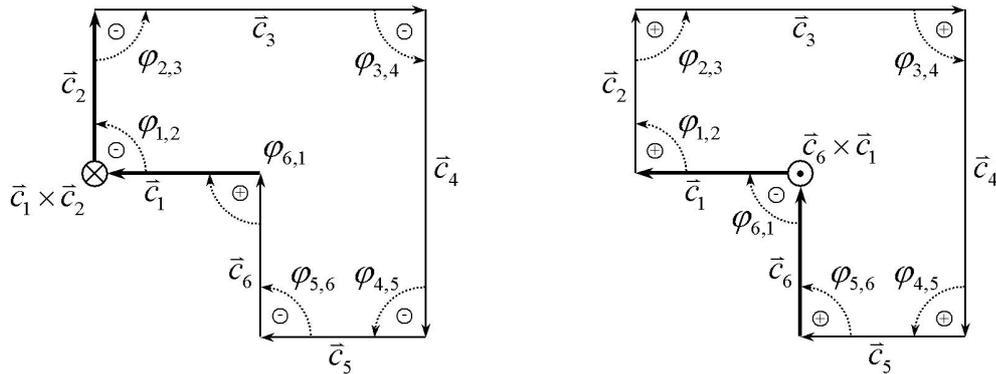


Abbildung 3.29: Konvexes oder nicht-konvexes Polygon? Fallunterscheidung bei der Bestimmung des Normalenvektors eines (ebenen) Loops durch Berechnung der Winkelsumme zwischen allen Vektoren in einer Ebene, die durch das kartesische Produkt zweier Referenzvektoren, wie z.B. $\vec{c}_1 \times \vec{c}_2$ (links) oder $\vec{c}_6 \times \vec{c}_1$ (rechts), definiert ist.

Um den Normalenvektor \vec{n} eines (ebenen), aus n Coedges \vec{c}_i ($i = 1, \dots, n$) bestehenden Polygons zu bestimmen, bildet man das Kreuzprodukt \vec{z} zweier aufeinanderfolgender Vektoren \vec{c}_i und \vec{c}_{i+1} , die nachfolgend als Referenzvektoren bezeichnet werden. Dabei ist zunächst unbekannt, ob ein *konvexes* oder ein *konkaves* Polygon vorliegt. Durch die Berechnung der Winkelsumme zwischen allen Vektoren in der Ebene, die durch das kartesische Produkt beider Referenzvektoren $\vec{z} = \vec{c}_i \times \vec{c}_{i+1}$ bestimmt ist, können beide Fälle unterschieden werden. Erhält man als Ergebnis die Summe $+2\pi$, so liegt der konvexe Fall vor und es gilt:

$$\sum_{i=1, j=i+1}^{i=n, j=1} \varphi(i, j) = +2\pi \iff \vec{n} = \vec{z} \tag{3.40}$$

Im Fall -2π sind die Referenzvektoren an einer einspringenden Ecke angeordnet und es gilt:

$$\sum_{\substack{i=n, j=1 \\ i=1, j=i+1}} \varphi(i, j) = -2\pi \iff \vec{n} = -\vec{z} \quad (3.41)$$

Entfernen flächiger Bauteilverbindungen. In einem nächsten Schritt werden diejenigen Flächen der Menge M_F , die zuvor anhand des Bauteilgraphen G_B als flächige Verbindung zwischen zwei Bauteilen des Verbindungsmodells identifiziert werden konnten, entfernt, da sie offensichtlich nicht zur Menge der Teilflächen, aus denen Luftvolumen gebildet werden können, gehören (vgl. Abb. 3.30).

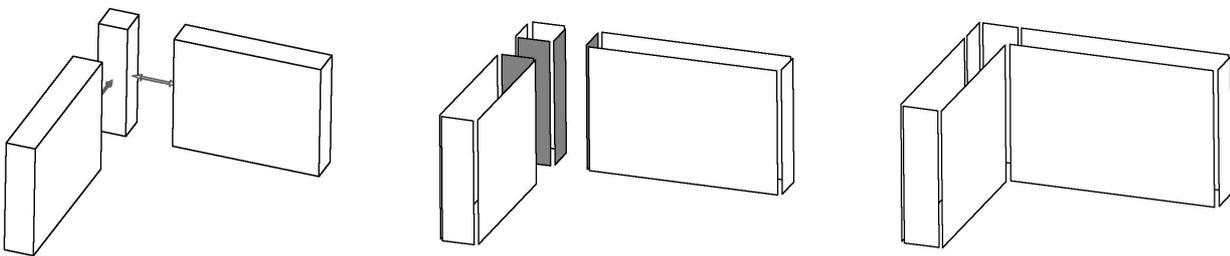


Abbildung 3.30: Löschen von flächigen Bauteilverbindungen (grau markiert), die anhand des Bauteilgraphen identifiziert wurden

Zerlegung koinzidierender Kanten. Weiterhin muss untersucht werden, ob im Modell parallele und sich überlappende Kanten vorhanden sind und diese entsprechend zerlegt werden. Dieses Vorgehen ist wichtig, da die Erkennung von Nachbarschaftsbeziehungen auf eindeutigen Verbindungen zwischen Flächen beruht.

Die Implementation wurde gelöst, indem zunächst alle Situationen mit bi-parallelen und auf derselben Gerade liegenden Kanten herausgefiltert und in jeweils einer getrennten Liste L gespeichert werden. Alle Knoten dieser Kanten werden entlang ihrer zugrundeliegenden Geraden sortiert. Hierfür aggregieren die Knoten-Objekte einen *normierten Sortier richtungsvektor*. Ihre Operatoren $<$, $>$ und $==$ sind überladen, womit die Sortierung elegant unter Verwendung der Listen-Funktionalität der Bibliothek QT , wie in Kapitel 1.4 angesprochen, vorgenommen werden kann. Zwischen aufeinanderfolgenden Knoten der sortierten Liste werden anschliessend

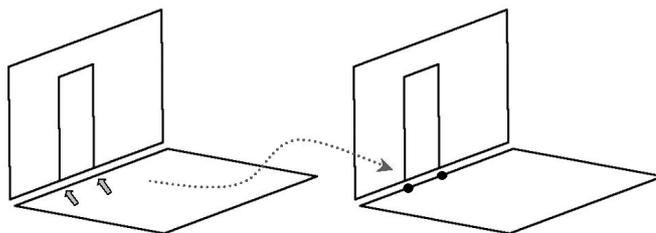


Abbildung 3.31: Zerlegung koinzidierender Polygonzüge am Beispiel einer unter einer Wand mit Türe durchlaufenden Bodenplatte

neue Kanten generiert, falls diese die in der Liste L enthaltenen Kanten schneiden. Zerfallen Kanten auf diese Weise in zwei oder mehrere Unterkanten, müssen auch die mit einer *Edge* verbundenen *Coedges* zerlegt werden, d.h. die *Loops* entsprechend erweitert werden. Abb. 3.31 zeigt als Beispiel die Flächen einer Wand mit Türe und angrenzender Bodenplatte.

Topologische Analyse von Flächen-Nachbarschaftsbeziehungen. Voraussetzung zur Analyse der Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Flächen der Menge M_F ist die Kenntnis der Relation R_{NF} des Raumflächengraphen G_F , die neben der Topologie auch abhängig von der geometrischen Anordnung der Flächen im Raum ist.

Betrachten wir zunächst die *topologischen* Beziehungen anhand eines Beispiels: Abbildung 3.32 zeigt das Modell eines Innenraumvolumens mit innenliegender Stütze und den dazugehörigen Graphen G_F , der die Verbindung aller Flächen über ihre gemeinsamen Kanten beschreibt. Den Knoten des Graphen (Abb. 3.32 rechts) entsprechen Flächen im Modell (Abb. 3.32 links). Der Innenraumkörper des Beispiels besteht aus zehn Flächen, wobei zwei dieser Flächen Löcher enthalten. Dementsprechend ist beispielsweise die Deckenfläche zu acht Flächen benachbart (den vier Aussenwänden und den vier Seitenflächen der Stütze); im Graphen entspricht dies dem Äquivalent 'Knoten mit acht Verbindungen'.

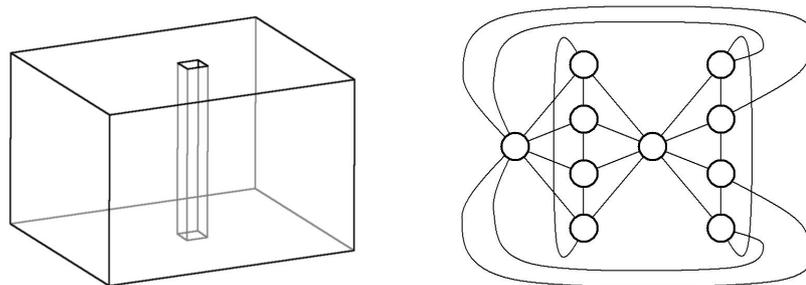


Abbildung 3.32: Raumflächengraph eines Innenraumvolumens mit innenliegender Stütze

Im Sinne der Graphentheorie sind nun Teilmengen von *Zusammenhangskomponenten* des Graphen zu extrahieren. Ausgehend von einer Relation $R_{F,a} \subseteq M_F \times M_F$, die die Verbindungen zwischen *allen* Flächen über gemeinsame Kanten im Modell definiert, gilt offensichtlich, dass ein Raum eine derartige Teilmenge sein muss, andererseits nicht jede Zusammenhangskomponente einen Raum darstellt. Als *topologisches Kriterium* dafür, dass eine Zusammenhangskomponente einen Raum darstellt, gilt,

- dass sie keine 'hängenden Edges' hat, also Edges, die nur von einem Face berührt werden.
- Jede Kante einer Fläche im Modell muss genau eine Verbindung zu einer anderen Fläche aufweisen und zwischen je zwei Knoten im Graphen, d.h. jedem Face im Modell, muss ein Pfad existieren.

Die gesuchten Zusammenhangskomponenten müssen folglich *einfach zyklisch zusammenhängend* sein; ein *einfacher Zusammenhang* reicht nicht aus. Die Untergraphen sind *echte Blöcke* und somit frei von *Artikulationsknoten*.

Geometrische Analyse von Flächen-Nachbarschaftsbeziehungen. Als *geometrisches Kriterium* bei der Analyse der Nachbarschaftsverhältnisse kommt hinzu, dass eine Zusammenhangskomponente ein 'jeweils kleinstes Volumen' umschließt.

- Es ergibt sich die Frage nach der Gültigkeit der Flächenorientierung zweier benachbarter Flächen und,
- da die Menge der kleinsten Innenraumvolumina aus dem Modell extrahiert werden soll, nach der unmittelbar nächsten Nachbarfläche, sollten mehr als zwei Flächen an eine Kante angrenzen.

Die Frage der Orientierung ist schnell beantwortet, da, wie bereits erwähnt, nach Möbius Coedges an einer gemeinsamen Kante unterschiedlich orientiert sein müssen [31]. Dies impliziert die Bildung einer weiteren Relation $R_{F,o} \subseteq M_F \times M_F$, die die Übereinstimmung der Orientierung zwischen zwei benachbarten Flächen definiert und somit die Relation $R_{F,a}$ erweitert. Es gilt

$$R_{F,o} := \{(f_i, f_j) \in M_F \times M_F \mid \bigvee_{\vec{c}_a \in t f_i} \bigvee_{\vec{c}_b \in t f_j} (\vec{e}(\vec{c}_a) = \vec{e}(\vec{c}_b) \wedge \vec{c}_a = -\vec{c}_b)\} \quad , \quad (3.42)$$

d.h. für ein geordnetes Paar (f_i, f_j) gibt es in beiden Flächen jeweils eine Coedge, die beide über eine gemeinsame Kante \vec{e} verfügen und entgegengesetzt orientiert sind.

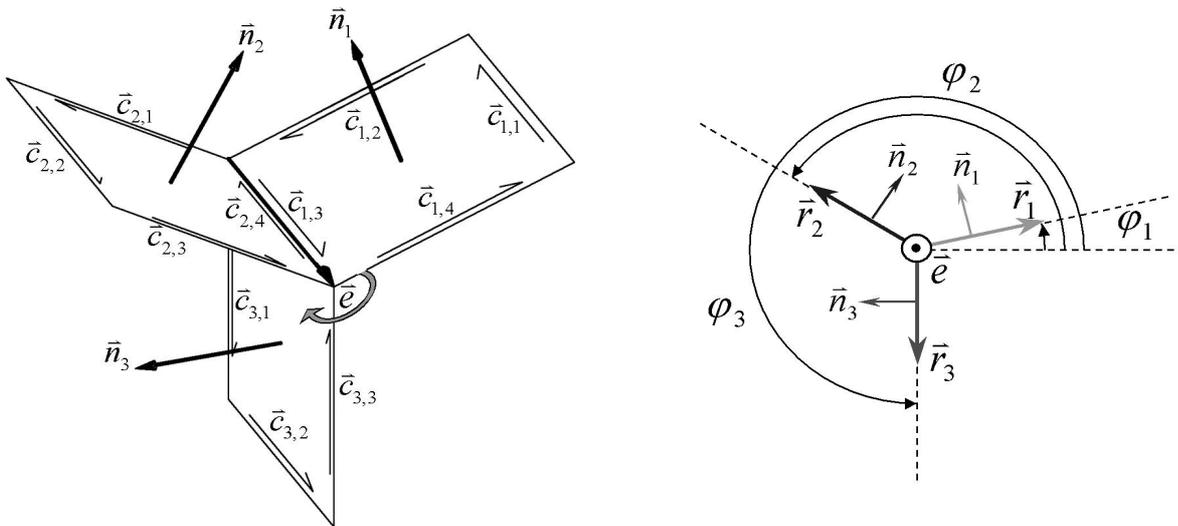


Abbildung 3.33: Analyse der räumlichen Anordnung von Coedges um gemeinsame *Radial-Edge* \vec{e}

Um im Falle mehrerer an eine Kante grenzender Flächen zu entscheiden, welche Fläche im Sinne des kleinsten Volumens die Nächste ist, wird die Besonderheit der *Radial-Edge* Datenstruktur verwendet. Dabei werden die *Partner-Coedges* im mathematisch negativen Sinn um die jeweils gemeinsamen Edges angeordnet. Dazu definieren wir für jede Coedge einen sogenannten *Radial-Edge-Vektor* \vec{r}_i , der als kartesisches Produkt aus dem Coedge-Vektor \vec{c}_i und dem Normalenvektor des zugrundeliegenden Loops \vec{n}_i erhalten wird. Der Vektor zeigt von der Edge \vec{e} in die betrachtete Fläche. Definition (Rechtssystem):

$$\vec{r}_i := \vec{n}_i \times \vec{c}_i \quad (3.43)$$

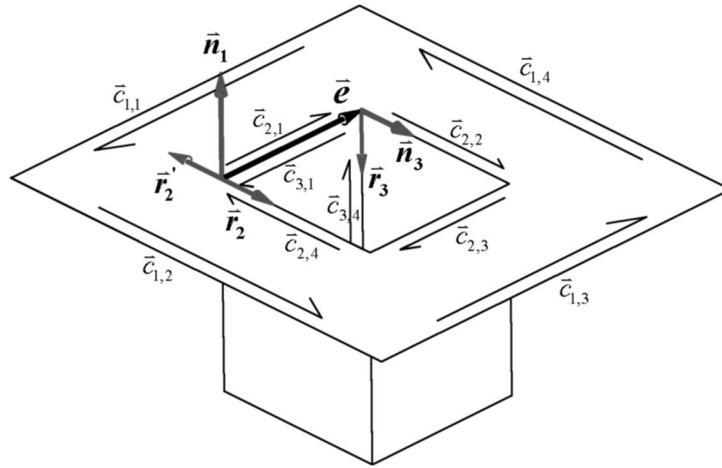


Abbildung 3.34: Situation 'Platte mit Loch', Erläuterungen siehe Text.

Handelt es sich bei dem Loop um ein Loch in einer Fläche, muss der Orientierungssinn invertiert werden (vgl. Abb. 3.34). Das Nachbarschaftsproblem ist somit anschaulich auf zwei Dimensionen reduziert worden. Ausgehend von einem als Referenz definierten Vektor \vec{r}_i können die Winkelbeziehungen zwischen allen Nachbarflächen ermittelt und die Liste der Partner-Coedges entsprechend sortiert werden. Dies wurde softwaretechnisch, ähnlich zu der oben beschriebenen Methodik, ebenfalls mit Hilfe des Überladens von Operatoren realisiert, indem die Coedge-Objekte 'wissen', wann sie 'größer' bzw. 'kleiner' als ihre Partner oder 'gleich' sind.

Abbildung 3.33 zeigt exemplarisch eine Kante \vec{e} mit drei angrenzenden Flächen. Die entsprechend sortierte Liste der Partner-Coedges ergibt sich hier zu $\{\vec{c}_{1,3}, \vec{c}_{3,4}, \vec{c}_{2,4}\}$. Abbildung 3.34 kann das Beispiel einer Situation 'Platte mit Loch' entnommen werden. Die *Partner-Coedge* Liste der gemeinsamen Kante \vec{e} enthält dabei die beiden Coedges $\vec{c}_{2,1}$ und $\vec{c}_{3,1}$, wobei erstere zu einem Loch gehört, das durch die Coedges $\{\vec{c}_{2,1}, \vec{c}_{2,2}, \vec{c}_{2,3}, \vec{c}_{2,4}\}$ beschrieben wird. Im Bild eingezeichnet sind die zugehörigen *Radial-Edge* Vektoren $\vec{r}_2 = \vec{n}_2 \times \vec{c}_{2,1}$ und $\vec{r}_3 = \vec{n}_3 \times \vec{c}_{3,1}$. (Der Normalenvektor \vec{n}_2 verläuft antiparallel zu \vec{n}_1 .) Da es sich bei *Loop 2* um ein Loch handelt, muss der *Radial-Edge* Vektor \vec{r}_2 hier zu \vec{r}_2' invertiert werden, um in die Struktur zu zeigen.

Dieses geometrische Kriterium kann in einer *gewichteten Relation* $R_{F,w} \subseteq M_F \times M_F$ ausgedrückt werden, die das Nachbarschaftsverhältnis im Sinne der jeweiligen geometrischen Situation bewertet. Die Relation ist antireflexiv, d.h. schlingenfrei. Aus dem einfachen Graphen entsteht dabei ein schlichter, d.h. ein *gerichteter Graph*, vgl. Abb. 3.35 Mitte. Die Relation $R_{F,w}$ kann anhand Gl. (3.44) formal definiert werden, wenn wir unter einem Winkel $\varphi = \angle_{\vec{a}}(\vec{b}, \vec{c})$, mit $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, den Winkel zwischen zwei Vektoren \vec{b} und \vec{c} in der Ebene normal zu \vec{a} verstehen, wenn der Vektor \vec{b} mit einer Rechtsdrehung in den Vektor \vec{c} gedreht wird.

$$R_{F,w} := \{(f_i, f_j) \in M_F \times M_F \mid (w_{i,j} = \min)\} \quad (3.44)$$

Die *Bewertungsmenge* der Elemente $w_{i,j} \in W_{F,w}$ ist dabei folgendermassen definiert:

$$W_{F,w} := \{w_{i,j} = \angle_{\vec{c}_a}(\vec{r}_a, \vec{r}_b) \mid \bigvee_{\vec{c}_a \in t f_i} \bigvee_{\vec{c}_b \in t f_j} (\vec{e}(\vec{c}_a) = \vec{e}(\vec{c}_b))\} \quad (3.45)$$

Zerlegung in Zusammenhangskomponenten. Der Raumflächengraph $G_F = (M_F; R_{NF})$ kann nun gebildet werden, indem die topologischen und geometrischen Kriterien miteinander *verkettet* werden (vgl. Abschnitt 3.1.1.2):

$$R_{NF} := R_{F,o} \circ R_{F,w} \subseteq M_F \times M_F \quad (3.46)$$

Betrachten wir erneut das Beispiel aus Abb. 3.33, wobei drei Flächen f_1, f_2 und f_3 um eine gemeinsame Kante angeordnet sind. Die Relation $R_{F,o}$ beschreibt das Merkmal gleicher Orientierung bei benachbarten Flächen. Durch Aneinanderfügen der Flächen f_2 und f_3 kann offensichtlich kein Teil der Oberfläche eines Volumenkörpers generiert werden. Die Relation $R_{F,w}$ bewertet die geometrische Anordnung der Flächen hinsichtlich ihrer Winkelbeziehungen. Im Beispiel seien die Winkel $\varphi_1 = 30^\circ$, $\varphi_2 = 150^\circ$ und $\varphi_3 = 260^\circ$, somit $\delta\varphi_{1,2} = 120^\circ$ und $\delta\varphi_{2,3} = 110^\circ$. Das Kriterium der Orientierbarkeit vernachlässigend, würde sich der nächste Nachbar für Fläche f_3 zu f_2 und nicht zu f_1 ergeben, da $110^\circ < 230^\circ$. Die *Verkettung* R_{NF} beider Relationen liefert wieder einen symmetrischen, antireflexiven, ungewichteten Graphen.

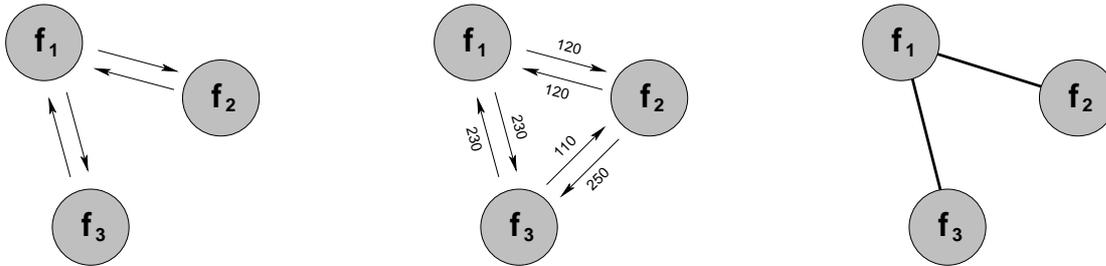


Abbildung 3.35: Visualisierung der Relationen $R_{F,o}$ (links), $R_{F,w}$ (Mitte) und R_{NF} (rechts) anhand des Beispiels aus Abb. 3.33. Die Relation $R_{F,o}$ beschreibt dabei, ob Flächen benachbart und ihre *Coedges* entgegengesetzt orientiert sind, die Relation $R_{F,w}$ bewertet ihre geometrische Anordnung. Als Ergebnis der *Verkettung* erhält man R_{NF} .

Schliesslich wird der Graph G_F mit Hilfe der *einfachen Zusammenhangsrelation* Z_{NF} , nämlich der *reflexiv-transitiven Hülle* der Relation $R_{NF} \subseteq M_F \times M_F$, in n einfache *Zusammenhangsklassen* $[\lambda_i]$ (mit $i = 1, \dots, n$) zerlegt. Der *Stabilitätsindex* s ist dabei nach Gl. (3.9) definiert.

$$Z_{NF} := R_{NF}^* = I \sqcup R_{NF} \sqcup R_{NF}^2 \sqcup \dots \sqcup R_{NF}^s \subseteq M_F \times M_F \quad (3.47)$$

Nun kann die *Abbildung* Φ_{AV} der Menge M_F auf die *Quotientenmenge* M_{AV} und somit der *reduzierte Graph* $G_{AV} = (M_{AV}; R_R)$, den wir als *Raumgraphen* bezeichnen wollen, bestimmt werden:

$$\Phi_{AV} : M_F \longrightarrow M_{AV} \quad \text{mit} \quad M_{AV} = \frac{M_F}{Z_{NF}} \quad (3.48)$$

$$R_R = \Phi_{AV}^T R_{NF} \Phi_{AV} \quad (3.49)$$

Handelt es sich bei einem durch einen Repräsentanten λ_i bestimmten Untergraphen um eine *elementare zyklische Zusammenhangskomponente*, d.h. der Untergraph enthält nur *Zyklus-* und keine *Brückenkanten*, liegt eine geschlossene Oberfläche vor.

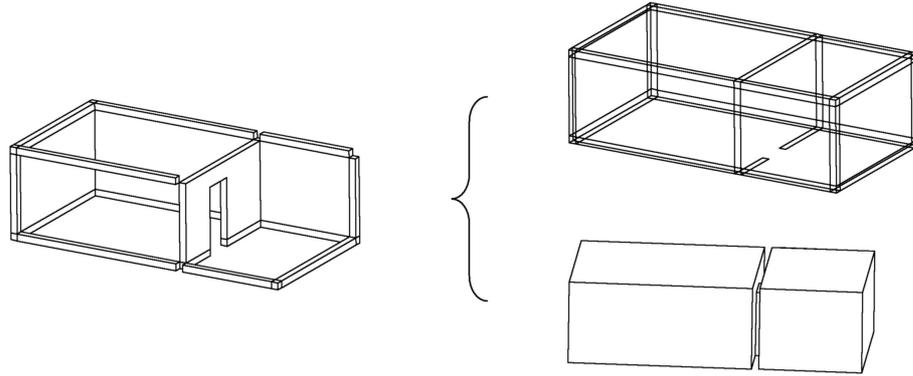


Abbildung 3.36: Extraktion des Luftvolumens zweier Räume, verbunden durch offene Türen, **links**: Teile des zerlegten Verbindungsmodells; **rechts oben**: ungültiges Innenraumvolumen (Halbraum), **rechts unten**: gültiges Innenraumvolumen

Analyse der B-rep Volumenkörper. Auf den ersten Blick möchte man glauben, dass der Algorithmus ausschliesslich die Menge aller Innenraumvolumen findet. Abbildung 3.36 zeigt exemplarisch, dass neben einem 'gültigen' Innenraumvolumen aber auch die *Hüllfläche* des Modells als Ergebnis erhalten wird. Die Hüllfläche entspricht dabei einem Halbraum, da die Flächennormalen nach innen zeigen. Anhand des berechneten Volumens $V([\lambda_i])$ der Körper $[\lambda_i]$ können beide Typen unterschieden werden. Da Volumina in *ACIS* über den *Gaußschen Integralsatz* berechnet werden, wird bei der numerischen Integration das Volumen- durch ein Flächenintegral ersetzt, womit im Falle nach aussen zeigender Normalenvektoren (Halbraum) als Indikator ein (endlicher) negativer Wert für das Volumen erhalten wird.

Die Menge M_{AV} wird deshalb unterteilt in die Menge der *gültigen* Innenraumvolumina $M_{AV,valid}$, die Menge der *ungültigen* Innenraumvolumina $M_{AV,invalid}$ und die Menge der *nicht geschlossenen* Innenraumvolumina $M_{AV,incomplete}$. In Fällen, in denen die Anzahl der Elemente der Menge $M_{AV,incomplete}$ grösser als Null ist, sprechen wir von *Modellierungsfehlern*. Es gilt:

$$M_{AV} = M_{AV,valid} \cup M_{AV,invalid} \cup M_{AV,incomplete} \quad (3.50)$$

Die Zuordnung zu den Mengen ihrer Zusammenhangsklassen erfolgt durch Bildung der reflexiv-transitiven Hülle der Adjazenzrelation für Zyklusanten $R_{NF,Z}^*$:

$$\begin{aligned} [\lambda_i] \in M_{AV,valid} &\iff \lambda_i \lambda_i^T \sqsubseteq R_{NF,Z}^* \quad \wedge \quad V([\lambda_i]) > 0 \\ [\lambda_i] \in M_{AV,invalid} &\iff \lambda_i \lambda_i^T \sqsubseteq R_{NF,Z}^* \quad \wedge \quad V([\lambda_i]) < 0 \\ [\lambda_i] \in M_{AV,incomplete} &\iff \text{sonst} \end{aligned} \quad (3.51)$$

In diesem Sinne kann eine geschlossene Oberfläche durch einen *einfach zyklisch zusammenhängenden Graphen* bezeichnet werden, wenn oben genannte topologische und geometrische Kriterien hinsichtlich der Definition starrer Körper nach Abschnitt 3.1.2 erfüllt werden. Oberflächen können als *geschlossen* identifiziert werden, Flächen besitzen eine *Orientierung* (Möbius) und es kann ausgeschlossen werden, dass Flächen *sich selbst schneiden*, d.h. eine Klein'sche Flasche kann nicht konstruiert werden.

Algorithmus. Die einzelnen Schritte können nun in folgendem Algorithmus zusammenfassend dargestellt werden:

Algorithmus A-2 Bestimmung des Raumflächen- und des Raumgraphen G_F und G_{AV}

- 1: Kopiere alle *Faces* aller in M_B enthaltenen Körper nach M_F
 - 2: **for all** *Faces* $f_i \in M_F$ **do**
 - 3: Lösche f_i , falls Teil einer flächigen Bauteilverbindung in G_B
 - 4: Invertiere Orientierung von f_i : $\vec{n}_i = -\vec{n}_i$
 - 5: Kollabiere f_i in *Radial-Edge* Datenstruktur
 - 6: Berechne \vec{n}_j aller *Loops* $l_j \in_t f_i$, setze *Flag* zu *valid* falls $\vec{n}_i = \vec{n}_j$ bzw. zu *hole* sonst
 - 7: **end for**
 - 8: Zerlege koinzidierende Kanten aller Flächen $f_i \in M_F$ und damit verbundene *Coedges*
 - 9: Bilde Relation $R_{F,o}$ nach Gl. (3.42)
 - 10: Bestimme *Radial-Edge* Vektoren \vec{r}_i aller *Edges*
 - 11: Bilde Relation $R_{F,w}$ nach Gl. (3.44) mit Bewertungsmenge $W_{F,w}$ nach Gl. (3.45)
 - 12: Verkette Relationen $R_{NF} = R_{F,o} \circ R_{F,w}$
 - 13: \Rightarrow **Bestimme Raumflächengraphen** $G_F = (M_F; R_{NF})$
 - 14: Bilde einfache Zusammenhangsrelation $Z_{NF} = R_{NF}^*$
 - 15: Führe Zerlegung durch: $[\lambda] = Z_{NF}\lambda$
 - 16: Bestimme Abbildung $\Phi_{AV} : M_F \longrightarrow M_{AV}$
 - 17: Berechne $R_R = \Phi_{AV}^T R_{NF} \Phi_{AV}$
 - 18: \Rightarrow **Bestimme Raumgraphen** $G_{AV} = (M_{AV}; R_R)$
 - 19: Ordne Körper $[\lambda_i]$ nach Gl. (3.51) den Zusammenhangsklassen M_{AV} zu.
-

Implementierung. Da die zur Umsetzung der oben beschriebenen Algorithmik benötigten Matrixoperationen sehr rechenzeitintensiv sind, wurde die Zerlegung des kollabierten Modells in einfache Zusammenhangskomponenten effizient umgesetzt, indem diese, die objektorientierte Datenstruktur nutzend, als *Tiefensuche* implementiert wurde. Anschaulich soll dieser Algorithmus wieder am Beispiel aus Abbildung 3.32 erläutert werden.

Beginnend mit einer Fläche im Modell kann durch die rekursive Analyse der Nachbarschaftsbeziehungen festgestellt werden, ob es sich bei einer gefundenen Menge zusammenhängender Flächen um eine geschlossene oder nicht-geschlossene Oberfläche handelt. Als Hilfsmittel zur rekursiven Suche wird der Zustand von *Faces* und *Coedges* mit Hilfe von *Flags* gekennzeichnet. Vor einer Analyse besitzen *Faces* den Status *free* und *Coedges* den Zustand *void*. Beginnend bei einem *Face*, dessen vorübergehend belegter Zustand als *tmp_occupied* bezeichnet wird, wird analysiert, an welchen Kanten eines *Loops* benachbarte *Loops* anderer Flächen gefunden werden können. Mögliche Verbindungen können dabei den Partner-*Coedge* Listen entnommen werden, wobei die genannten geometrischen und topologischen Kriterien erfüllt werden müssen. *Coedges* können dazu einen Zustand *tmp_occupied*, *connected* oder *leaf* annehmen, je nachdem, ob sie eine gültige Verbindung darstellen oder nicht.

Im Falle einer gültigen Verbindung wird die Rekursion in der benachbarten Fläche fortgesetzt, falls diese nicht als belegt gekennzeichnet ist. Am Ende einer Rekursion zeigen die als zusammenhängend identifizierten Flächen einen Zustand *closed_brep* oder *incomplete_brep*, abhängig davon, ob die Oberfläche geschlossen ist oder nicht. Eine Oberfläche gilt dabei als geschlossen,

wenn alle Coedge-Verbindungen den Status *connected* aufweisen können. Die Menge der Einzelflächen wird anschliessend zu einem neuen Luftvolumenkörper zusammengefügt und dieser in die *ACIS*-Struktur eingebettet. Der Algorithmus wird solange fortgesetzt, bis alle Flächen im Modell als belegt gekennzeichnet sind.

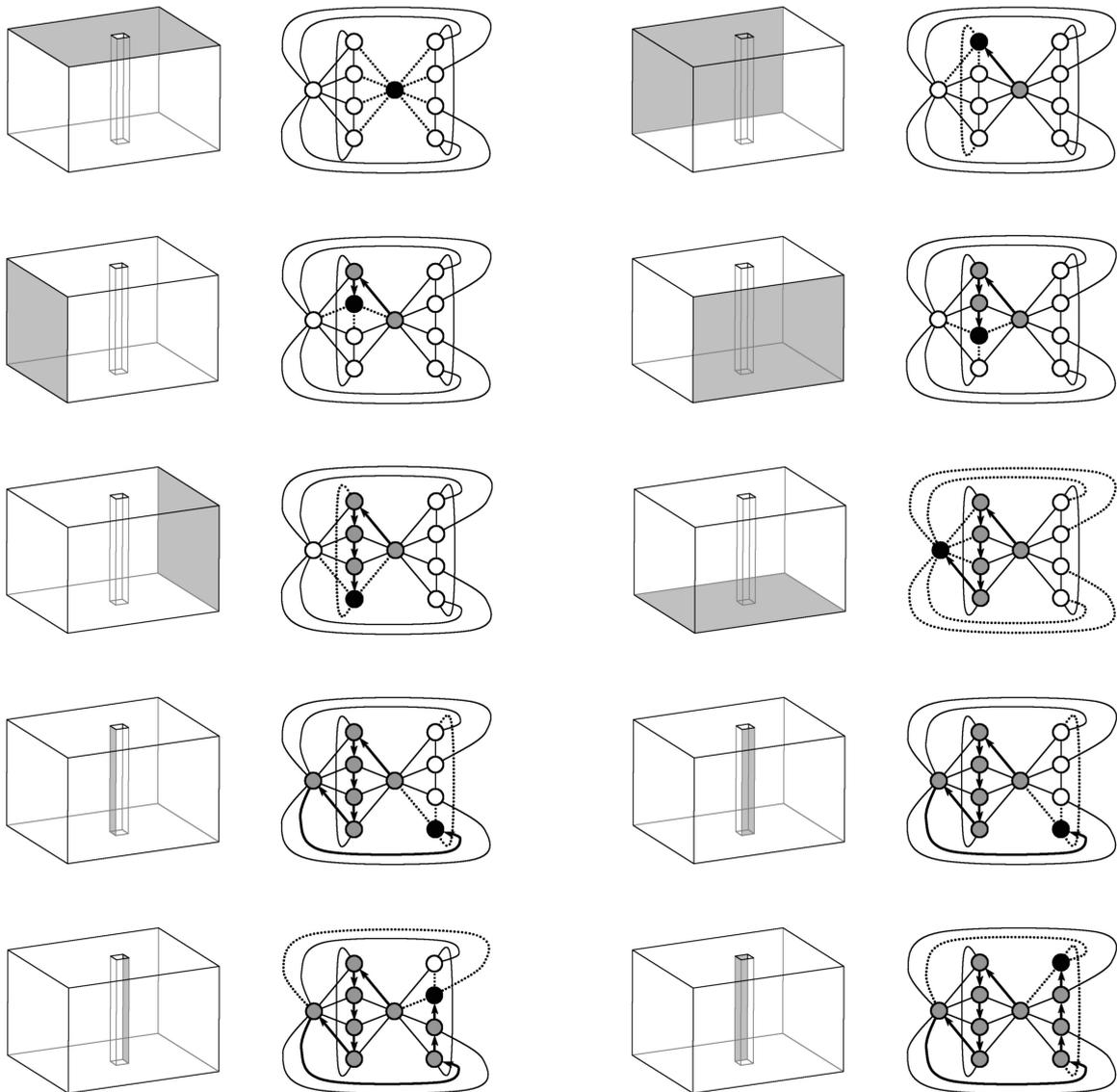


Abbildung 3.37: Von links oben nach rechts unten: Rekursive Analyse der Raumtopologie

Abbildung 3.37 zeigt die Tiefensuchfolge anhand des Beispiels des Innenraumvolumens mit innenliegender Stütze: Besitzt ein Knoten einen noch nicht aufgesuchten 'Nachfolger', so wird die Rekursion im Nachbarobjekt fortgesetzt. Besitzt ein Knoten keinen 'noch nicht aufgesuchten Nachbarn' mehr, so wird die Rekursion in das jeweilige Ausgangsobjekt zurückgeführt, wie in Abbildung 3.38 dargestellt.

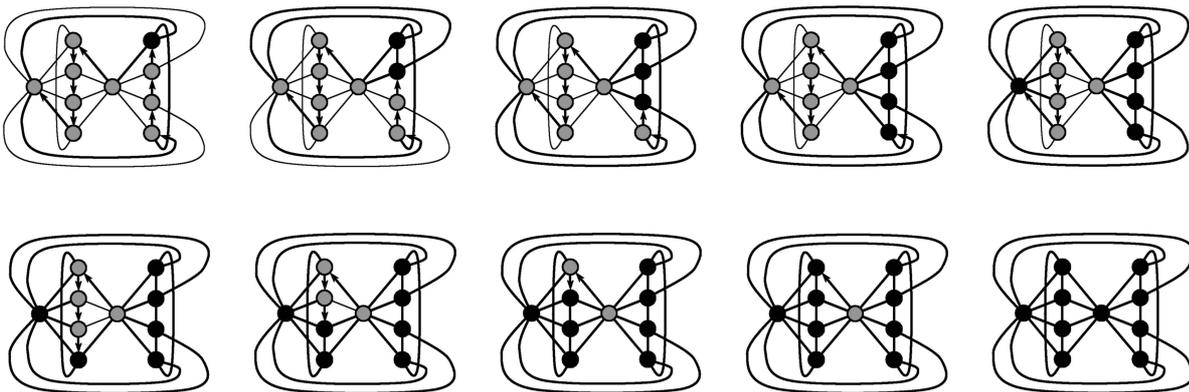


Abbildung 3.38: Rückführung der Rekursion, nachdem alle Nachbarschaftsbeziehungen analysiert und somit alle zusammenhängenden Flächen gekennzeichnet worden sind

3.4.5 Komplexes Anwendungsbeispiel zur Zerlegung

Der Zerlegungsprozess soll nun anhand eines der Stockwerke des in Abschnitt 3.3.4 vorgestellten komplexen Referenzgebäudes bildhaft demonstriert werden. Abbildung 3.39 zeigt das Ausgangsmodell (ohne Deckenplatte), das von der IFC-Datei im Sinne von Abschnitt 3.3 abgeleitet wurde. In Abbildung 3.40 ist (der Übersichtlichkeit halber nur) ein Teil des Verbindungsmodells dargestellt. Entsprechend der Raumaufteilung dieses Stockwerkes werden mit Hilfe der graphentheoretischen Analyse die B-rep Körper von vier Luftvolumina als zentrales Ergebnis erhalten, wie in Abbildung 3.41 ersichtlich ist.

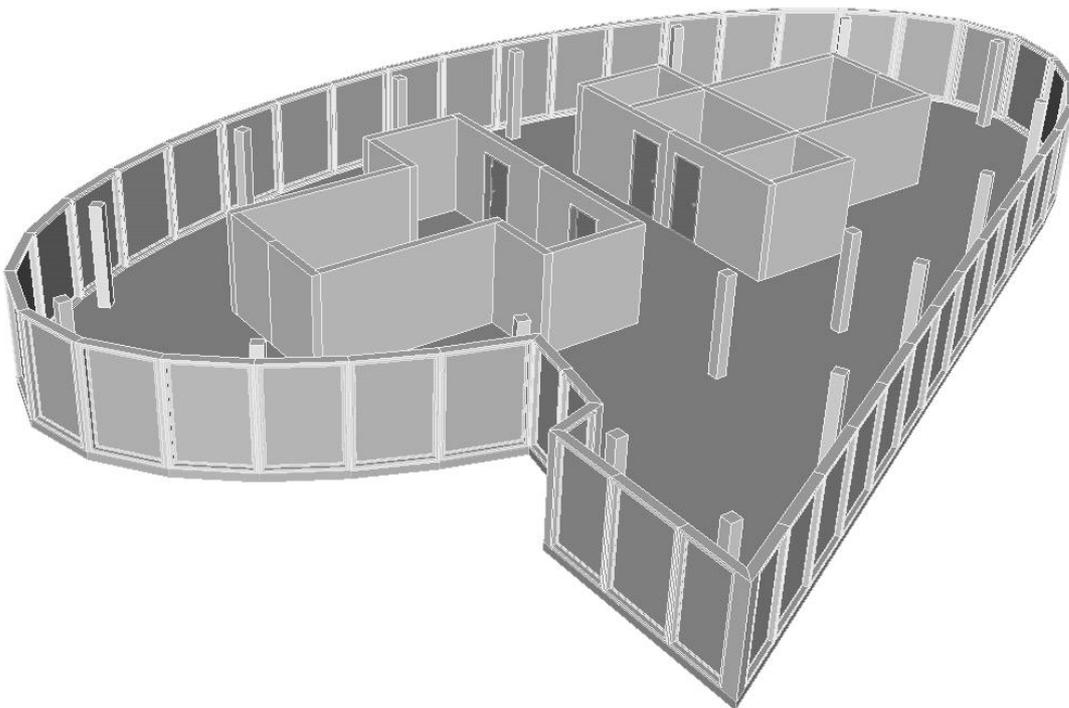


Abbildung 3.39: Ausgangsmodell: Einzelnes Stockwerk des Referenzgebäudes aus Abschnitt 3.3.4.

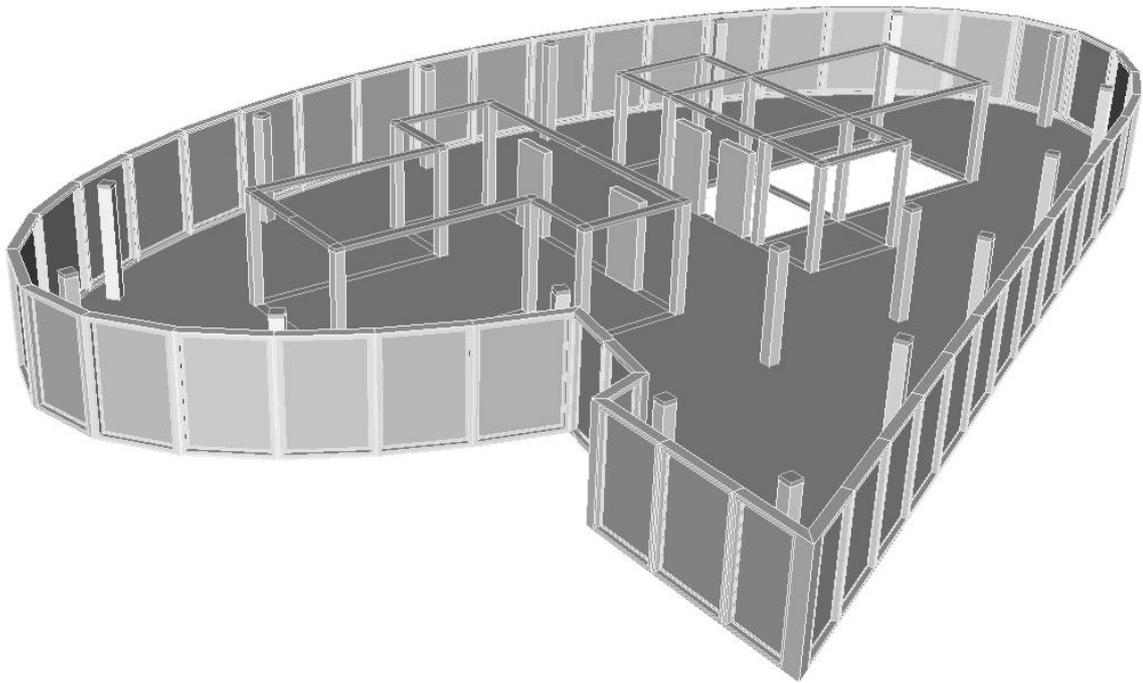


Abbildung 3.40: Auszugsweise Darstellung des Verbindungsmodells.

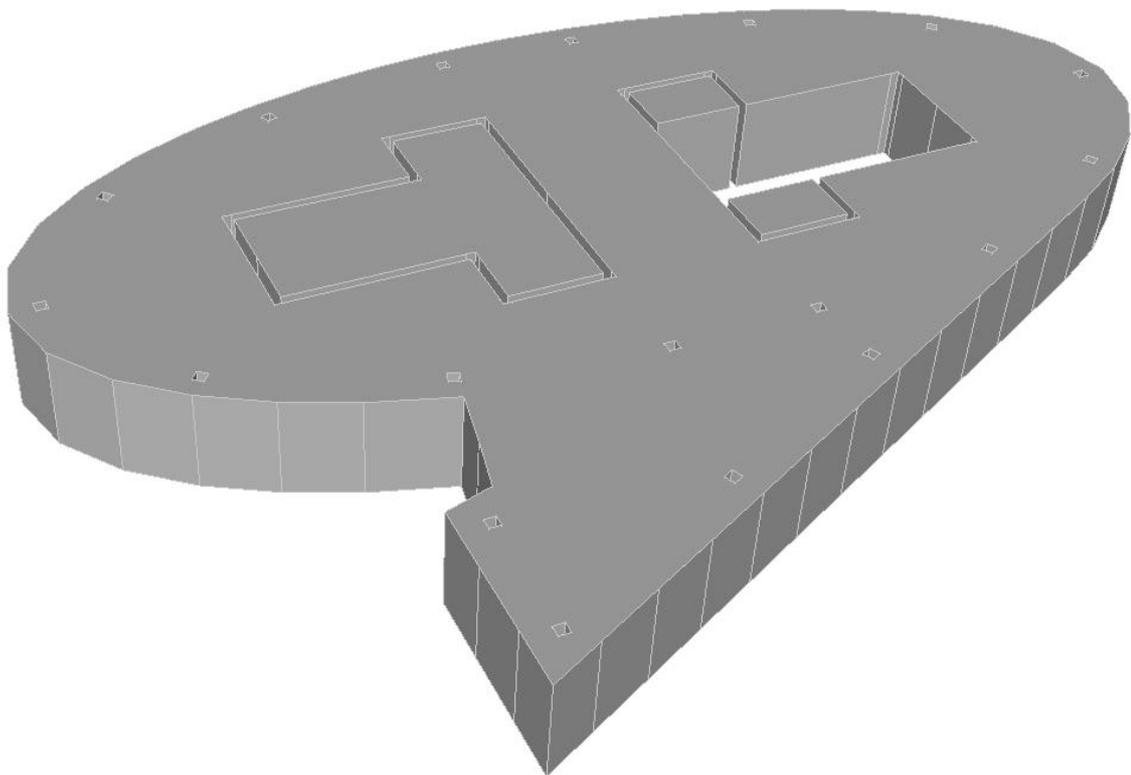


Abbildung 3.41: Aufgrund der Raumaufteilung werden vier Luftvolumina erhalten: Drei im Inneren und das 'Bürovolumen', das einen nicht-konvexen B-rep Körper darstellt, der von mehreren Objekten durchdrungen wird.

3.5 Randbedingungen und Diskretisierung

Mit der zuvor beschriebenen Zerlegung des geometrischen Modells ist es nun möglich, Bauteile zu identifizieren und mit den gewonnenen Luftvolumina in Beziehung zu setzen. Die folgenden Abschnitte gehen auf die Zonierung und die Vernetzung der Raumlufkörper ein, die beide als Voraussetzungen für die Diskretisierung der unterschiedlichen Rechengebiete und für die Kopplung zwischen Mehrzonen- und Strömungsmodell dienen. Zur numerischen Simulation ist es weiterhin erforderlich, beide Modelle mit entsprechenden Randbedingungen zu versehen, dies wird in den Abschnitten 3.5.2 und 3.5.4 beschrieben.

3.5.1 Identifizierung von Bauteilen

In Abschnitt 3.4 wurden durch die Zerlegung des Bauwerksmodells in ein Verbindungsmodell der Bauteilgraph G_B , und durch die anschließende Extrahierung der Raumlufvolumina, d.h. der einfachen zyklischen Zusammenhangskomponenten des Raumflächengraphen G_F , der Raumgraph G_{AV} gewonnen. Die Kenntnis dieser Daten ermöglicht es nun anschaulich, Wände als *Aussenwände*, *zonenbenachbarte Wände* oder *Innenwände* zu identifizieren.

Inzidenz. Die Nachbarschaftsverhältnisse zwischen der Menge der Raumlufvolumina M_{AV} und den Bauteilen der Menge der Differenzobjekte M_D können in einer heterogenen binären Relation R_I ausgedrückt und somit der Graph G_I (*die 'Inzidenz'*) nach Gl. (3.31) aufgestellt werden. Unter der Annahme ebener Flächen f_a und f_b beschreibt Gl. (3.52), dass es genau dann ein geordnetes Paar $(b_i, [\lambda_j])$ eines Bauteils $b_i \subset M_B$ und eines Luftvolumens $[\lambda_j] \subseteq M_{AV}$ gibt, wenn sich beide Objekte flächig berühren, d.h. beide Normalenvektoren antiparallel und die Mengen der Kanten \vec{e} beider Flächen äquivalent sind.

$$R_I := \{ (b_i, [\lambda_j]) \in M_B \times M_{AV} \mid \bigvee_{f_a \in t b_i} \bigvee_{f_b \in t [\lambda_j]} (\vec{n}_a = -\vec{n}_b \wedge \bigwedge_{\vec{e} \in t f_a} \vec{e} \in t f_b \wedge \bigwedge_{\vec{e} \in t f_b} \vec{e} \in t f_a) \} \quad (3.52)$$

Typisierung. Für die Generierung eines Modells für die thermische Gebäudesimulation ist es wichtig, die an die Luftvolumina grenzenden Bauteile und somit die Schnittstellen zwischen Bauteilen und Luftvolumina zu charakterisieren. Unter 'Bauteilen' wollen wir hier Objekte des Differenzmodells $M_D \subseteq M_B$ verstehen und die Objekte des Kopplungsmodells M_K hinsichtlich der Mehrzonenmodellierung vernachlässigen. Anschaulich entspricht dieses Vorgehen einer Verwendung des Innenmassbezuges für die thermische Simulation. Dies impliziert einen Fehler, der vom Autor in [193] quantifiziert wurde. Der Einfluss geometrischer Wärmebrücken kann in einer Simulation dabei durch Verwendung linienbezogener Wärmebrückenverlustkoeffizienten berücksichtigt werden, vgl. [39, 58, 87, 108, 123, 170] und Normen [55, 148].

Die Typisierung wurde softwaretechnisch umgesetzt, indem Bauteile der Menge M_D eines der *Volumenattribute* $\{outside, interzonal, interior, exterior, invalid\}$ annehmen können, je nachdem, ob es sich um ein nach aussen grenzendes (Aussenwand), zwischen zwei Zonen liegendes, innerhalb einer Zone liegendes (Innenwand), komplett aussenliegendes oder ein nicht geschlossenes Luftvolumen berührendes Bauteil handelt. Als *Flächenattribute* stehen die Werte $\{ambient, airvolume, invalid, none\}$ zur Verfügung, um den Typ des Interfaces festzulegen. Mit Kenntnis der Relation $R_I \subseteq M_B \times M_{AV}$ kann der Algorithmus zur Typisierung der Bauteile $M_D \subseteq M_B$ nach Alg. 3 formuliert werden.

Algorithmus A-3 Charakterisierung von Bauteilen der Menge M_D

```

1: for all Zusammenhangskomponenten  $[\lambda_i] \in M_{AV}$  do
2:   for all Bauteile  $d_j \subset M_D$  mit  $d_j \lambda_i^T \sqsubseteq R_I$  do
3:     Bestimme Fläche  $\{f_b \mid f_a \in_t [\lambda_i] \wedge f_b \in_t d_j \wedge \vec{n}_a = -\vec{n}_b\}$ 
4:     if  $\lambda_i \subset M_{AV,valid}$  then
5:       Setze Flächenattribut  $a(f_b)$  von  $d_j$  zu airvolume
6:     else if  $\lambda_i \subset M_{AV,incomplete}$  then
7:       Setze Flächenattribut  $a(f_b)$  von  $d_j$  zu invalid
8:     end if
9:   end for
10: end for
11: for all Bauteile  $d_i \subset M_D$  do
12:   Bestimme die Schichtoberflächen  $f_a, f_b \in_t d_i$ 
13:   if Flächenattribut  $a(f_a) = invalid \vee a(f_b) = invalid$  then
14:     Setze Volumenattribut  $v(d_i) = invalid$ 
15:   else if  $a(f_a) = airvolume \wedge a(f_b) = \emptyset$  then
16:     Setze Flächenattribut  $a(f_b) = ambient$ 
17:     Setze Volumenattribut  $v(d_i) = outside$ 
18:   else if  $a(f_a) = \emptyset \wedge a(f_b) = airvolume$  then
19:     Setze Flächenattribut  $a(f_a) = ambient$ 
20:     Setze Volumenattribut  $v(d_i) = outside$ 
21:   else if  $a(f_a) = airvolume \wedge a(f_b) = airvolume$  then
22:     if  $|d_i^T R_I| = 1$  (d.h.  $f_a$  und  $f_b$  grenzen an dasselbe  $[\lambda]$ ) then
23:       Setze Volumenattribut  $v(d_i) = interior$ 
24:     else
25:       Setze Volumenattribut  $v(d_i) = interzonal$ 
26:     end if
27:   else if  $a(f_a) = \emptyset \wedge a(f_b) = \emptyset$  then
28:     Setze Flächenattribute  $a(f_a) = a(f_b) = none$ 
29:     if  $M_{AV,valid} \cap d_i = d_i$  (d.h.  $d_i$  ist in einem der Elemente von  $M_{AV,valid}$  enthalten) then
30:       Setze Volumenattribut  $v(d_i) = interior$ 
31:     else
32:       Setze Volumenattribut  $v(d_i) = exterior$ 
33:     end if
34:   end if
35: end for

```

3.5.2 Zonierung

Sind die Beziehungen zwischen Bauteilen und Luftvolumen und die Semantik der Bauteile bekannt, kann die Zonierung vorgenommen werden, die eine Voraussetzung für die Diskretisierung eines Mehrzonenmodells darstellt. Allgemein stellt ein Gebäude ein stark hierarchisch strukturiertes System dar, das im Kontext der IFC in Geschosse, Räume und Raumelemente gegliedert werden kann. In dieser Arbeit wird jedoch diese geschossweise Betrachtungsweise verlassen, indem der Begriff einer *Zone* wie folgt verstanden wird. Eine *Zone* entspricht da-

bei einer Aggregation eines oder mehrerer Luftvolumina $\subseteq M_{AV,valid}$, der damit verbundenen Bauteile und weiterer für eine thermische Simulation relevanter Attribute. Die Luftvolumenobjekte kennen dabei durch die Inzidenz G_I die topologische Gebäudestruktur, d.h. die an sie grenzenden Bauteile und deren Bedeutung.

Datenbankentwurf. In Abschnitt 1.4 wurde auf den softwaretechnischen Entwurf des Präprozessors und dessen Datenbankstruktur eingegangen. Dabei wurde auf die Verbindung zwischen geometrischem Kernsystem *ACIS* (Volumenkörper mit Flächen-/Volumenattributen) und relationaler Datenbank zur Verwaltung von Objekten, Attributen und Beziehungen hingewiesen. Für die Anbindung eines Mehrzonenmodells ist es nun erforderlich, alle im Rahmen einer (ggf. gekoppelten) Simulation benötigten Daten mit Hilfe einer geeigneten Schnittstelle auszutauschen.

Da auf der Seite des Servers, d.h. des im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Gebäudesimulationsprogrammes, das in Abschnitt 2.4.1 vorgestellt wurde, kein geometrisches Modell zur Verfügung steht, wird das Datenbankschema, das bereits eine Vielzahl der benötigten Informationen enthält, im Kontext des auszutauschenden Mehrzonenmodells erweitert. Das in der relationalen Datenbank abgebildete Objektmodell zur Verwaltung der Zonen (inklusive Erweiterungen) ist in Abbildung 3.42 schematisch dargestellt. Seitens des verwendeten Mehrzonenmodells können dabei als Bauteile (bislang) nur ebene Quader abgebildet werden, weshalb die Komplexität des vorhandenen geometrischen Modells für den Austausch deutlich reduziert werden muss.

Das Element *SimProject* enthält Informationen über den Namen des Projektes, aggregiert eine Liste von *Zonen*, einen Vektor zur Identifizierung der Höhenkote der Oberkante Bodenplatte, einen Winkel zur Festlegung der Nordausrichtung des Gebäudemodells (Azimuth) und weiterhin simulationsspezifische Daten wie beispielsweise über das Simulationsintervall und die verwendeten Wetterdaten (Klimaregion). Eine *Zone* aggregiert eine Liste von Luftvolumina (*Airvolumes*) und je ein Objekt *UsingConditionsZone*, in dem Daten über die Regelung

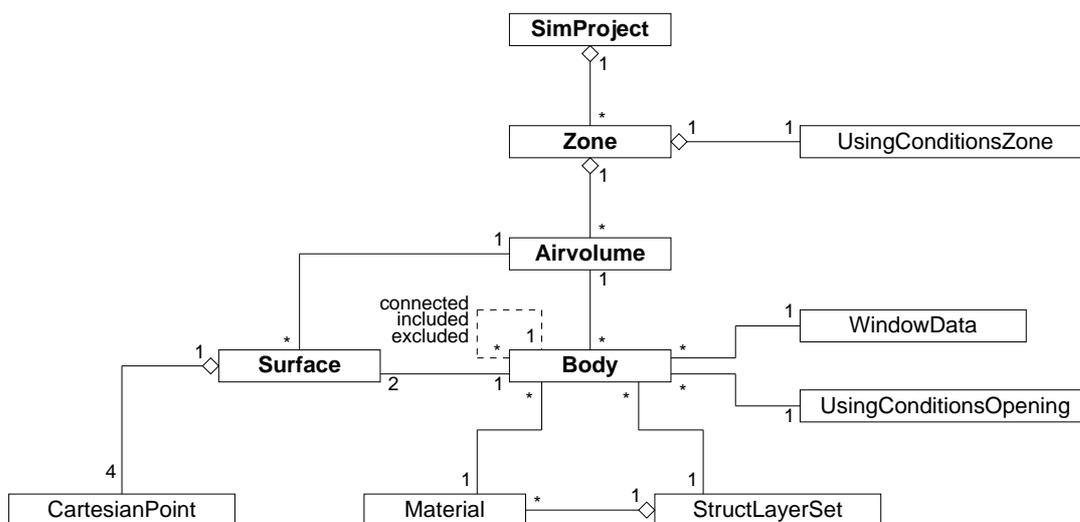


Abbildung 3.42: Datenbankschema im Kontext des auszutauschenden Mehrzonenmodells

von Heizung und Kühlung, Luftwechselraten und Feuchtequellen gespeichert werden. Objekte vom Typ *Airvolume* assoziieren eine Menge von Volumenkörpern (*Bodies*), die wiederum mit genau zwei Oberflächen (*Surfaces*) in Beziehung stehen. Ein *Body* besitzt dabei auch Assoziationen auf sich selbst, wenn der Körper einen anderen einschliesst (Wand mit Öffnung) bzw. von einem anderen umschlossen wird (Öffnung in einer Wand) oder wenn ein Körper zu einem anderen in Beziehung steht (flächige Verbindung). Falls es sich bei einem *Body* um ein Fenster handelt, können verglasungsspezifische Daten, wie z.B. der Rahmenanteil oder optische Eigenschaften des Glaselementes, mit Hilfe des Elementes *WindowData* angegeben werden. Die *UsingConditionsOpening* geben dabei Aufschluss über spezifische Lüftungszeiten. Ein *Body* besteht entweder monolithisch aus einem *Material* oder einem schichtweisen Aufbau (*StructLayerSet*). Zwei Bezeichner legen fest, um welchen Typ ('WALL', 'COLUMN', ...) es sich bei einem *Body*-Element handelt und welches Volumenattribut im Sinne von Algorithmus 3 vorliegt. Das Element *Surface* besitzt einen Zeiger auf das zugehörige Element *Body* und aggregiert vier *CartesianPoint*-Elemente. Falls die Oberfläche gemäss Flächenattribut nach Algorithmus 3 an ein Luftvolumen grenzt, wird dessen ID gespeichert. Durch die Reihenfolge der Anordnung der Oberflächen kann dabei die Richtung des Schichtenmodells beeinflusst werden.

3.5.3 Beispiel: Zonierung eines Bürogebäudes mit Atrium

Die Zonierung soll nun anhand eines einfach strukturierten Beispiels erläutert werden. Abbildung 3.43 zeigt ein *B-rep* Volumenmodell eines dreistöckigen Gebäudes mit einem sich über alle drei Geschosse erstreckenden Atrium. Die Flure sind U-förmig um das Atrium angeordnet.

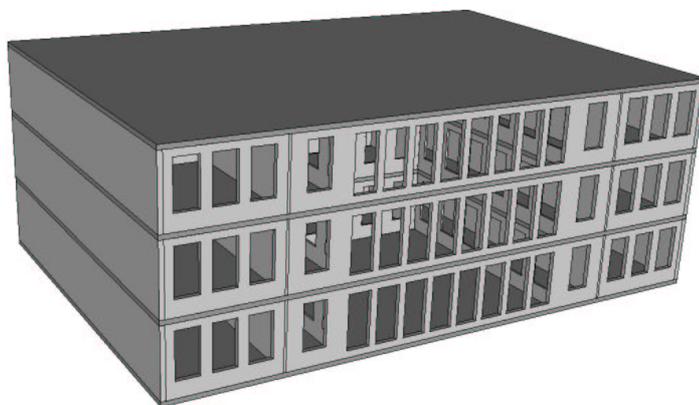


Abbildung 3.43: Beispiel: *B-rep* Modell $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ eines dreistöckigen Gebäudes mit Atrium

In Abbildung 3.44 ist die Menge der Differenzobjekte M_D des resultierenden Verbindungsmodells M_B des zerlegten Gebäudes zu sehen. Das rechte Bild stellt das Komplement, die Menge der Kopplungsobjekte M_{K1} dar (die Menge M_{K2} ist nicht abgebildet). Basierend auf dem in Abschnitt 3.4 beschriebenen Algorithmus werden nun alle 25 Luftvolumina des Gebäudes extrahiert, wie in Abb. 3.45 (links) dargestellt. Im Einzelnen ergeben sich je Stockwerk 7 Luftvolumina im Bereich der Büros und ein Luftvolumen für den U-förmig zusammenhängenden Flur, d.h. 8 Volumina je Stockwerk zuzüglich genau einem für das Atrium. Abbildung 3.45 (rechts) zeigt die äussere Hüllfläche des Gebäudes.

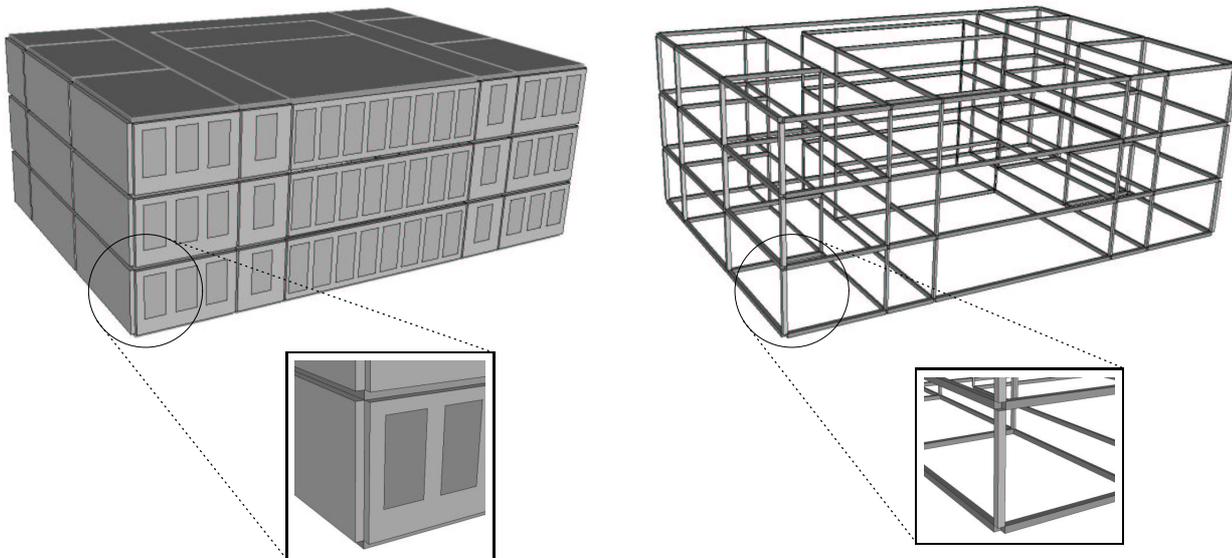


Abbildung 3.44: Zerlegtes Verbindungsmodell M_B , **links:** Menge der Differenzobjekte M_D , **rechts:** Menge der Kopplungsobjekte M_{K1} . Es gilt: $M_D \cap M_{K1} = \emptyset$

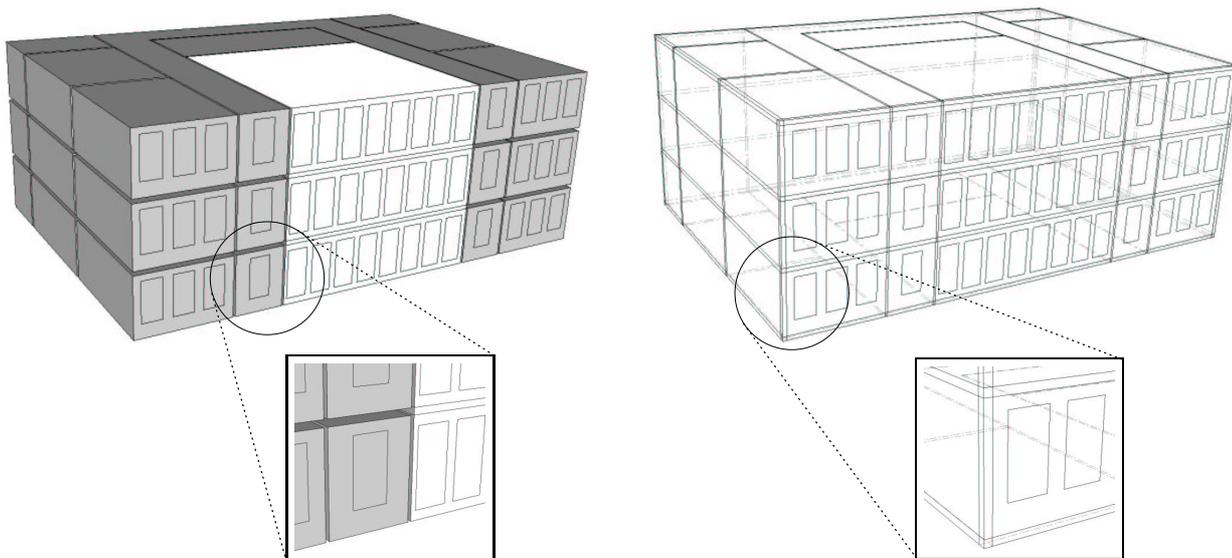


Abbildung 3.45: Extraktion der Luftvolumina, **links:** gültige Luftvolumina des Gebäudes incl. des sich über drei Geschosse erstreckenden Atriums, **rechts:** Hüllfläche (Halbraum)

Die so spezifizierten Luftvolumina können nun graphisch-interaktiv am Rechner zu Zonen zusammengefasst werden. Es bietet sich an, jeweils drei der Bürovolumina zu einer Zone zu verbinden, womit im Mehrzonenmodell nun 4 Zonen pro Stockwerk, d.h. insgesamt 13 Zonen definiert sind, vgl. Abb. 3.46. Mit dieser Wahl als Zonierung ergeben sich nun beispielsweise für die Bauelemente von Zone 4 die in Abbildung 3.47 dargestellten Beziehungen. Weiterhin kann die Bedeutung der Bauteile nach Algorithmus 3 bestimmt werden, womit sich Aussenwände von Innenwänden und zonenbenachbarten Wänden unterscheiden lassen.

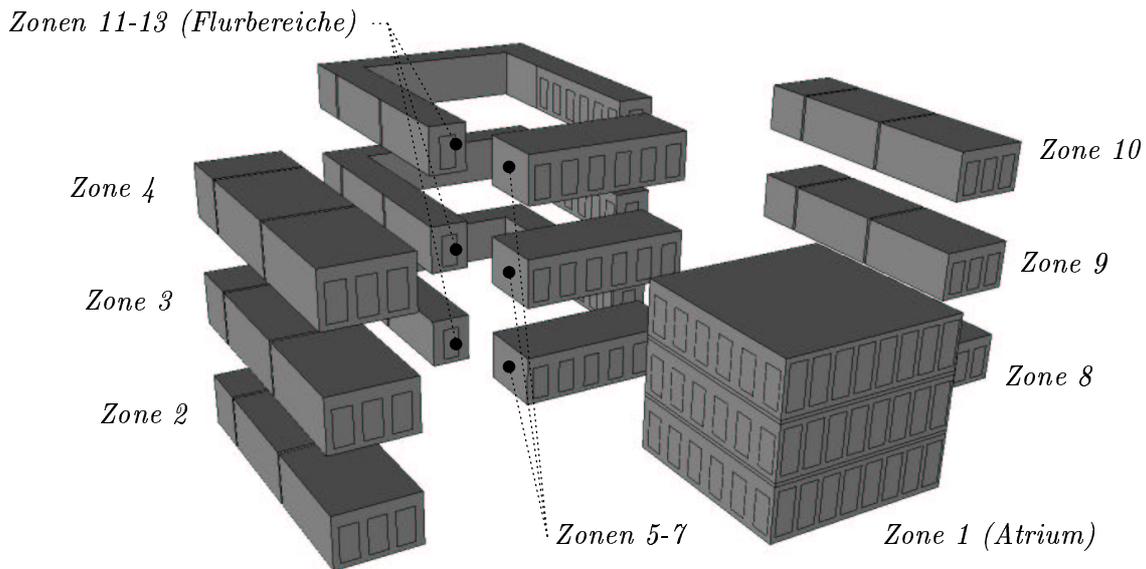


Abbildung 3.46: Gruppierung von Luftvolumina zu Zonen

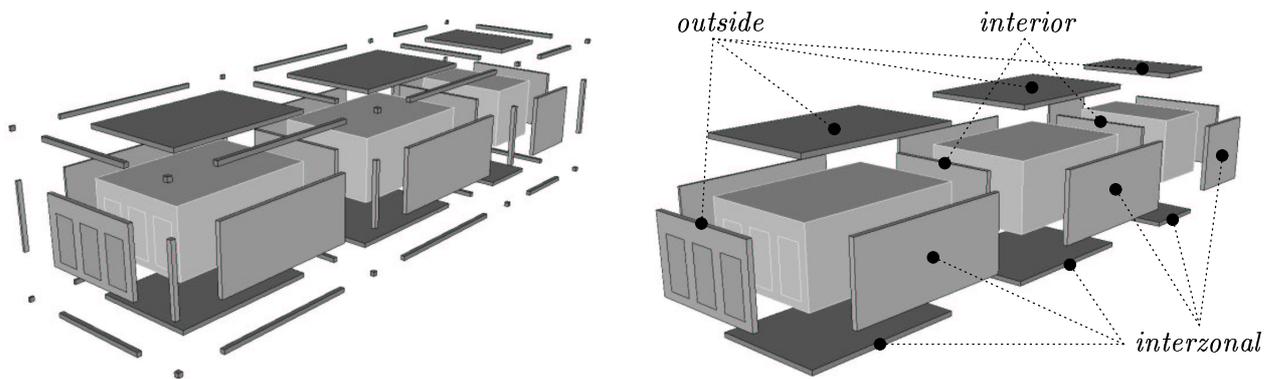


Abbildung 3.47: Beispiel: Zu einer Zone zusammengefasste Luftvolumina (Zone 4).

Links: alle mit den Luftvolumina in Beziehung stehenden Bauteile $\subset M_D$ und deren Kopplungsobjekte $\subset M_K$, **rechts:** für die Diskretisierung *relevante* Bauteile und deren Bedeutung nach Algorithmus 3.

In Verbindung mit Informationen über die Art und Zusammensetzung der Bauteile, d.h. deren Schichtaufbau, Materialien und bauphysikalischen Kennwerten, kann nun ein Mehrzonenmodell erstellt werden.

3.5.4 Vernetzung und Diskretisierung des Strömungsgebietes

Zur Diskretisierung des Strömungsgebietes muss ein dem numerischen Verfahren entsprechendes Netzmodell bzw. Berechnungsgitter abgeleitet werden. Für den Einsatz des in Kapitel 4.2 vorgestellten Gitter-Boltzmann Verfahrens wird dabei ein äquidistantes kartesisches Gitter benötigt. Zunächst wird nun ein zuvor bestimmter, das Strömungsgebiet definierender *B-rep* Raumluftvolumenkörper, ggf. mit 'Innenleben', tesseliert, d.h. in ein Facettenmodell überführt. Hierfür wird die Funktionalität des *ACIS* Geometriemodellierkerns genutzt, indem dessen *Fa-*

setter, vgl. Abschnitt 3.1.2.5, eingesetzt wird. Mit Hilfe des sogenannten *Mesh-Managers* kann dabei spezifiziert werden, welche Informationen die Facetten des Polygonnetzes mit sich tragen sollen, wie z.B. ihren Normalenvektor oder Attribute, die zur Zuordnung von Randbedingungen verwendet werden.

Zur Diskretisierung des Facettenmodells wird der am Lehrstuhl für Bauinformatik im Rahmen des Projektes *ViSimLab* von WENISCH entwickelte Oktalbaumgenerator verwendet [207]. Das Modul ist in der Programmiersprache C implementiert, um auch auf einem Höchstleistungsrechner effizient eingesetzt werden zu können. Abbildung 3.48 illustriert den Ablauf des Diskretisierungsprozesses schematisch.



Abbildung 3.48: Schematischer Ablauf des (geometrischen) Diskretisierungsprozesses

Das Facettenmodell wird zwischen der *ACIS*-Applikation und dem Oktalbaumgenerator über eine standardisierte *STL-Schnittstelle*²⁰ ausgetauscht [23]. Die Zuordnung von Randbedingungen erfolgt durch die *ACIS*-Applikation mit Hilfe einer *Inzidenztabelle*, indem jede Facette, neben drei Knoten und einem Normalenvektor, einen entsprechenden ganzzahligen Identifikationswert trägt. Die Inzidenztabelle setzt diese Werte dabei mit dem Objektmodell der Zonierung in Beziehung. Erst zur Laufzeit einer gekoppelten Simulation werden diese Verknüpfungen dann vom koordinierenden Prozess durch konkrete Randbedingungen im Sinne einer Strömungssimulation ersetzt. Folgendes Beispiel zeigt exemplarisch einen Auszug aus einer *STL*-Datei. Die Zuordnung erfolgt dabei auf den Ebenen 'Körper' und 'Facette', wobei letztgenannte die Körperattribute überladen. Um die Kompatibilität zu *STL*-Visualisierungswerkzeugen nicht zu gefährden, wurde zur Notation ein Zeichen gewählt, das üblicherweise zur Kennzeichnung von Kommentaren verwendet wird.

```

solid TOOL @KEY ID
:
facet normal 0.0 0.0 1.0
  outer loop @KEY ID
    vertex 1.0 1.0 0.0
    vertex -1.0 1.0 0.0
    vertex 0.0 -1.0 0.0
  endloop
endfacet
:
endsolid
  
```

Zur Diskretisierung werden mit Hilfe der in Abschnitt 3.1.2.1 beschriebenen Oktalbaumtechnik nun alle Oktanten, die mit Facetten eine nichtleere Schnittmenge aufweisen, bis zu einem vorgegebenen Level verfeinert. Wie in Abschnitt 3.1.2.1 angesprochen, wird durch die Verwendung von Facetten anstelle von allgemeinen (Freiform-)Flächen die algorithmische Komplexität der durchzuführenden geometrischen Testoperationen deutlich reduziert. Weiterhin

²⁰STL = *Stereo Lithography File*

wird grundsätzlich nur der Rand eines Körpers approximiert. Hierfür wird eine Bounding-Box des Luftvolumenkörpers selbst und zu jedem im Strömungsgebiet liegenden Körper generiert und zunächst jeder Körper individuell diskretisiert. Ein objektorientiert strukturiertes Modell zur Repräsentation des hierarchischen Schemas nutzend, können sich weiterhin die 'Würfel-Objekte' zur Laufzeit merken, mit welchen Facetten sie eine nichtleere Schnittmenge bilden. Durch rekursive Anwendung und Adaption reduziert sich damit die zu testende Menge an Facetten sukzessive mit quadratischer Ordnung, womit algorithmisch eine wesentliche Effizienzsteigerung erreicht wird.

Da die Übergabe des Berechnungsgitters an den Lattice-Boltzmann Strömungssimulator in Form eines 1D Vektors erfolgt, müssen diejenigen Oktanten, die nicht zur feinsten Baumtiefe gehören, während der Erzeugung des uniformen Normzellenschemas 'aufgefüllt' werden. Während des Diskretisierungsprozesses wurden die Identifikationswerte zur Kennzeichnung von Randbedingungen von den Facetten an Oktanten, die mit diesen eine Schnittmenge aufweisen, weitergegeben. Die Inzidenztabelle kann somit unverändert übernommen werden. Abbildung 3.49 zeigt exemplarisch die Übertragung der Attribute zur Definition der Randbedingungen.

Für den (geometrischen) Diskretisierungsprozess ist es ausreichend, nur die Körperoberfläche zu approximieren. Das Füllen des über seine Oberfläche modellierten Körpers erübrigt sich zur Simulation von Strömungen, da eine Oberfläche hinreichend 'dicht' beschrieben werden kann. Soll trotzdem ein Volumenmodell generiert werden, kann ein *Überflutungsalgorithmus* angewendet werden, wie er beispielsweise in [38] ausführlich beschrieben ist. Voraussetzung hierfür ist eine *Glättung* und *Vernetzung* des Oktalbaumes, womit man aber, durch Veränderungen an der Graphenstruktur (wachsende Speicherkomplexität), wesentliche Vorteile des Verfahrens aufgeben müsste.

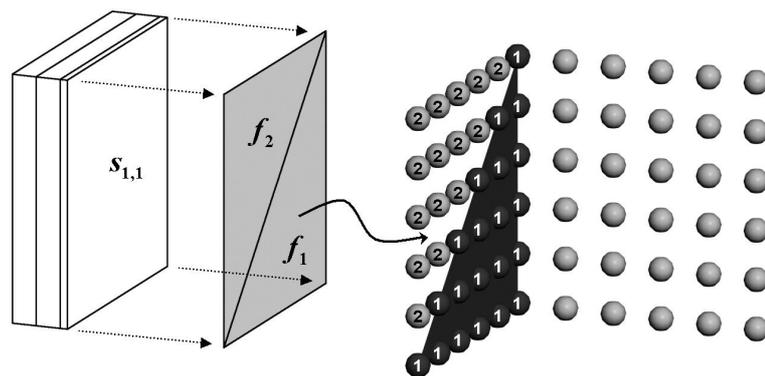


Abbildung 3.49: Beispiel: Übertragung von Attributen. Mit Hilfe der Datenbank wird ein Zusammenhang zwischen Wandoberflächen und Flächen der Luftvolumenkörper hergestellt. Jede Facette 'weiss' wiederum, aus welcher Teilfläche sie gebildet wurde. Da die Oktanten die Identifikationswerte der Facetten 'erben', kann jedes Voxel mit Wand- oder Öffnungsoberflächen, d.h. zur Laufzeit mit Randbedingungen, in Beziehung gesetzt werden.

3.5.5 Beispiel: Vernetzung und Diskretisierung des Atriums

Im Folgenden wird nun das aus Abschnitt 3.5.3 bekannte Beispiel des Gebäudes mit Atrium fortgeführt. Abbildung 3.50 zeigt die triangulierten Volumenkörper aller Luftvolumina.

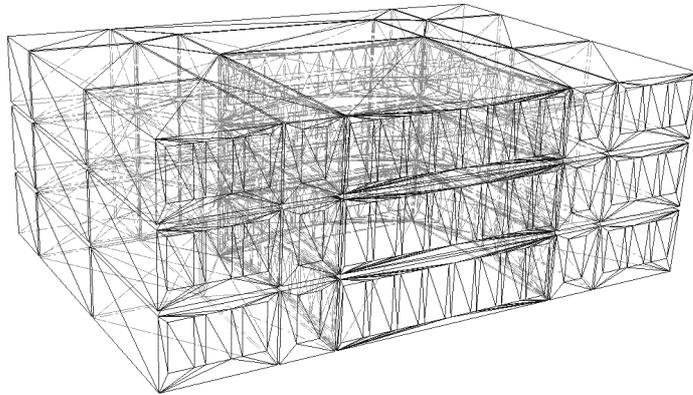


Abbildung 3.50: Triangulierung der Luftvolumenkörper

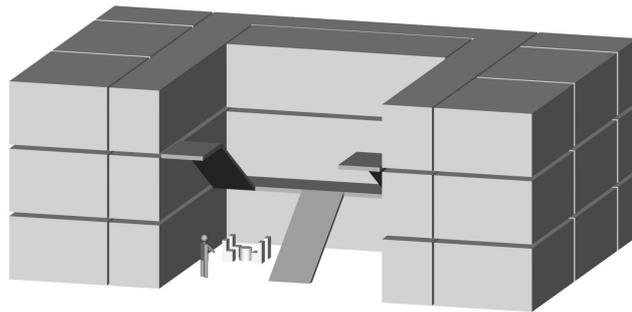


Abbildung 3.51: 'Innenleben' des Atriums mit Person und umgebenden Luftvolumina

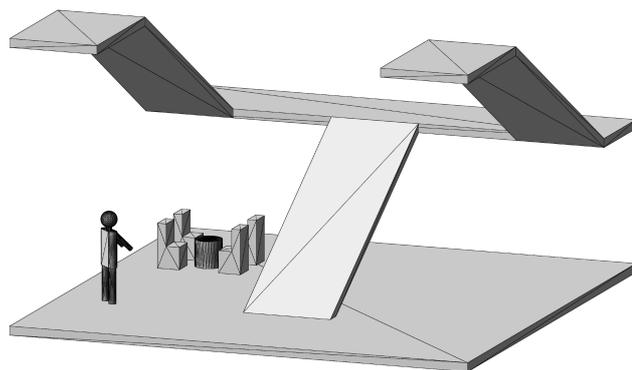


Abbildung 3.52: Facettenmodell des Atriums 'mit Innenleben' und Bodenplatte

Für die Simulation des thermischen Verhaltens des Gebäudes mit Hilfe eines dynamischen Mehrzonenmodells ist es dabei sinnvoll, die Raumluftströmungsverhältnisse innerhalb des Atriums für ausgesuchte, kritische Zeitpunkte detaillierter, d.h. mit einer gekoppelten Simulation,

zu untersuchen (vgl. Kapitel 1). Deshalb soll nun der Diskretisierungsprozess anhand des mit 'Innenleben' ausgestatteten Atriums, das in Abbildung 3.51 dargestellt ist, demonstriert werden. Abbildung 3.52 zeigt einen Schnitt durch das Facettenmodell.²¹

Ausgehend von diesem Facettenmodell kann mit Hilfe der weiter oben beschriebenen Oktaalbaumtechnik ein Voxelmodell erstellt werden, das als Rechengitter für den Lattice-Boltzmann Simulator verwendet werden kann. In Abbildung 3.53 sind die Kanten des zur Diskretisierung verwendeten, vernetzten Oktaalbaumes der Tiefe 6 dargestellt, Abbildung 3.54 zeigt orthogonale Schnitte durch den Oktaalbaum. Abbildung 3.55 illustriert die inverse Voxeldarstellung des approximierten Strömungsgebietes. Das Facettenmodell des 'Innenlebens' besteht dabei aus 1666 Dreiecksflächen. Die Rechenzeit zur Generierung des Oktaalbaumes der Tiefe 6 beträgt etwa 3 Sekunden auf einem Pentium IV Rechner mit etwa 3 GFlop/s, womit dieses Werkzeug auch für Fragestellungen im Bereich der Echtzeitsimulation (*Computational Steering*) eingesetzt werden kann.

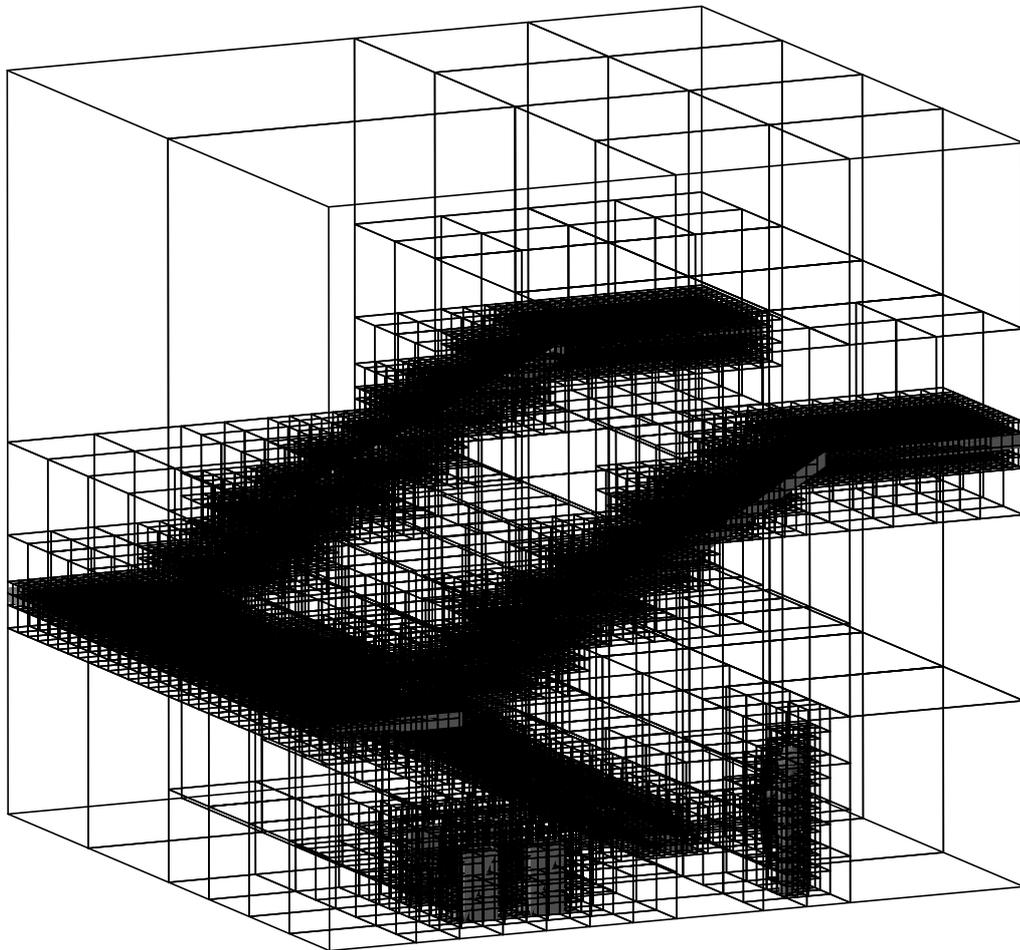


Abbildung 3.53: Darstellung der Level 0 mit 6 des Oktaalbaums des 'Atrium-Innenlebens'

²¹Anmerkung: Das 'Innenleben' eines Strömungsgebietes unterliegt nicht dem Zerlegungsprozess, weshalb aus 'auf dem Boden stehenden Objekten' keine Imprintflächen generiert werden.

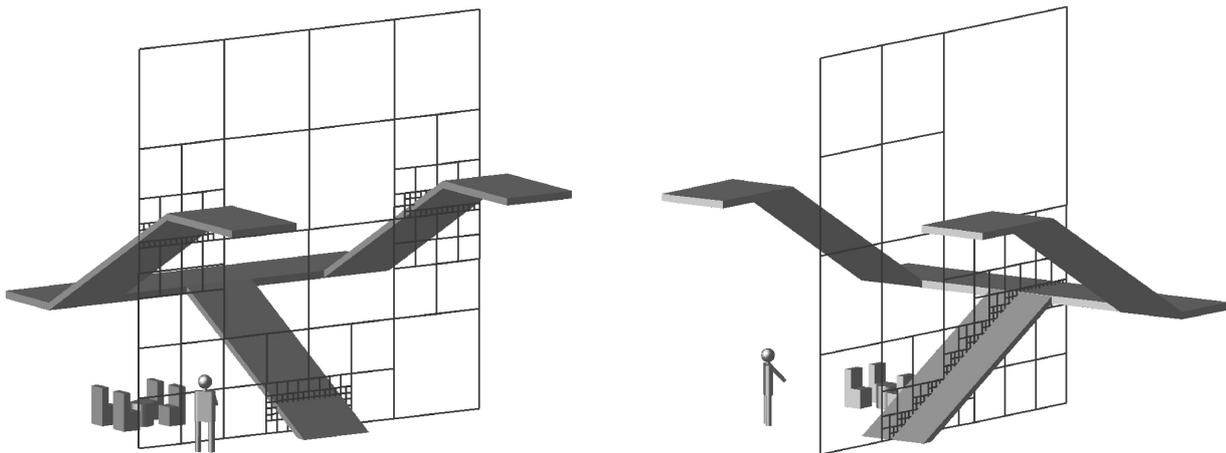


Abbildung 3.54: Orthogonale Schnitte durch den Oktalbaum (sogenannte *Quadtrees*)

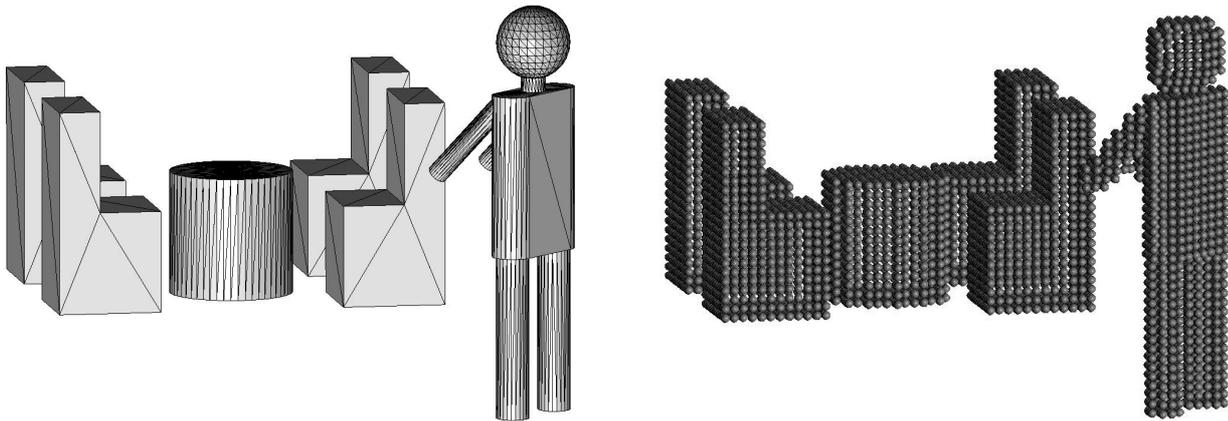


Abbildung 3.55: Facettenmodell und Voxeldarstellung der Sitzgruppe mit 'Dummy'

Um die Anzahl der erforderlichen Gitterpunkte, die zur Auflösung der physikalischen Vorgänge im Strömungsfeld benötigt werden, abzuschätzen, wird folgende Überlegung angestellt. Das würfelförmige Atrium besitzt eine Grundfläche von $10.5m \times 10.5m$. Bei Verwendung eines Oktalbaums der Tiefe 8 kann das Strömungsgebiet mit einer Genauigkeit von etwa $4.1cm$ (Kantenlänge pro Voxel) diskretisiert werden. Ein somit $256 \times 256 \times 256 = 1.7 \cdot 10^7$ Gitterpunkte grosses uniformes Rechengitter benötigt etwa 3 GByte Speicherplatz, wobei für das in Abschnitt 4.2 vorgestellte Gitter-Boltzmann Verfahren 15 Freiheitsgrade (DOF) zuzüglich weiterer DOF zur Speicherung hydrodynamischer Variablen und während der Berechnung benötigter Felder, beispielsweise zur Definition von Randbedingungen etc., angesetzt wurden. Für eine Verfeinerung bis zur Tiefe 9, die eine Voxelgrösse von etwa $2cm^3$ ergäbe, würden bereits 28 GByte Speicherplatz benötigt, womit die Berechnung – nicht nur aus Gründen der Rechenzeit – nicht mehr auf einem konventionellen Rechner (mit derzeit maximal 4 GByte Hauptspeicher) durchführbar wäre, sondern eine verteilte parallele Berechnung des Problems erforderlich wäre. Eine Reduktion der Anzahl der benötigten Gitterpunkte könnte durch Verwendung adaptiver Diskretisierungsansätze erreicht werden, indem das Gitter an entsprechen-

den Stellen verfeinert wird (siehe z.B. [38]).

KOLMOGOROV folgend (siehe z.B. in [112, 157]), können die Längenskalen der Grob- und Feinstruktur in einer Strömung mit der Beziehung $n_G \sim Re^{9/4}$ abgeschätzt werden [205]:

$$\left(\frac{L}{\Delta x}\right)^3 = \left(\frac{L}{l_s}\right)^3 \approx Re^{9/4} \quad (3.53)$$

Mit einer charakteristischen Länge von $L = 10.5m$ und einer angenommenen Strömungsgeschwindigkeit von $u_0 = 0.5\frac{m}{s}$ im Innenraum mit $\nu = 1.5 \cdot 10^{-5}\frac{m^2}{s}$ ergibt sich die Reynoldszahl zu $Re \approx 350000$. Die direkte numerische Simulation (DNS) erlaubt dabei nach Gl. (3.53) auf dem gegebenen Gitter mit einem Gitterknotenabstand von $\Delta x = 4.1cm$ nur die Auflösung von Strömungsvorgängen mit $Re < 1700$ (bzw. $u_0 < 0.0024\frac{m}{s}$). Um auch die Feinstruktur der Strömung auflösen zu können, wird deshalb ein Turbulenzmodell benötigt. Abschnitt 4.1.4 geht auf diese Problematik ein.

3.6 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Die in Abschnitt 2.5 geforderte Anbindung der Simulationsverfahren an ein Bauwerksmodell, das in der Lage ist, die strukturellen und semantischen Informationen eines Modells zur Generierung von Eingabedaten für ein thermisches Mehrzonenmodell und einen Strömungssimulator konsistent aufzubereiten, wurde in diesem Kapitel konsequent umgesetzt. Mit Hilfe eines graphentheoretischen Ansatzes konnte gezeigt werden, wie die in einem Produktmodell enthaltenen geometrischen, topologischen und semantischen Informationen unter Beibehaltung der Objektstruktur in ein Volumenmodell überführt, in ein Verbindungsmodell zerlegt, die Luftvolumina und Hüllfläche durch eine Zerlegung in einfach zyklische Zusammenhangskomponenten extrahiert, analysiert, identifiziert und zur (geometrischen) Diskretisierung verwendet werden können. Die Zerlegung, Zonierung und Vernetzung wurde anhand eines komplexen Beispiels demonstriert. Die Diskretisierungstechnik eignet sich dabei für das im nächsten Kapitel vorgestellte Verfahren zur Simulation konvektiver Strömungsvorgänge.

Kapitel 4

Numerische Simulation von Raumlufströmungen

In der Einleitung wurde darauf Bezug genommen, dass heutzutage komplexe physikalische Strömungs- und Wärmeübertragungsvorgänge mit Hilfe der numerischen Strömungsmechanik berechnet werden können; in Kapitel 2 wurde bereits die Anwendung eines kommerziellen CFD-Programmpaketes demonstriert. Je nach Komplexität des zu untersuchenden Phänomens sind solche Simulationen dabei gewissen Beschränkungen unterworfen, da der Simulationsaufwand bei höheren Reynoldszahlen drastisch ansteigt. Als Restriktionen können hauptsächlich der Speicherplatzbedarf und die verfügbare Rechnerleistung genannt werden. Auch die Simulation konvektiver (Innen-)Raumlufströmungen ist auf Grund ihrer turbulenten Natur im Rahmen einer Gebäudesimulation auf kurze Zeitintervalle und einzelne Zonen innerhalb eines Gebäudes beschränkt, obwohl die hier charakteristischen Reynoldszahlen um Größenordnungen unter denjenigen der Gebäudeaerodynamik liegen.

In den letzten Jahrzehnten wurden im Bereich der numerischen Simulation hocheffiziente Verfahren entwickelt (wie z.B. Mehrgitterverfahren), Techniken zur Reduktion des Speicherplatzbedarfes eingesetzt (Adaptivität im Zusammenhang mit der Entwicklung von Fehlerschätzern) und unter Zuhilfenahme von Gebietszerlegungstechniken grössere bzw. deutlich feiner aufgelöste Gebiete durch Parallelisierung der Verfahren überhaupt erst in die Klasse der numerisch berechenbaren Probleme aufgenommen. Auf Grund oben genannter Restriktionen werden in der Praxis üblicherweise sogenannte Turbulenzmodelle eingesetzt, die es ermöglichen, einen Teilbereich oder das gesamte turbulente Energiespektrum zu modellieren. Das Forschungsgebiet der Turbulenzmodellierung zählt dabei zu den schwierigsten Aufgaben der Strömungsmechanik.

Da der Schwerpunkt dieser Arbeit auf dem geometrischen Aspekt des Diskretisierungsprozesses liegt, ist es der Grundgedanke dieses Kapitels, das für die betrachtete Problemklasse als vorteilhaft angesehene *Lattice-Boltzmann Verfahren* vorzustellen. Das Verfahren eignet sich dabei besonders gut für die in Abschnitt 3.5 vorgestellte Diskretisierungstechnik. Weiterhin kann das Verfahren verhältnismässig 'einfach' um ein Feinstruktur-Turbulenzmodell erweitert werden, wie in Abschnitt 4.4 gezeigt werden wird. Nach einer Darstellung der im Rahmen dieses Kapitels benötigten Grundgleichungen und einem knappen Überblick über den Begriff der Turbulenzmodellierung widmet sich deshalb der Hauptteil dem *Lattice-Boltzmann Verfahren*

und dessen Erweiterungen hinsichtlich der Berechnung konvektiver Raumluftrömungen.

4.1 Grundlagen der Strömungsmechanik

4.1.1 Top-Down versus Bottom-Up

Numerische Methoden, wie beispielsweise diejenigen zur Lösung der Navier-Stokes Gleichungen, basieren üblicherweise auf sogenannten *Top-Down* Verfahren. Hierbei werden die (ggf. nichtlinearen) partiellen Differentialgleichungen bzw. Integro-Differentialgleichungen eines mathematischen Modells, das die Wirklichkeit möglichst gut wiedergeben soll, mit Hilfe von Finite-Differenzen- (FD), Finite-Volumen- (FV) oder FEM-Techniken diskretisiert. Durch die Diskretisierung können diese Differentialgleichungen nun mit Hilfe eines Systems algebraischer Gleichungen an diskreten Positionen in Raum und Zeit näherungsweise gelöst werden. Im Bereich der numerischen Strömungsmechanik werden dabei bevorzugt Finite-Volumen Techniken eingesetzt.

Im Gegensatz dazu repräsentieren Gittergas-Verfahren (Lattice-Gas Cellular Automata, LG-CA) und deren spätere Ableitung, die *Gitter-Boltzmann Verfahren*, auch *Lattice-Boltzmann Methode (LBM)* genannt, ein *Bottom-Up* Verfahren, das ausgehend von einem diskreten mikroskopischen Modell per Konstruktion für die gewünschten Größen Massen-, Impuls- und Energieerhaltung erfüllt, um hydrodynamische Eigenschaften zu erhalten, die auch mit den Navier-Stokes Gleichungen beschrieben werden können [194, 209].

4.1.2 Grundgleichungen

Das mathematische Modell zur Beschreibung allgemeiner, instationärer, dreidimensionaler Strömungsvorgänge im Kontinuum stellen die *Navier-Stokes Gleichungen* dar, ein System aus fünf partiellen Differentialgleichungen: der Kontinuitätsgleichung, drei Impulsgleichungen und der Energiegleichung. Im Rahmen dieser Arbeit werden *konvektive, Boussinesq-inkompressible* Raumluftrömungen chemisch nicht reagierender *Newtonscher Fluide* betrachtet, bei kleinen Mach-Zahlen bzw. Rayleigh-Zahlen in einer Größenordnung bis $\mathcal{O}(10^8)$. Bei der Notation findet die Einsteinsche Summenkonvention Anwendung.

Kontinuitätsgleichung. Das Prinzip der Massenerhaltung, d.h. die Forderung, dass die Summe der ein- bzw. ausfließenden Massen eines Gebietes gleich der Massenänderung durch Dichteänderung sein muss, liefert nach Anwendung des Transporttheorems die Kontinuitätsgleichung, die sich für inkompressible Fluide ($\rho = \text{const.}$) auf die Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes u_i reduziert (D bezeichnet die Anzahl der Raumdimensionen) [168]:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{mit } i \in [1, \dots, D] \quad (4.1)$$

Impulsgleichungen. Diese erhält man aus dem 2. Newtonschen Gesetz, das besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses eines Fluidelementes (in der *Lagrangeschen* Betrachtungsweise) gleich der Summe der auf das Fluid wirkenden Kräfte ist. Die Kräfte setzen sich aus Volumenkräften (z.B. Gravitationskräften) und Oberflächenkräften zusammen (Druck, Scherkräfte). Letztgenannte sind abhängig vom Verformungszustand des Fluids. Bei der Herleitung

der Impulsgleichungen muss dabei nach SCHLICHTING ein (isotroper) Zusammenhang zwischen dem Spannungs- und dem Verformungszustand hergestellt werden [168]. Ist dieser Zusammenhang linear, spricht man von einem *Newtonschen Fluid*. Die Betrachtung des Spannungszustandes führt auf einen Spannungstensor σ_{ij} aus neun (bzw. aus Symmetriegründen sechs) skalaren Grössen, die in Normal- und Deviatorspannungen (viskoser Spannungstensor τ_{ij}) aufgespalten werden. Der Verformungszustand lässt sich durch den Tensor der Verformungsgeschwindigkeiten und einen Drehvektor ausdrücken und als Volumendilatation, Schubverformung und Festkörperdrehung deuten. Relevant hinsichtlich der Spannungen sind dabei ausschliesslich die Verformungen. Unter Beachtung der Isotropie lautet mit der Hypothese von STOKES der (empirische) Ansatz für den Spannungstensor:¹

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} - \underbrace{\frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \delta_{ij}}_{= \tau_{ij}} - \tau_{ij}^{mol} \quad \text{mit} \quad \tau_{ij}^{mol} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.2)$$

Für den inkompressiblen Fall ($\partial u_i / \partial x_i = 0$) lautet das System partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung, die Impulsgleichungen, für die drei Richtungen i damit

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}^{mol}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad , \quad (4.3)$$

wobei τ_{ij}^{mol} nach DURST aus dem molekülbedingten Impulstransport resultiert [50]; μ ist die dynamische Viskosität des Fluids, g_i eine Volumenkraft (z.B. Gravitationskraft).

Werden bei nicht-viskosen Fluiden die inneren Scherkräfte vernachlässigt, ist der Spannungstensor nur noch durch den Druck bestimmt. Man spricht in diesem Fall von den *Eulerschen Bewegungsgleichungen*, einem System partieller Differentialgleichungen erster Ordnung.

Energiegleichung. Die Integralgleichung der Energieerhaltung lautet gemäss dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik für ein Fluidvolumen V [16, 168]:

$$\underbrace{\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho e) d\mathbf{x}}_{\substack{\text{zeitliche Änderung} \\ \text{der Wärmeenergie} \\ \text{in } V}} + \underbrace{\int_{\partial V} \rho e \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds}_{\substack{\text{Transport durch} \\ \text{Strömung über} \\ \text{Rand } \partial V}} = - \underbrace{\int_V q' d\mathbf{x}}_{\substack{\text{innere} \\ \text{Wärmequellen}}} - \underbrace{\int_{\partial V} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} ds}_{\substack{\text{Transport durch} \\ \text{Wärmeleitung} \\ \text{über Rand } \partial V}} + \underbrace{\int_V \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{u} d\mathbf{x}}_{\substack{\text{Wärmeaustausch} \\ \text{(Arbeit) zwischen} \\ \text{V und Umgebung}}} \quad (4.4)$$

mit der inneren Energie e , der Wärmestromdichte \mathbf{q} und innerer Wärmequelle q' , die hier nicht weiter verwendet wird. Bei der Herleitung wird dabei die zeitliche Änderung der Gesamtenergie, d.h. die Summe aus innerer, kinetischer und potentieller Energie, mit der durch Wärmeleitung zugeführten Energie und der durch die Oberflächenkräfte verrichteten Arbeit bilanziert und anschliessend die Energiegleichung für die mechanische Energie davon subtrahiert [168]. Die differentielle Form ergibt sich nach Umformung der Oberflächenintegrale mit

¹Die Hypothese besagt, dass die Volumenviskosität bei Newtonschen Fluiden verschwindet, d.h. die Relaxationszeiten für innere Umwandlungsprozesse klein gegenüber Verformungszeiten sind [168].

Hilfe des Gaußschen Integralsatzes. Mit der Enthalpie $h = e + p/\rho$, der Bildung der substantiellen Ableitung² der inneren Energie, der Anwendung des Fourierschen Wärmeleitungsgesetzes $q_i = -\lambda \partial T / \partial x_i$ und unter Ausnutzung der thermodynamischen Beziehung [16, 168]

$$dh = c_p dT + \frac{1}{\rho}(1 - \beta T) dp \quad (4.5)$$

ergibt sich die Energiegleichung, ausgedrückt mit der unbekanntem Temperatur $T(x_i, t)$ (neben p, ρ und u_i), zu

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} + \underbrace{\beta T \frac{Dp}{Dt}}_{= 0 \text{ (inkompr.)}} + \underbrace{\tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}}_{\text{viskose Dissipation}} \quad (4.6)$$

mit der (hier als konstant angenommenen) Wärmeleitfähigkeit des Fluids λ , der spezifischen Wärmekapazität c_p bei konstantem Druck und dem Volumenexpansionskoeffizienten β (bei konstantem Druck).³ Der dritte Term auf der rechten Seite von Gl. (4.6) entspricht dabei der viskosen Dissipation. Die thermodynamischen Eigenschaften werden häufig in dem Wärmediffusionskoeffizienten $\alpha = \frac{\lambda}{\rho c_p}$ zusammengefasst.

Boussinesq-Approximation. Der Einfluss des Temperaturfeldes auf die Strömung besteht darin, dass Änderungen der Temperaturverteilung eine Dichteänderung gemäss der Zustandsgleichung $\rho(p, T) = 0$ bewirken. Es wirken thermische Auftriebskräfte. Die Impulsgleichungen liefern dabei zusammen mit der Kontinuitätsgleichung Lösungen für das Geschwindigkeitsfeld, die in die Energiegleichung eingesetzt werden können. Um nun auch eine Kopplung des Geschwindigkeitsfeldes an das Temperaturfeld vorzunehmen, muss die Temperaturabhängigkeit der Fluideigenschaften $\rho(T)$, $\mu(T)$, $c_p(T)$ und $\lambda(T)$ berücksichtigt werden. Da diese Abhängigkeiten in den meisten Problemen näherungsweise relativ klein sind, wählt man üblicherweise folgende Vereinfachung: Die Stoffgrößen werden in einem bestimmtem Intervall um eine Referenztemperatur als konstant angenommen. Die Dichte ρ ist ausschliesslich im Volumenkraftterm variabel und die viskose Dissipation ist klein. Als weitere Vereinfachung wird dabei ein linearer Zusammenhang zwischen ρ und T angenommen, indem die Dichte in einer Taylorreihe an der Stelle $T = T_0$ um den Referenzwert ρ_0 bis zum Glied erster Ordnung entwickelt wird [16, 82, 168]:

$$\rho(T) = \rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial T}(T - T_0) + \dots \quad (4.7)$$

Diese Vereinfachung wird als *Boussinesq-Approximation* bezeichnet. In den Impulsgleichungen (4.3) wird nun der Volumenkraftterm durch folgenden Ausdruck ersetzt, β bezeichnet dabei den Volumenexpansionskoeffizienten:

$$\rho g_i = \rho_0 g_i (1 - \beta(T - T_0)) \quad \text{mit} \quad \beta = - \left. \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \right|_{T_0} \quad (4.8)$$

Von GRAY und GIORGINI wurde in [81] der Gültigkeitsbereich der Approximation untersucht. Hinsichtlich des Anwendungsbereiches auf Raumluftströmungen (charakteristische Längen und Temperaturdifferenzbereiche) bewegt sich der Fehler innerhalb weniger Prozent.

²Substantielle Ableitung: $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_i \frac{\partial}{\partial x_i}$

³Neben dieser Darstellung kennt man auch die sogenannte Enthalpie-Form der Energiegleichung.

4.1.3 Dimensionslose Grössen (Ähnlichkeitsgesetze)

Geschwindigkeits- und Temperaturfelder von Strömungen um geometrische Körper bzw. innerhalb dieser sind genau dann physikalisch ähnlich, wenn die dimensionslosen Kennzahlen, von denen diese Felder abhängen, übereinstimmen. Diese setzen sich allgemein aus charakteristischen geometrischen Grössen, Geschwindigkeiten, Temperaturdifferenzen und Materialeigenschaften zusammen [11, 16, 50, 82, 168].

Die *Reynoldszahl* Re gibt das Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Kräften an und wird gebildet aus der Dichte ρ_0 , der charakteristischen Geschwindigkeit U_0 , der charakteristischen Länge L und der dynamischen bzw. kinematischen Viskosität μ bzw. ν .

$$Re = \frac{\rho_0 U_0 L}{\mu} = \frac{U_0 L}{\nu} \quad (4.9)$$

Die *Froudezahl* Fr bestimmt das Verhältnis von Trägheits- zu Gravitationskräften:

$$Fr = \frac{U_0}{\sqrt{L \|g_i\|}} \quad (4.10)$$

Eine *Stoffgrösse* zur Charakterisierung der Temperaturgrenzschicht ist die *Prandtlzahl* Pr , die das Verhältnis von Impuls- zur Wärmeausbreitung eines Fluids beschreibt. Für $Pr = 1$ (Gase: $Pr = [0.7; 1]$) liegen die Grenzschichtdicken von Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld in der gleichen Grössenordnung. Bei grossen Prandtlzahlen (Flüssigkeiten, Öle: $Pr = [3; 300]$) liegt die Temperaturgrenzschicht komplett innerhalb der viskosen Unterschicht.

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} = \frac{\nu}{\alpha} \quad (4.11)$$

Das Produkt aus Reynolds- und Prandtl-Zahl ergibt die *Peclet-Zahl* Pe :

$$Pe = Re \cdot Pr \quad (4.12)$$

Da bei freier Konvektion a priori keine charakteristische Geschwindigkeit bekannt ist, tritt an die Stelle der Reynoldszahl die *Galilei-Zahl* Ga , die den Betrag einer Volumenkraft als Einflussgrösse enthält:

$$Ga = \frac{\|g_i\| \rho_0^2 L^3}{\mu^2} = \frac{\|g_i\| L^3}{\nu^2} \quad (4.13)$$

Mit der Galilei-Zahl kann nun im Boussinesq-Limes das Verhältnis der thermischen Auftriebskräfte zu den viskosen Kräften in der *Grashof-Zahl* Gr ausgedrückt werden, wobei β dem Volumenexpansionskoeffizienten bei der Fluidtemperatur T_F und der Temperaturdifferenz ($T_W - T_F$) zwischen Wand und Fluid entspricht:

$$Gr = Ga \beta (T_W - T_F) = \frac{\|g_i\| \beta (T_W - T_F) L^3}{\nu^2} \quad (4.14)$$

Als *Rayleigh-Zahl* Ra bezeichnet man die sogenannte modifizierte Grashofzahl mit

$$Ra = Pr \cdot Gr = \frac{\|g_i\| \beta (T_W - T_F) L^3}{\alpha \nu} \quad (4.15)$$

Die Abhängigkeit von Wärme- und Stoffübergang kann schliesslich mit Hilfe der *Nusselt-Zahl*

$$Nu = \frac{q_w L}{\lambda(T_w - T_0)} = \frac{h_c L}{\lambda} \quad (4.16)$$

beschrieben werden, die das Verhältnis von konvektivem Wärmeübergang zu diffusivem Wärmeübergang in Wandnähe (Grenzschicht) ausdrückt. h_c bezeichnet hierbei den konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten.

4.1.4 Turbulenzmodellierung

Eine kurze und prägnante Definition des Begriffes 'Turbulenz' ist beispielsweise nach WEN-
GLE nicht möglich. Als symptomatische Kriterien der turbulenten Strömungseigenschaften kann man diese als instationär, nichtlinear, unregelmässig, Mischungintensiv, dissipativ und dreidimensional charakterisieren. Turbulenz tritt bei hohen Reynoldszahlen auf [205]. Im Gegensatz zu laminaren Strömungen findet bei turbulenten Strömungen auch eine Vermischung von Fluidteilchen quer zur Strömungsrichtung statt. Dies wird durch unregelmässige Schwankungsbewegungen verursacht, die die geordnete Grundströmung überlagern.

Prinzipiell kann mit den Navier-Stokes Gleichungen auch das Spektrum der turbulenten Strömungen beschrieben werden, wenn dabei alle charakteristischen Skalen räumlich und zeitlich aufgelöst werden. KOLMOGOROV entwickelte 1941 die anschauliche Modellvorstellung eines Energiekaskadenprozesses, wobei eine turbulente Strömung durch Überlagerung von Wirbeln unterschiedlicher Grössenordnungen beschrieben werden kann. Die grössten Wirbel, die der charakteristischen Abmessung des Systems entsprechen, geben dabei im sogenannten Inertialbereich des Energiespektrums ihre Energie durch Trägheitskräfte an die Elemente kleinerer Grössenordnungen ab. Am Ende der Kaskade wird die mechanische Energie der kleinsten Wirbel durch viskose Kräfte in Wärme dissipiert.⁴ Lokal kann es auch einen Energietransfer von kleinen zu grossen Elementen geben ('Backscatter-Effekt') [25, 205]. Die kleinsten charakteristischen Längen- und Zeiteinheiten können über eine Dimensionsanalyse nach KOLMOGOROV zu

$$l_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \quad \text{und} \quad t_k = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \quad (4.17)$$

abgeschätzt werden, wobei $\epsilon \propto U^3/L$ der Dissipationsrate entspricht (vgl. auch Gl. (3.53) in Abschnitt 3.5.5). Übertragen auf eine *direkte numerische Simulation (DNS)* bedeutet dies, dass die Lösung der Navier-Stokes Gleichungen auch bei Verwendung von Hochleistungsrechnern auf Reynoldszahlen $< \mathcal{O}(10^4)$ beschränkt ist [194]. (In Abschnitt 3.5.5 wurde eine entsprechende Abschätzung vorgenommen.) Die DNS stellt aber ein wichtiges Werkzeug zur Turbulenzforschung dar, wie z.B. zur Validierung von Turbulenzmodellen.

Ein Ansatz zur Lösung dieses Dilemmas besteht darin, das turbulente Energiespektrum ganz oder teilweise nicht mehr vollständig raumzeitlich aufzulösen, sondern als *modellierte* Einflussgrösse auf die diskretisierten Skalen zu berücksichtigen. Neben der DNS, die den grössten Rechenaufwand impliziert, kennt man dabei die statistische Betrachtungsweise der *Reynoldsgemittelten Navier-Stokes Simulation (RANS)*⁵, bei der das gesamte Spektrum modelliert wird,

⁴Im Medium Luft beträgt die Grösse der kleinsten Wirbel beispielsweise etwa $\mathcal{O}(0.1 - 1\text{mm})$ und liegt somit viele Grössenordnungen über der molekularen mittleren freien Weglänge [11, 84].

⁵Abk.: *Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation*

und die *Large Eddy Simulation (LES)*, die nur die Feinstruktur, d.h. die kleinsten mit dem Berechnungsgitter nicht mehr auflösbaren Wirbel, modelliert.

4.1.5 Reynolds-gemittelte Navier-Stokes Gleichungen (RANS)

Wählt man einen im Vergleich zur charakteristischen Zeitskala der turbulenten Fluktuationen langen Zeitraum zur Erfassung der mittleren Bewegung und der Schwankungsbewegung, kann der mittlere Zustand einer turbulenten Strömung berechnet werden. Die zeitabhängigen Strömungsgrößen (Geschwindigkeit, Druck, Temperatur) können nach REYNOLDS in einen zeitlichen *Mittelwert* und eine *Schwankungsgrösse* zerlegt werden. Beispielsweise gilt für die Geschwindigkeit

$$u_i(x_i, t) = \bar{u}_i(x_i) + u'_i(x_i, t) \quad . \quad (4.18)$$

Die *Reynolds-Mittelung* für eine im (statistischen) Mittel stationäre Strömung ist

$$\bar{u}_i(x_i) = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} u_i(x_i, t) dt \quad \text{und} \quad \overline{u'_i(x_i, t)} \equiv 0 \quad , \quad (4.19)$$

da der Mittelwert einer unkorrelierten Schwankungsgrösse verschwindet. Anwendung auf alle zeitabhängigen Größen und Einsetzen der Zerlegung in die Kontinuitäts- und Impulsgleichungen liefert nach nochmaliger Ensemble-Mittelung⁶, um die turbulenten Fluktuationen zu eliminieren und die mittlere Bewegung zu erhalten, die *Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen*. In der Boussinesq-Approximation lauten diese im inkompressiblen Fall gemeinsam mit der Energiegleichung:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.20)$$

$$\rho \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \rho \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\underbrace{-\mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)}_{\bar{\tau}_{ij}^{mol}} + \underbrace{\rho \overline{u'_i u'_j}}_{\tau_{ij}^{turb}} \right] + \rho_0 g_i (1 - \beta(\bar{T} - T_0)) \quad (4.21)$$

$$\rho c_p \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \rho c_p \bar{u}_i \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\underbrace{-\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i}}_{\bar{q}_i^{mol}} + \underbrace{\rho c_p \overline{u_i T}}_{q_i^{turb}} \right] \quad (4.22)$$

In der Energiegleichung wurde dabei der Term der viskosen Dissipation vernachlässigt, d.h. der Einfluss der Temperaturerhöhung durch mechanische Arbeit des Fluids sei klein gegenüber der inneren Energie. Der zusätzliche symmetrische Tensor τ_{ij}^{turb} aus sechs neuen Unbekannten (drei Normal- und drei Schubspannungen) auf der rechten Seite von Gl. (4.21) entspricht dem 'turbulenten Impulstransport', d.h. einem (oftmals diffusiv behandelten) advektiven Transport mit den Schwankungsbewegungen, und wird als *Reynolds-Spannungstensor* bezeichnet [50, 205]. Der neu hinzugekommene Term q_i^{turb} in Gl. (4.22) steht für den Transport der Temperaturfluktuationen, die Grösse \bar{q}_i^{mol} entspricht dem mittleren molekularen Wärmetransport

⁶Mittelung über grosse Anzahl von unabhängigen Stichproben, Langzeit-Mittel.

(Fouriersches Gesetz). Die turbulenten Scheinspannungen überwiegen dabei im voll ausgebildeten turbulenten Bereich und verschwinden im wandnahen Bereich, der von viskosen Kräften geprägt ist. Die Suche nach Lösungen für die unbekanntenen Spannungen wird als *Schliessungsproblem* der Turbulenz bezeichnet.

Sogenannte *Reynoldsspannungsmodelle* lösen die 'exakten' Transportgleichungen der Komponenten des Spannungstensors, wobei bei deren Herleitung neue unbekannte Korrelationen höherer Ordnung entstehen, die modelliert werden müssen. Die Methode ist mit erheblichem Mehraufwand verbunden. Eine Übersicht wird von RODI in [157] gegeben.

Üblicherweise verwendet man deshalb empirische bzw. halb-empirische Modelle, um die Reynoldsspannungen durch andere Parameter zu ersetzen und somit das Gleichungssystem zu schliessen. Diese Modelle können anhand der Anzahl der zusätzlich gelösten Transportgleichungen klassifiziert werden. Man unterscheidet Null-, Ein- und Zwei-Gleichungsmodelle. Beispiel für ein algebraisches Wirbelviskositätsmodell (d.h. ein Null-Gleichungsmodell) ist die berühmte Mischungsweghypothese von PRANDTL [168]. In der Praxis finden häufig Zwei-Gleichungsmodelle Anwendung, wie beispielsweise das auf die Arbeit von LAUNDER & SPALDING zurückgehende k - ϵ -Modell [121]. Eine sehr gute Übersicht über die verschiedenen Modelle wird beispielsweise von BREUER in [25] gegeben.

4.1.6 Large-Eddy Simulation (LES)

Einen erfolgversprechenden Ansatz stellt die *Large-Eddy Simulation (LES)* als Mittelweg zwischen vollständiger Auflösung und vollständiger Modellierung aller Skalen des turbulenten Spektrums dar, die mit steigender Rechnerleistung zunehmend an Attraktivität gewinnt. Bei dem auch als *Grobstruktursimulation* bezeichneten Verfahren werden die Navier-Stokes Gleichungen *volumengemittelt* gelöst, wobei die grossskaligen energiereichen Wirbel des turbulenten Spektrums durch das numerische Verfahren *direkt aufgelöst* und der Einfluss der Feinstruktur auf die Grobstruktur *modelliert* wird. Das mittlere zeitliche Geschwindigkeitsfeld kann durch nachträgliche Mittelung erhalten werden. Das Feinstrukturmodell muss dabei den Energietransfer zwischen den Skalen, d.h. den Entzug von kinetischer Energie, korrekt abbilden. Gegenüber dem RANS-Ansatz besitzt dies den Vorteil, dass nur die durch den gewählten Gitterknotenabstand des numerischen Verfahrens nicht mehr auflösbaren Wirbelstrukturen modelliert werden müssen. In der Feinstruktur kann näherungsweise von der Homogenität und der Isotropie der Turbulenz ausgegangen werden, womit Feinstrukturmodelle wesentlich einfacher sein können als Modelle, die das gesamte Spektrum abzudecken versuchen [25, 164, 205].

Die kleinsten Skalen werden allgemein durch Filterfunktionen der Art

$$u_i(x_i, t) = \tilde{u}_i(x_i) + u'_i(x_i, t) \quad (4.23)$$

unterdrückt, wobei beispielsweise eine implizite Filterung einer Mittelung über ein Gitter-Volumenelement

$$\tilde{u}_i(x_i) = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_{z-\Delta z/2}^{z+\Delta z/2} \int_{y-\Delta y/2}^{y+\Delta y/2} \int_{x-\Delta x/2}^{x+\Delta x/2} u_i(x, y, z) dx dy dz \quad (4.24)$$

entspricht [205]. Weitere Filterungsansätze können beispielsweise der Arbeit von BREUER entnommen werden [25]. Die Filterung führt auf zusätzliche Feinstruktur-Spannungen (Index: *sgs* für 'subgrid scale'), die den Reynoldsschen Spannungen jedoch lediglich formal ähneln, denn im Gegensatz zur Reynolds-Zerlegung in einen zeitlichen Mittelwert und einen Schwankungsanteil findet bei LES die Zerlegung in einen Grob- und einen Feinstrukturanteil statt, wobei eine wiederholte Anwendung eines Filters auf einen bereits gefilterten Term andere Resultate liefern kann als es bei der statistischen Mittelwertbildung der Fall ist. Mit den Vereinfachungen aus den vorhergehenden Abschnitten lauten die Grundgleichungen nun:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.25)$$

$$\rho \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \rho \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{\tau}_{ij}^{mol} + \tau_{ij}^{sgs}) + \rho_0 g_i (1 - \beta(\tilde{T} - T_0)) \quad (4.26)$$

$$\rho c_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \rho c_p \tilde{u}_i \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{q}_i^{mol} + q_i^{sgs}) \quad (4.27)$$

Der Feinstruktur-Spannungstensor kann in einen deviatorischen (anisotropen) und einen isotropen Anteil zerlegt werden. Letztgenannter wird in der Regel implizit dem gefilterten Druck hinzuaddiert [25, 79, 112], d.h. der anisotrope Anteil muss modelliert werden.

$$\tau_{ij}^{sgs} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j = \underbrace{\tau_{ij}}_{anisotrop} + \underbrace{\frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk}^{sgs}}_{isotrop} \quad (4.28)$$

Smagorinsky-Modell. Zur Modellierung des Terms τ_{ij} werden üblicherweise algebraische Feinstrukturmodelle verwendet [25]. Bei dem 1963 von SMAGORINSKY vorgeschlagenen Wirbelviskositätsansatz [184] werden die Dissipationseffekte als Scheinzähigkeit interpretiert, d.h.

$$\tau_{ij} = -2\mu_T \tilde{\epsilon}_{ij} \quad \text{mit} \quad \tilde{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.29)$$

wobei $\tilde{\epsilon}_{ij}$ dem Deformationstensor entspricht. Die Wirbelviskosität $\nu_T = \mu_T/\rho$ ist dabei keine Stoffgröße, sondern muss als Funktion der Turbulenzstruktur, d.h. eine Art Austauschkoefizient, verstanden werden [205]. Mit der *Smagorinsky-Konstante* C_s lautet der Ansatz für μ_T

$$\mu_T = \rho C_s^2 \Delta^2 |\tilde{\epsilon}_{ij}| \quad \text{mit} \quad |\tilde{\epsilon}_{ij}| = \sqrt{2 \tilde{\epsilon}_{ij} \tilde{\epsilon}_{ij}}, \quad (4.30)$$

wobei das charakteristische Längenmass $\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$ implizit über die Maschenweite des Rechengitters gegeben ist. Im Limes $\Delta \rightarrow 0$ verschwinden die Scheinspannungen somit. Der theoretische Wert der Smagorinsky-Konstante ist $C_s \approx 0.16$; in der Praxis sollte sie nach BREUER bei Scherströmungen in Abhängigkeit vom Strömungsproblem aus dem Intervall $C_s \approx [0.065; 0.1]$ gewählt werden [25]. Damit das Modell auch im wandnahen Bereich angewendet werden kann, muss der Feinstrukturspannungstensor dort gegen Null streben. Dies kann durch Skalierung der Feinstrukturlänge $C_s \Delta$ mit Hilfe einer Dämpfungsfunktion erfolgen.⁷

⁷Diese sogenannte VAN-DRIEST-Dämpfungsfunktion ist beispielsweise in [25] beschrieben.

Im Rahmen dieser Arbeit findet der wandnahe Bereich dabei keine gesonderte Berücksichtigung (vgl. Kapitel 5, Ausblick). An Wänden gilt die Stokessche Haftbedingung, alle Geschwindigkeitskomponenten sind dort Null. Nach dem universellen Wandgesetz kann die Struktur einer turbulenten Grenzschicht in eine viskose Unterschicht, eine Übergangsschicht und einen logarithmischen (voll-turbulenten) Bereich unterteilt werden [168]. Wird die viskose Unterschicht nicht aufgelöst bzw. kann diese auf Grund hoher Reynoldszahlen nicht aufgelöst werden, muss der wandnahe Bereich mit Hilfe eines *Wandmodells* approximiert werden, wobei der Verlauf des Geschwindigkeitsfeldes angenommen wird. Für LES wurden beispielsweise folgende Wandmodelle vorgeschlagen:

- Wandmodell nach DEARDORFF [42]
- Wandmodell nach SCHUMANN [174]
- Wandmodell nach WERNER & WENGLER [208]

4.2 Gitter-Boltzmann Verfahren

In den letzten Jahren wurde mit der Gitter-Boltzmann Methode ein neuartiger und zu den üblichen Verfahren komplementärer Ansatz zur numerischen Simulation von Strömungs- und Transportvorgängen entwickelt. Die Vorteile liegen darin, dass das Verfahren keine numerische Viskosität aufweist und, verglichen mit anderen expliziten Finite-Differenzen Verfahren, eine ungleich höhere maximale Element-Reynoldszahl zulässt. Weiterhin kann, wie bereits bemerkt wurde, durch die Verwendung geeigneter Diskretisierungstechniken (Baumdatenstrukturen, vgl. Abschnitt 3.1.2.1 bzw. 3.5.4) eine rationelle CAD-Anbindung und Gittergenerierung realisiert werden. Mit Hilfe dieser Technik kann der Arbeitsaufwand zur Definition eines numerischen Rechengitters, verglichen mit dem bei Finite-Volumen Verfahren üblichen Vernetzungsprozess, deutlich reduziert werden.

Das Gitter-Boltzmann Verfahren wurde von zahlreichen Wissenschaftlern weiterentwickelt. Beispielsweise finden sich seit kurzem Ansätze einer a priori Gitterverfeinerung (z.B. [38, 69]), Arbeiten im Bereich von Finite-Volumen Ansätzen auf unstrukturierten Gittern [141], implizite Ansätze [190] und thermische Modelle (vgl. Abschnitt 4.3.1). Weiterhin können mit Lattice-Boltzmann Verfahren auch Fragestellungen im Bereich von Diffusions- und Reaktions- sowie Mehrkomponenten- und Mehrphasenproblemen behandelt werden, vgl. z.B. [181, 189].

Die elementare Idee des Gitter-Boltzmann Verfahrens besteht darin, ein Fluid als Ensemble von miteinander interagierenden Partikeln zu betrachten und das Verhalten eines Vielteilchensystems zu simulieren, dessen mikroskopisches Modell so einfach wie möglich konstruiert wird [209]. Wird ein hinreichend grosses Ensemble von Partikeln betrachtet, können auf einer makroskopischen Skala hydrodynamische Eigenschaften wiedergegeben werden. Im Umfeld der Gittergas-Verfahren (LGCA) wurde ein Gas als Ensemble vieler 'Moleküle' beschrieben, die über Kollisionen an den Knoten und Rändern eines regulären Gitters lokal miteinander interagieren [112]. Infolge einiger unphysikalischer Effekte, wie z.B. dem nicht-isotropen Advektionsterm und dem Rauschen insbesondere des Druckfeldes, führten MCNAMARA & ZANETTI einige Jahre später, 1988, die Lattice-Boltzmann Verfahren als numerische Methode ein [211].

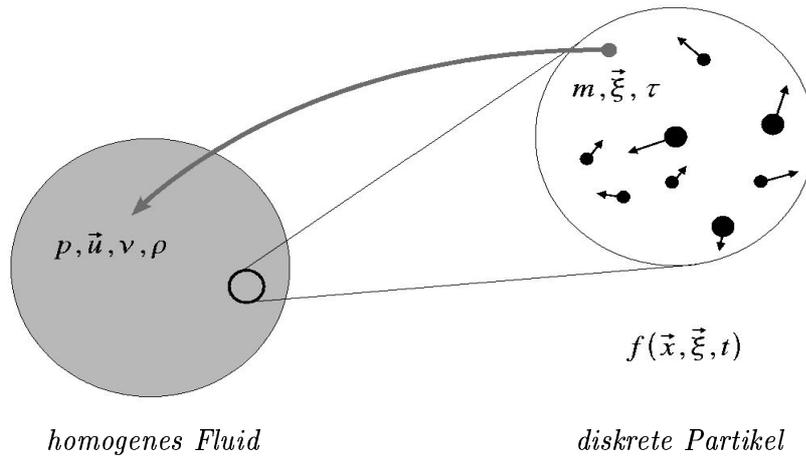


Abbildung 4.1: Abstraktionsniveaus: Kontinuum vs. statistische Physik [17]

4.2.1 Boltzmann-Gleichung

Der wesentliche Unterschied zum Gittergas-Ansatz besteht in einem Übergang von explizit diskreten Partikeln zur Propagation und Kollision eines Satzes von *Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen*, die im Folgenden auch kurz als 'Verteilungsfunktionen' bezeichnet werden. Nachdem sich die Simulation von individuellen Wechselwirkungen zwischen einzelnen Partikeln, die mit den Gesetzen der Molekulardynamik beschrieben werden können, aufgrund der grossen Partikelanzahl ($\mathcal{O}(10^{19})$ Partikel je cm^3) verbietet (Hamiltonsche Gleichungen), stellt die Abstraktionsstufe der kinetischen Gastheorie mit der statistischen Physik eine Alternative dar [33, 209]. Die Struktur dieses und des nächsten Abschnittes folgt nun den Darstellungen von KRAFCZYK [112], TÖLKE [189] und WOLF-GLADROW [209].

Die *Boltzmann-Gleichung* (4.31) beschreibt die Wahrscheinlichkeit, ein Partikel der Geschwindigkeit $\vec{\xi}_i$ zu einem gegebenen Zeitpunkt und Ort (t, \vec{x}_i) zu finden. Zur Herleitung der Boltzmann-Gleichung (4.31) werden weiterhin folgende wesentliche Vereinfachungen angenommen:

- Partikel sind statistisch unkorreliert (Hypothese des molekularen Chaos), d.h. die Zeitdauer zwischen zwei Kollisionen sei grösser als die Kollisionsdauer.
- Die Partikel seien gleichförmig, es werden nur binäre Kollisionen betrachtet, d.h. der Durchmesser der Teilchen ist sehr viel kleiner als der mittlere Abstand zwischen den Teilchen.
- Der lokale Kollisionsprozess wird nicht durch externe Kräfte beeinflusst, d.h. diese sind klein gegenüber den Kollisionskräften.

Boltzmann-Gleichung. Mit der substantiellen Änderung der Verteilungsfunktionen Df/Dt bezüglich der mikroskopischen Geschwindigkeit $\vec{\xi}$ und mit den äusseren Kräften \vec{F} auf der linken Seite und dem Kollisionsintegral $\Omega(f, f)$ auf der rechten Seite lautet die Integro-Differen-

tialgleichung für die Verteilungsfunktionen $f(t, \vec{x}, \vec{\xi})$ nach BOLTZMANN:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{\xi}} = \Omega(f, f) \quad (4.31)$$

Der bilineare Operator $\Omega(f, f)$ beschreibt dabei den komplexen Kollisionsprozess zwischen je zwei Partikeln mit den Geschwindigkeiten $\vec{\xi}, \vec{\xi}_1$ vor bzw. $\vec{\xi}', \vec{\xi}'_1$ nach dem Stoss mit dem differentiellen Wirkungsquerschnitt $\sigma(\Omega)$ [109, 209]:

$$\Omega(f, f) = \int \int \sigma(\Omega) |\vec{\xi} - \vec{\xi}_1| [f(\vec{\xi}')f(\vec{\xi}'_1) - f(\vec{\xi})f(\vec{\xi}_1)] d\Omega d\vec{\xi}_1 \quad (4.32)$$

Makroskopische Grössen. Bildet man die Momente der Verteilungsfunktionen bezüglich der mikroskopischen Geschwindigkeit $\vec{\xi}$, so erhält man die makroskopischen Grössen *Dichte* ρ und *Impulsdichte* ρu_α (komponentenweise) als Momente nullter und erster Ordnung zu

$$\rho(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, \vec{\xi}, \vec{x}) d\vec{\xi} \quad (4.33)$$

$$\rho(t, \vec{x}) u_\alpha(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_\alpha f(t, \vec{\xi}, \vec{x}) d\vec{\xi} \quad (4.34)$$

Somit kann die makroskopische Geschwindigkeit $u_\alpha(t, \vec{x})$ als Mittelwert der mikroskopischen Teilchengeschwindigkeiten dargestellt werden. Der *Impulsstromtensor* $\Pi_{\alpha\beta}(t, \vec{x})$ ergibt sich als Moment zweiter Ordnung zu

$$\Pi_{\alpha\beta}(t, \vec{x}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_\alpha \xi_\beta f(t, \vec{\xi}, \vec{x}) d\vec{\xi} = \rho u_\alpha u_\beta + D_{\alpha\beta} \quad (4.35)$$

Bildet man das Moment zweiter Ordnung bezüglich der Eigengeschwindigkeit ($\vec{\xi} - \vec{u}$), erhält man den *Drucktensor* $D_{\alpha\beta}(t, \vec{x})$. Dieser kann nach [189] als Rate, mit welcher der differentielle Impulsanteil in β -Richtung in α -Richtung transportiert wird, interpretiert werden. Für $\vec{u} = 0$ gilt $\Pi_{\alpha\beta}(t, \vec{x}) = D_{\alpha\beta}(t, \vec{x})$. Der Drucktensor kann dabei wiederum in einen hydrostatischen und einen deviatorischen Anteil aufgespalten werden. c_s entspricht der (physikalischen) Schallgeschwindigkeit.

$$D_{\alpha\beta}(t, \vec{x}) = \underbrace{\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}}_{\text{hydrostatischer Anteil}} - \underbrace{S_{\alpha\beta}}_{\text{Spannungstensor}} \quad (4.36)$$

Kollisionsinvarianten. Es kann gezeigt werden, dass das Kollisionsintegral, eben im Sinne der geforderten Massen-, Impuls- und Energieerhaltung während des Kollisionsprozesses, genau fünf Kollisionsinvarianten $\psi_0 = 1$, $(\psi_1, \psi_2, \psi_3) = \vec{\xi}$ und $\psi_4 = \xi^2$, besitzt, die anschaulich proportional sind zu Masse, Impuls und kinetischer Energie. Es gilt

$$\int \Omega(f, f) \psi_k(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = 0 \quad (4.37)$$

Makroskopische Erhaltungsgleichungen. Durch Multiplikation der Boltzmann-Gleichung mit den Invarianten ψ_k (mit $k = 0, \dots, 4$) und durch anschließende Integration über den mikroskopischen Geschwindigkeitsraum ergeben sich die makroskopischen Erhaltungsgleichungen. Das Integral über den Kollisionsoperator ist dabei per Definition Null.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(\vec{\xi}) \left[\underbrace{\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial \vec{x}}}_{Df/Dt} + \underbrace{\Omega(f, f)}_{\int \Omega d\vec{\xi} = 0} \right] d\vec{\xi} = 0 \quad (4.38)$$

Für $k = 0$ mit $\psi_0 = 1$ und mit Gl. (4.33) und Gl. (4.34) ergibt sich die *Massenerhaltung*:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0 \quad (4.39)$$

Für $k = 1, 2, 3$ mit $\psi_{1,2,3} = \vec{\xi}$ und mit Gl. (4.34) und Gl. (4.35) ergibt sich die *Impulserhaltung* (zur Aufspaltung von $D_{\alpha\beta}$ vgl. auch Gl. (4.36)):

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial (\rho u_\beta)}{\partial x_\alpha} = - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} D_{\alpha\beta} \quad (4.40)$$

Für $k = 4$ mit $\psi_4 = \xi^2$ ergibt sich eine Erhaltungsgleichung für die (mechanische) Energie.

Gleichgewichtsverteilung. Die *Maxwell-Verteilung* $f^{(0)}$ stellt eine Lösung der Boltzmann-Gleichung für den Fall einer einheitlichen Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung dar (uniformer Zustand des Gases). Gleichung (4.31) reduziert sich in diesem Fall auf das Kollisionsintegral (4.32), da dann $Df/Dt = 0$ gilt. Mit der Schallgeschwindigkeit c_s , der mittleren makroskopischen Geschwindigkeit \vec{u} und der absoluten mikroskopischen Geschwindigkeit $\vec{\xi}$ erhält man die *lokale* Gleichgewichtsverteilung im d -dimensionalen Raum nach Gleichung (4.41). Für $\vec{u} = 0$ geht diese in die *absolute* Gleichgewichtsverteilung $f^{(eq)}$ über.

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi c_s^2)^{d/2}} e^{-(\vec{\xi} - \vec{u})^2 / (2c_s^2)} \quad (4.41)$$

BGK Approximation. Um später die Navier-Stokes Gleichungen ableiten zu können (siehe unten) und um die Effizienz bei der numerischen Simulation zu steigern, verwendet man einen linearisierten Kollisionsoperator bezüglich der Gleichgewichtsverteilung. Trotz beliebiger Komplexität des lokalen Kollisionsoperators $\Omega(f, f)$ ist es dabei in der Regel ausreichend, diesen mit der 1954 von BHATNAGAR, GROSS & KROOK vorgeschlagenen *Single-Time Relaxation Approximation (STRA)* [18] zu vereinfachen, da die detaillierte Wiedergabe von Partikelinteraktionen, verglichen mit der Approximation, keinen gravierenden Einfluss auf das makroskopische Verhalten besitzt [209]. Diese Näherung wird auch als sogenannter BGK-Stossterm Ω bezeichnet und stellt eine weitere Vereinfachung gegenüber der Linearisierung des Operators dar.

$$\Omega(f, f) \approx \Omega = \frac{1}{\tau} (f^{(0)} - f) \quad (4.42)$$

Die Partikelverteilungsfunktionen werden in Richtung der lokalen Maxwell-Verteilung $f^{(0)}$ relaxiert, wobei die Zeitskala der mikroskopischen Relaxationszeit durch die Materialkonstante

τ [s] gegeben ist. Der Operator Ω erfüllt die Bedingung nach Gleichung (4.37).

Chapman-Enskog Analyse. Mit Hilfe einer Multiskalen-Analyse, der sogenannten *Chapman-Enskog Entwicklung*, einer anspruchsvollen mathematischen Ableitung, die etwa 1917 von CHAPMAN und ENSKOG vorgeschlagen wurde [33], ist es möglich, die Navier-Stokes Gleichungen und ihre Materialparameter direkt von der Boltzmann-Gleichung abzuleiten. Dabei kann u.a. ein Ausdruck für den Drucktensor $D_{\alpha\beta}$ in den makroskopischen Grössen Dichte und Geschwindigkeit gefunden werden. Während der Analyse wird die Boltzmann-Gleichung in eine dimensionslose Form überführt, wobei die sogenannte *Knudsen-Zahl*

$$\epsilon = \frac{c_r \tau}{L_r} \quad (4.43)$$

als dimensionslose Kennzahl erhalten wird. Sie beschreibt das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge $c_r \tau$ der Teilchen zwischen zwei Stössen (c_r ist eine charakteristische mikroskopische Geschwindigkeit) zu einer makroskopischen Längenskala L_r . Da im Zusammenhang mit der Chapman-Enskog Analyse die Verteilungsfunktionen um das lokale Gleichgewicht entwickelt werden, erhält man als Restriktion eine Beschränkung des Gültigkeitsbereiches auf kleine Mach-Zahlen Ma und kleine Knudsen-Zahlen ϵ , d.h. das Verfahren ist für näherungsweise inkompressible Strömungen anwendbar. Mit der dynamischen Viskosität $\mu = \tau c_s^2 \rho$ kann man den allgemeinen Drucktensor in den Impulsgleichungen (4.40) damit zu

$$D_{\alpha\beta} = c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} - \mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (4.44)$$

bestimmen. Dies entspricht dem Spannungstensor der Navier-Stokes Gleichungen nach Gleichung (4.2). Die Methode ist beispielsweise in den Arbeiten von KRAFCZYK [112], TÖLKE [189] und CROUSE [38] ausführlich beschrieben, worauf der Leser an dieser Stelle verwiesen wird.

Die Anwendbarkeit der Chapman-Enskog Analyse ist dabei nicht unumstritten. In den Arbeiten von D'HUMIÈRES, LALLEMAND und LUO [44, 117, 118] wird ein Verfahren vorgestellt, wie die makroskopischen Gleichungen unter Umgehung der Chapman-Enskog Analyse erhalten werden können. Das Hauptargument ist dabei, dass die Analyse auf der Annahme der Separierbarkeit der kinetischen und der hydrodynamischen Skalen in realen Fluiden beruht, die bei einer näherungsweise Betrachtung des hydrodynamischen Verhaltens mit nur wenigen Gitterknoten in Frage zu stellen ist. Die äusserst komplizierte Herleitung basiert auf der generalisierten Gitter-Boltzmann Gleichung nach D'HUMIÈRES und analysiert die Dynamik der Momente der Verteilungsfunktionen hinsichtlich der Wellenzahlabhängigkeit der Transportkoeffizienten [112, 117].

4.2.2 Von der Boltzmann- zur Lattice-Boltzmann Gleichung

Phasenraum-Diskretisierung. Die Diskretisierung der Boltzmann-Gleichung (4.31) mit BGK-Näherung (4.42) erfolgt prinzipiell in zwei Schritten. Zunächst wird die Boltzmann-Gleichung bezüglich des mikroskopischen Geschwindigkeitsraumes diskretisiert; Zeit und Ort bleiben jedoch noch kontinuierlich. Mit anderen Worten, man wählt eine endliche Menge von

Verteilungsfunktionen aus, die sich nun jeweils mit einer *diskreten* mikroskopischen Geschwindigkeit durch den Raum bewegen. Unter der Annahme kleiner Knudsen-Zahlen ist es dabei ausreichend, den sogenannten diskreten Phasenraum mit einer verhältnismässig geringen Anzahl diskreter Verteilungsfunktionen $f(t, \vec{x}, \vec{e}_i)$ aufzuspannen [189]. Die Verteilungsfunktionen $f(t, \vec{x}, \vec{\xi})$ werden somit durch die Werte $f(t, \vec{x}, \vec{e}_i)$ an N Kollokationspunkten \vec{e}_i dargestellt. Mit der (frei wählbaren) Informationsausbreitungsgeschwindigkeit des numerischen Modells c und der Einheitsbasis \vec{e}_i ergibt sich für die diskreten mikroskopischen Geschwindigkeiten $\vec{\xi}_i$ des Phasenraums

$$\vec{\xi}_i = c \vec{e}_i \quad . \quad (4.45)$$

Die Boltzmann-Gleichung geht damit in ein System von N partiellen Differentialgleichungen, die sogenannten *diskreten Boltzmann Gleichungen*, über, deren Variablen nun nur noch vom Ort \vec{x} und der Zeit t abhängen:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{\xi}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{x}} = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{(0)}) \quad \text{mit } i = 1, \dots, N \quad (4.46)$$

Wahl der Kollokationspunkte. Nach TÖLKE müssen die Kollokationspunkte so gewählt werden, dass einerseits korrekte makroskopische Gleichungen aus der Chapman-Enskog Analyse erhalten werden und sich andererseits aus den im diskreten Phasenraum durch \vec{e}_i definierten Basiszellen auch ein raumfüllendes numerisches Rechengitter ergibt. Für eine ausführliche Darstellung sei auf [182, 189] verwiesen. Die am häufigsten verwendeten Modelle sind das $d2q9$ -, $d3q15$ - und das $d3q19$ -Modell. In der Modellbezeichnung $dAqB$ nach QIAN entspricht A der Raumdimension und B der Anzahl der Kollokationspunkte [151]. Im Rahmen dieser Arbeit wurden das 9- und das 15-Punkt Modell verwendet. Die Koordinaten der Kollokationspunkte sind spaltenweise wie folgt gegeben:

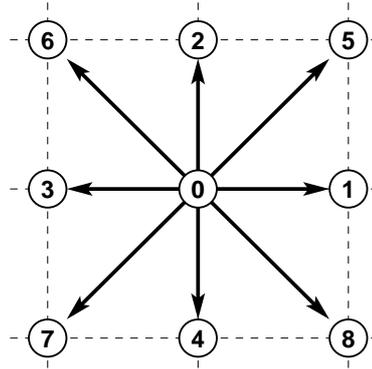
$$\{\vec{e}_i^{d2q9}\} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

$$\{\vec{e}_i^{d3q15}\} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

$$\{\vec{e}_i^{d3q19}\} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

Beispielsweise ergeben sich diese im zweidimensionalen Raum für das $d2q9$ -Modell nach Abbildung 4.2. Man unterscheidet in diesem Fall drei verschiedene Geschwindigkeiten: Ruhende Partikel besitzen somit die Geschwindigkeit $\vec{\xi}_0 = 0$, Partikel, die sich achsenparallel bewegen, die Geschwindigkeit $\vec{\xi}_{1,2,3,4} = c$ und Partikel, die sich entlang der Diagonalen bewegen, die Geschwindigkeit $\vec{\xi}_{5,6,7,8} = \sqrt{2}c$. Weitere Fälle können ferner [151, 161] und dem Anhang entnommen werden.

Gleichgewichtsverteilungen. Unter der Annahme kleiner Knudsen-Zahlen ϵ kann nun ein Ansatz für die Verteilungsfunktionen mit Bezug auf die mikroskopische Geschwindigkeit $\vec{\xi}$

Abbildung 4.2: Kollokationspunkte des $d2q9$ -Modells

gemacht werden. Da für die Integration der kontinuierlichen Gleichgewichtsverteilungsfunktion (4.41) unendlich viele Kollokationspunkte nötig wären, entwickelt man diese bezüglich der Geschwindigkeit um die absolute Gleichgewichtsverteilung $f^{(eq)}$. Die Berücksichtigung einer endlichen Zahl von Reihengliedern bei der hierfür erforderlichen Taylorentwicklung der Maxwellverteilung impliziert die Beschränkung auf kleine Machzahlen Ma . Das Vorgehen ist beispielsweise in [182] und [189] beschrieben. Der Ansatz lautet mit dem Index $p = \|\vec{e}_i\|^2$

$$f_i^{(0)}(t, \vec{x}) = t_p \rho \left[1 + \frac{e_{i\alpha} u_\alpha}{c_s^2} + \frac{u_\alpha u_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{e_{i\alpha} e_{i\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right] \quad (4.50)$$

Neben diesem Ansatz wird von HE & LUO in [90] ein für stationäre Probleme inkompressible(re)s Modell vorgeschlagen. Die Wichtungskoeffizienten t_p ergeben sich nun in Abhängigkeit vom Modell zu⁸

$$t_p^{d2q9} = \begin{cases} \frac{4}{9}, & p = 0 \\ \frac{1}{9}, & p = 1 \\ \frac{1}{36}, & p = 2 \end{cases}, \quad t_p^{d3q15} = \begin{cases} \frac{2}{9}, & p = 0 \\ \frac{1}{9}, & p = 1 \\ 0, & p = 2 \\ \frac{1}{72}, & p = 3 \end{cases} \quad \text{und} \quad t_p^{d3q19} = \begin{cases} \frac{1}{3}, & p = 0 \\ \frac{1}{18}, & p = 1 \\ \frac{1}{36}, & p = 2 \\ 0, & p = 3 \end{cases} \quad (4.51)$$

Für die Zusammenhänge zwischen Schallgeschwindigkeit und numerischer Informationsausbreitungsgeschwindigkeit und zwischen Relaxationszeit und Viskosität gilt dabei

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} c \quad \text{und} \quad \nu = \frac{\tau}{3}. \quad (4.52)$$

Makroskopische Erhaltungsgrößen. Diese werden wiederum als Momente der Verteilungsfunktionen bestimmt und näherungsweise durch numerische Integration berechnet und

⁸Anschaulich entspricht beispielsweise beim $d2q9$ -Modell $p = 0$ der Richtung \vec{e}_0 , $p = 1$ den achsparallelen Richtungen $\vec{e}_{1,2,3,4}$ und $p = 2$ den diagonalen Richtung $\vec{e}_{5,6,7,8}$ ($p = \text{Energie}$).

ergeben sich zu

$$\rho = \sum_{i=0}^{N-1} t_p f(t, \vec{x}, \vec{e}_i) = \sum_{i=0}^{N-1} f_i \quad \text{und} \quad (4.53)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_{i=0}^{N-1} t_p \vec{e}_i f(t, \vec{x}, \vec{e}_i) = \sum_{i=0}^{N-1} \vec{e}_i f_i \quad . \quad (4.54)$$

Diskretisierung in Raum und Zeit. Die räumliche und zeitliche Diskretisierung der diskreten Boltzmann Gleichungen (4.46) mit einem expliziten Finite-Differenzen Schema führt schliesslich auf die *Lattice-Boltzmann Gleichung* (4.56). Die räumlichen Differenzenquotienten werden dabei entlang der Charakteristika $\vec{\xi}_i$ des Gleichungssystems gebildet, womit eine Übereinstimmung zwischen dem Phasenraumgitter und dem numerischen Gitter erzwungen wird. Der Informationstransport entlang der Charakteristika dieses hyperbolischen Systems erfolgt dabei jeweils in eine Richtung, womit die räumliche Diskretisierung erster Ordnung (Vorwärtsdifferenzen) ermöglicht wird.

$$\frac{f_i(t + \Delta t, \vec{x}) - f_i(t, \vec{x})}{\Delta t} + c \frac{f_i(t + \Delta t, \vec{x} + \vec{e}_i \Delta x) - f_i(t + \Delta t, \vec{x})}{\Delta x} = -\frac{1}{\tau} (f_i(t, \vec{x}) - f_i^{(0)}(t, \vec{x})) \quad (4.55)$$

Mit $\Delta x = c\Delta t$ und durch Umformung erhält man die *Lattice-Boltzmann Gleichung*

$$f_i(t + \Delta t, \vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t) = f_i(t, \vec{x}) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(t, \vec{x}) - f_i^{(0)}(t, \vec{x})) \quad . \quad (4.56)$$

Der entsprechende Algorithmus zur Lösung von (4.56) kann nun anschaulich (vgl. Abb. 4.3) in folgende zwei Schritte pro Zeitschritt unterteilt werden:

- Die Berechnung der jeweils neuen Verteilungsfunktionen hinsichtlich der rechten Seite von (4.56), der sog. *Kollision*, und
- der Advektion der Verteilungsfunktionen zu den nächsten Nachbarknoten, üblicherweise bezeichnet als *Propagation*.

Hinsichtlich der Implementierung ist dabei zu beachten, dass die Propagations-Schleifen jeweils in einer Richtung durchlaufen werden, die das Vorhalten doppelter Matrizen erübrigt. Weiterhin können durch eine entsprechende Wahl der speicherinternen Darstellung der Felder $f_i(x, y, z)$ die Speicher-Zugriffszeiten minimiert werden bzw. die Voraussetzungen für die Vektorisierbarkeit des Verfahrens geschaffen werden [112].

Die mit diesem numerischen Schema eingeführten Fehler und deren Grössenordnungen für die Momente bezüglich der inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen sind der Diskretisierungsfehler $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^2)$, der Knudsen-Fehler $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ und der Kompressibilitätseffekt $\mathcal{O}(Ma^2)$. Die Mach-Zahl $Ma = u_\tau / c_s$ setzt sich dabei aus der Schallgeschwindigkeit c_s und einer charakteristischen makroskopischen Geschwindigkeit u_τ zusammen. Der Knudsen-Fehler wurde in Abschnitt 4.2.1 im Zusammenhang mit der Chapman-Enskog Analyse bereits erwähnt. Da bei der Ableitung des Spannungstensors (4.44) Terme der Ordnung $\mathcal{O}(Ma^2)$ vernachlässigt

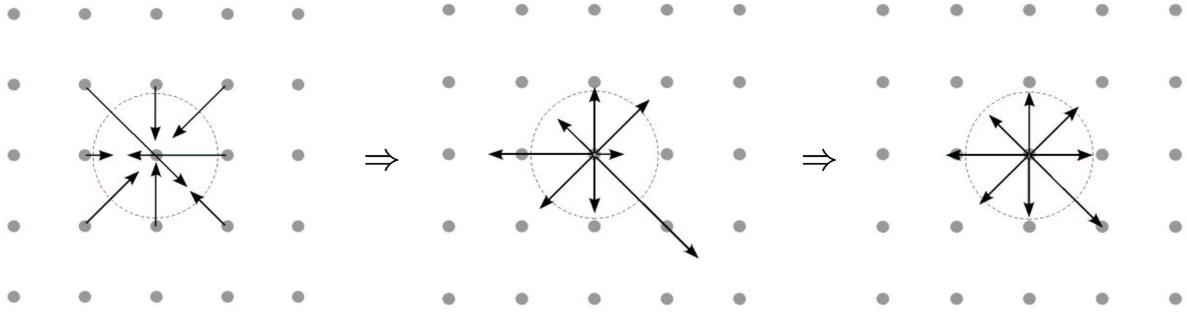


Abbildung 4.3: Propagation und Kollision ($d2q9$ -Modell).

Links: Zustand vor Propagation: einzelne Verteilungsfunktionen an benachbarten Knoten.

Mitte: Propagation der Verteilungen während Zeitschritt $\Delta t = 1$ zum Nachbarknoten.

Rechts: Relaxation mit $\tau = 2$ zur Gleichgewichtsverteilung (gestrichelt).

werden, wird ein Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon Ma^2)$ in die Impulsgleichungen eingeführt. Weiterhin beträgt in der Kontinuitätsgleichung die Abweichung von einer divergenzfreien Strömung $\mathcal{O}(Ma^2)$ [189]. Zusammenfassend erhält man somit mit dem Differenzschema erster Ordnung bezüglich der einzelnen Verteilungen eine Approximationsgüte zweiter Ordnung hinsichtlich der hydrodynamischen Momente.

Nach TÖLKE kann die Viskosität des numerischen Schemas als Korrekturterm zu (4.52) bestimmt werden, womit sich für die dynamische Viskosität folgender Term ergibt:

$$\nu = c^2 \rho \left(\frac{\tau}{3} - \frac{\Delta t}{6} \right) \quad (4.57)$$

Der Spannungstensor ergibt sich zu

$$S_{\alpha\beta} = - \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \sum_{i=0}^{N-1} e_{i\alpha} e_{i\beta} (f_i - f_i^{(0)}) \quad (4.58)$$

Dabei ist bemerkenswert, dass seine Komponenten nicht wie bei üblichen 'Top-Down' Diskretisierungsansätzen durch Bildung von Ableitungen des berechneten Geschwindigkeitsfeldes bestimmt werden müssen, sondern *als lokale Knotengrösse* vorliegen. Dies wird sich bei der Turbulenzmodellierung als äusserst vorteilhafte Eigenschaft erweisen. Mit der numerischen Informationsausbreitungsgeschwindigkeit $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ kann als Zustandsgleichung für den Druck geschrieben werden

$$p = \rho c_s^2 = \frac{1}{3} \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2} \rho \quad (4.59)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wird auf äquidistanten Gittern gerechnet und $\Delta t = \Delta x = 1$ gesetzt, womit $c = 1$ gilt.

4.2.3 Generalisierte Lattice-Boltzmann Gleichung

Im letzten Abschnitt wurde die Phasenraum- und Zeitdiskretisierung des Verfahrens beschrieben, die auf die äusserst einfache raum-zeitliche Entwicklung, die Kollision und Propagation, führt. Dabei wurde die *Single-Time Relaxation Approximation* verwendet, um in der

Evolutionsgleichung die Menge der Verteilungsfunktionen f_i mit einer für alle Gleichungen *konstanten* Relaxationsvorschrift $\Delta t/\tau$ auf sich selbst abzubilden, wobei die Gleichgewichtsverteilungen aus Funktionen der lokalen Erhaltungsgrößen gebildet wurden.

Durch die zuvor angesprochenen Restriktionen ist der Gültigkeitsbereich des Verfahrens allgemein beschränkt. Durch Forderung kleiner Mach-Zahlen muss die charakteristische Geschwindigkeit stets $\|\vec{u}_{max}\| \ll c_s$ sein. Begrenzt man die Mach-Zahl auf $Ma = U_0/c_s \leq 0.15$, so gilt $\|\vec{u}_{max}\| \approx 0.1c$. Neben der theoretisch motivierten Forderung $\nu < \frac{1}{6}$ wird das BGK-Modell für Viskositäten $\nu \lesssim \frac{1}{100}$ numerisch instabil⁹ [38, 195], womit die problemabhängige Element-Reynoldszahl stark eingeschränkt wird.

Um die numerische Stabilität zu verbessern, wurde von D'HUMIÈRES die sogenannte *Multiple-Relaxation-Time Lattice-Boltzmann Equation (MRT)*, die auch als *generalisierte Lattice-Boltzmann Gleichung* oder kurz als *'Momentenmodell'* bezeichnet wird, vorgeschlagen [44, 151]. Die Idee besteht darin, dass der Phasenraum $\mathcal{F} = \mathbb{R}^N$, der von der Menge der Verteilungsfunktionen \vec{f} aufgespannt wird, ohne Informationsverlust in den physikalisch äquivalenten Momentenraum $\mathcal{M} = \mathbb{R}^N$, der von einer Menge von linear unabhängigen Momenten \vec{m} aufgespannt wird, abgebildet werden kann.¹⁰ Nach entsprechender Transformation erfolgt der Relaxationsprozess nun im Momentenraum. Um zu gewährleisten, dass die Transformation zwischen beiden Darstellungen reversibel ist, muss die Anzahl der Momente mit derjenigen der Verteilungsfunktionen übereinstimmen und die Matrix \mathbf{M} darf nicht singular sein.

Die Konstruktion der Transformationsmatrix \mathbf{M} (4.61) aus Monomen und Linearkombinationen der kartesischen Komponenten der diskreten Geschwindigkeiten \vec{e}_i mit Hilfe des Gram-Schmidt'schen Orthogonalisierungsverfahrens ist in [44] beschrieben. Für das inkompressible *d3q15*-Modell lauten die Transformationsvorschriften:

$$\vec{m} = \mathbf{M}\vec{f}, \quad \vec{f} = \mathbf{M}^{-1}\vec{m} \quad \text{mit} \quad (4.60)$$

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 16 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & -4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.61)$$

⁹konservative Abschätzung

¹⁰Das Superskript N bezeichnet die Anzahl der Kollokationspunkte

Die durch die Transformation erhaltenen Momente korrespondieren dabei zu folgenden physikalischen Grössen ($d3q15$ -Modell), die allgemein in die beiden Gruppen der hydrodynamischen Momente (Erhaltungsgrössen) und kinetischen Momente (nicht erhaltene Grössen) unterteilt werden können: Die Dichte ρ als Moment nullter Ordnung, die Impulsdichte in x -, y - und z -Richtung $\vec{j} = (j_x, j_y, j_z)^T$, die kinetische Energie e , das Energiequadrat ε und der Wärmeflussvektor $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)^T$ als Momente erster Ordnung, die Komponenten des Spannungstensors ($p_{xx}, p_{ww}, p_{xy}, p_{yz}, p_{zx}$) als Momente zweiter Ordnung und ein Moment dritter Ordnung m_{xyz} [118].

$$\begin{aligned} \vec{m} &= (m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6, m_7, m_8, m_9, m_{10}, m_{11}, m_{12}, m_{13}, m_{14}, m_{15})^T \\ &= (\rho, e, \varepsilon, j_x, q_x, j_y, q_y, j_z, q_z, 3p_{xx}, p_{ww}, p_{xy}, p_{yz}, p_{zx}, m_{xyz})^T \end{aligned} \quad (4.62)$$

Der Kollisionsprozess wird nun nicht mehr im Phasenraum \mathcal{F} , sondern im Momentenraum \mathcal{M} , d.h. in einer anderen Darstellung des Zustands des Fluides, vorgenommen; die Propagation erfolgt im Phasenraum \mathcal{F} . Im Sinne des MRT-Schemas folgt die Relaxation nach Gleichung (4.63), wobei, der Darstellung in [127] folgend, die Indices den Zustand bc vor der Kollision (*before collision*) und ac nach der Kollision (*after collision*) bezeichnen. Die makroskopischen Erhaltungsgrössen Dichte ρ und Impuls \vec{j} müssen gemäss den Gesetzen der Physik erhalten werden, d.h. sie nehmen nicht am Kollisionsprozess teil.¹¹ Somit gilt mit oben genannter Reihenfolge für das $d3q15$ -Modell mit den Relaxationsparametern s_i :

$$m_i^{ac} = m_i^{bc} + s_i(m_i^{(0)} - m_i^{bc}) \quad \text{mit} \quad s_i = 0 \quad \text{für} \quad i = \{1, 4, 6, 8\} \quad (4.63)$$

Für jede Klasse der kinetischen Momente können somit *individuelle* Relaxationsparameter gewählt werden, wobei diese aus Gründen der Stabilität und um die Trennung zwischen den Skalen (den kinetischen und hydrodynamischen Moden) zu erhalten, im Bereich $1 \leq s_i < 2$ liegen müssen [44]. Die *generalisierte Lattice-Boltzmann Gleichung* ergibt sich somit zu

$$\underbrace{f_i(t + \Delta t, \vec{x} + \vec{\xi}_i \Delta t) - f_i(t, \vec{x})}_{\substack{\text{Propagation:} \\ \text{Phasenraum } \mathcal{F}}} = -\mathbf{M}^{-1} \underbrace{\hat{\mathbf{S}} [m_i(t, \vec{x}) - m_i^{(0)}(t, \vec{x})]}_{\substack{\text{Kollision:} \\ \text{Momentenraum } \mathcal{M}}} \quad (4.64)$$

mit der Kollisionsmatrix

$$\hat{\mathbf{S}} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{M}^{-1} = \text{diag}(0, s_2, s_3, 0, s_5, 0, s_7, 0, s_9, s_{10}, s_{11}, s_{12}, s_{13}, s_{14}, s_{15}) \quad , \quad (4.65)$$

wobei sich der Ansatz für

$$\mathbf{S} = \omega \mathbf{I} \quad \text{mit} \quad \omega = \Delta t / \tau \quad (4.66)$$

anschaulich auf das BGK-Modell reduziert. Die Herleitung der Momentengleichgewichte $m_i^{(0)}$ und optimale Wahl für die Werte der Relaxationsparameter s_i , die durch eine mathematisch anspruchsvolle Analyse der Moden der linearisierten Boltzmann-Gleichung bestimmt werden können, ist in [117] durchgeführt worden. In [44] werden von D'HUMIÈRES ET AL. die Parameter $s_e = s_2 = 1.6$, $s_\varepsilon = s_3 = 1.2$, $s_{qy} = s_5 = 1.6$ und $s_{xyz} = s_{15} = 1.2$ vorgeschlagen (die komplementären Parameter ergeben sich durch Symmetrie). Es sei angemerkt, dass neben ihrer Bedeutung hinsichtlich Stabilitätskriterien durch diese Parameter insbesondere die

¹¹Anmerkung: Die (kinetische) Energie e ist bei nicht-thermischen Fluiden keine Erhaltungsgrösse.

kinematische und die Volumenviskosität eingestellt werden können, die von der Wahl der Parameter $s_{xx} = s_{10}$ bzw. s_e abhängen (vgl. auch Abschnitt 4.3.2).

Die Gleichgewichtsmomente $m_i^{(0)}$ ergeben sich für das $d3q15$ -Modell im inkompressiblen Fall zu:

$$e^{(0)} = -\rho + \frac{1}{\rho_0}(j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) \quad (4.67)$$

$$\varepsilon^{(0)} = -\rho, \quad m_{xyz}^{(0)} = 0 \quad (4.68)$$

$$q_x^{(0)} = -\frac{7}{3}j_x, \quad q_y^{(0)} = -\frac{7}{3}j_y, \quad q_z^{(0)} = -\frac{7}{3}j_z \quad (4.69)$$

$$p_{xx}^{(0)} = \frac{1}{3\rho_0}[2j_x^2 - (j_y^2 + j_z^2)], \quad p_{ww}^{(0)} = \frac{1}{\rho_0}(j_y^2 - j_z^2) \quad (4.70)$$

$$p_{xy}^{(0)} = \frac{1}{\rho_0}j_xj_y, \quad p_{yz}^{(0)} = \frac{1}{\rho_0}j_yj_z, \quad p_{xz}^{(0)} = \frac{1}{\rho_0}j_xj_z \quad (4.71)$$

Das MRT-Schema ermöglicht gegenüber dem BGK-Modell nach KRAFCZYK die Reduktion der kinematischen Viskosität um bis zu zwei Größenordnungen, wobei in Folge der Transformationen ein numerischer Mehraufwand von etwa 30% entsteht [112, 117].

4.3 Hybrides thermisches Gitter-Boltzmann Verfahren (HTLBE)

4.3.1 Thermische Gitter-Boltzmann Verfahren (TLBE)

An einer Erweiterung des Gitter-Boltzmann Verfahrens, um auch thermische Effekte modellieren zu können, wird derzeit international gearbeitet. Die nachstehende Darstellung folgt den beiden grundlegenden Arbeiten von LALLEMAND und LUO [117] und [118], in denen zahlreiche nicht-thermische, thermische und kompressible Gitter-Boltzmann Modelle theoretisch umfassend untersucht und miteinander verglichen worden sind.

Bislang ist es nach dieser Darstellung nicht gelungen, mit thermischen Lattice-Boltzmann Verfahren realistische thermische Strömungen zufriedenstellend abzubilden. Allgemein können zwar thermodynamische Gleichungen für die Massen-, Impuls- und Energieerhaltung von verschiedenen LB Modellen abgeleitet werden. Untersuchungen [118] haben aber gezeigt, dass das Hauptproblem bei den Verfahren, die auf einer Lösung der thermischen Lattice-Boltzmann Gleichung (TLBE) beruhen, numerische Instabilitäten sind, die durch eine algebraische Kopplung zwischen verschiedenen Moden des linearisierten Kollisionsoperators verursacht werden (unabhängig von der Anzahl der diskreten mikroskopischen Geschwindigkeiten). Die dadurch bestehende Begrenzung auf einen nur schmalen gültigen Parameterbereich der Transportkoeffizienten limitiert das Verfahren auf kleine Reynoldszahlen, womit es für ingenieurrelevante Fragestellungen uninteressant wird.

Bei thermischen Gitter-Boltzmann Modellen muss dabei eine ungleich grössere Menge von Verteilungsfunktionen als bei isothermen Modellen verwendet werden, um bei der Wahl der

Gleichgewichtsmomente für die Nicht-Erhaltungsgrößen ausreichend viele Freiheitsgrade zu haben und somit makroskopisch 'korrektes' Verhalten wiedergeben zu können. Werden weniger Geschwindigkeitsverteilungen verwendet, werden die zu fordernden Eigenschaften der Isotropie, d.h. der Unabhängigkeit bei der Wahl der Achsen des numerischen Gitters von der Strömungsrichtung, und der Galileischen Invarianz, d.h. der Beschreibung von korrektem advektiven Transport, verletzt [127]. Die Transportkoeffizienten zeigen dabei nach LALLEMAND grösseres nicht-hydrodynamisches Verhalten als diejenigen der isothermen Modelle. Weiterhin sind Modelle, die eine grosse Anzahl von Verteilungsfunktionen berücksichtigen, aufwändig und kompliziert zu implementieren, insbesondere hinsichtlich der Parallelisierung des Verfahrens oder der Verwendung hierarchischer Datenstrukturen.

Als weiterer 'Defekt' kommt hinzu, dass die *isotherme* Schallgeschwindigkeit c_{s0} von energieerhaltenden TLBE-Modellen nicht von der (inneren) Energie abhängt, sondern mit der Wahl eines mikroskopischen Geschwindigkeitsraumes fixiert wird. Unter Verwendung linearer Relaxationsmodelle kann die Temperaturabhängigkeit der Schallgeschwindigkeit c_s nicht korrekt beschrieben werden, womit ein entsprechendes makroskopisches Verhalten realer (molekularer) Gase nicht wiedergegeben werden kann [118].

Ein Ausweg aus dieser Situation, der es ermöglicht, auf der Seite der Impuls- und Energieerhaltung weiterhin die Vorteile des Lattice-Boltzmann Verfahrens zu nutzen, besteht in einer separaten Behandlung der Größen $\{Dichte\}$ und $\{Impuls\}$ und $\{Temperatur\}$ durch den Einsatz *hybrider Verfahren*.

Existierende thermische Gitter-Boltzmann Verfahren (TLBE) können allgemein in folgende drei Klassen eingeteilt werden:

- Behandlung der Temperatur als passives Skalar, das vom Strömungsfeld angetrieben wird, selber aber keinen Einfluss auf Dichte und Geschwindigkeit ausübt. Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld werden jeweils beide durch eine Menge von Verteilungsfunktionen beschrieben. Ein Beispiel ist das Modell von SHAN [180]. Diese Verfahren sind im Rahmen dieser Arbeit nicht von Interesse.
- Voll kompressible Verfahren, die eine Behandlung von Verdichtungsstößen (Thermodynamik) ermöglichen. Auch diese Verfahren sind für die vorliegende Aufgabenstellung nicht von Interesse.
- Verfahren der dritten Kategorie stellen direkte Modifikationen der nicht-thermischen Verfahren dar. Diese Verfahren beziehen die Energieerhaltung mit ein und sind charakterisiert durch kleine Mach-Zahlen und Boussinesq-Approximation.

Im Bereich der dritten Klasse wurden in den letzten Jahren in der Literatur zahlreiche Verfahren vorgeschlagen, wie das Gitter-Boltzmann Verfahren hinsichtlich Energieerhaltung erweitert werden kann, wie z.B. [89]. Von FILIPPOVA & HÄNEL wird beispielsweise in [70] ein *hybrides* Verfahren vorgestellt, das es erlaubt, signifikante Dichteänderungen infolge Temperaturänderung im Limes kleiner Mach-Zahlen unter Verwendung des BGK-Modells zu modellieren. Die Dichteänderung wird dabei über eine Modifikation der Gleichgewichtsverteilungsfunktion für die in Ruhe befindlichen Partikelsysteme ($\vec{\xi} = 0$) berücksichtigt. Die damit korrelierenden

Änderungen hinsichtlich der Bedeutung der Momente werden durch die Definition von Korrekturtermen kompensiert, um korrekte hydrodynamische Eigenschaften wiedergeben zu können.

Da die im Rahmen dieser Arbeit relevanten Fragestellungen nicht im Bereich von Verbrennungsvorgängen liegen, wird die Kopplung im Sinne von [127] über den Volumenkraftterm (Auftriebskräfte) unter Verwendung der Boussinesq-Approximation anstelle einer Kopplung über das ideale Gasgesetz als ausreichend angesehen. Insbesondere kann durch den verwendeten und nachstehend beschriebenen Ansatz [116, 118], der von LALLEMAND vorgeschlagen wurde, in Verbindung mit dem sogenannten Momentenmodell nach D'HUMIÈRES et al. [44] die numerische Stabilität des Verfahrens drastisch erhöht werden.

4.3.2 Hybrides Modell nach Lallemand und Luo

Ausgehend von der Analyse in [118] kann die Ursache der numerischen Instabilitäten bei TLBE-Verfahren eliminiert werden, indem ein geeignetes *hybrides* Modell verwendet wird. Die Betrachtung der Energieerhaltung wird dabei vollständig von der Massen- und Impulserhaltung getrennt. Zur Simulation des Geschwindigkeitsfeldes wird deshalb im Rahmen dieser Arbeit ein nicht-thermisches MRT Lattice-Boltzmann Modell verwendet, während die Simulation der (dimensionslosen) Konvektions-/Diffusionsgleichung des Temperaturfeldes (4.6) mit Hilfe eines expliziten Finite-Differenzen Verfahrens (FD) realisiert wird. Dieses Modell wird im Folgenden als *hybrides thermisches Lattice-Boltzmann Modell*, kurz HTLBE-Modell, bezeichnet. Anzumerken ist, dass dieses Verfahren deutlich weniger Freiheitsgrade als die energieerhaltenden TLBE-Verfahren benötigt.

Die Kopplung zwischen beiden Systemen erfolgt explizit, indem ein durch eine LB-Simulation erhaltenes Geschwindigkeitsfeld $\vec{u}(\vec{x}, t)$ in die Energiegleichung (4.6) eingesetzt, und die Lösung der Energiegleichung, d.h. ein Temperaturfeld $T(\vec{x}, t)$, zur Berechnung von Auftriebskräften in z -Richtung $F_z(\vec{x}, t)$ im Sinne der Boussinesq-Approximation (4.8) verwendet wird. Dabei bezeichnen β den Volumenexpansionskoeffizienten und g_z die Beschleunigung hinsichtlich Gravitation in z -Richtung.

$$F_z(\vec{x}, t) = g_z \beta \Delta t T(\vec{x}, t) \quad (4.72)$$

Im Algorithmus des expliziten Zeitschrittverfahrens wird die Volumenkraft im Momentenraum zweimal anteilig, d.h. jeweils zur Hälfte vor und nach der Relaxation der Momente, als Modifikation der Erhaltung des linearen Impulses in z -Richtung eingebracht:

$$m_8^{ac} = m_8^{bc} + \frac{1}{2} F_z(\vec{x}, t) \quad (4.73)$$

Um die Bedingung kleiner Mach-Zahlen nicht zu verletzen, muss der Betrag der Volumenkraft $F_z(\vec{x}, t)$ hinreichend klein sein; in der Praxis wird man diese in der Größenordnung $F_{max} \approx \mathcal{O}(10^{-4})$ wählen. Wird der Wertebereich der Temperatur aus dem Intervall $[-1; 1]$ gewählt, entspricht die Amplitude gerade dem Faktor $g\beta$. Bei der Untersuchung *freier* Konvektionsströmungen hat es sich dabei als zweckmässig erwiesen, zunächst die Viskosität entsprechend den Stabilitätsbedingungen einzustellen und, bei gegebener Rayleighzahl Ra , Prandtlzahl Pr und charakteristischer Länge L , den Betrag der Beschleunigungskraft für $\beta = 1$ daraus

nach Gl. (4.15) zu berechnen. Im Fall *erzwungener* Konvektion ohne thermische Auftriebskräfte werden, bei gegebener Reynoldszahl Re , die Gebietsgrösse, die maximale Geschwindigkeit und die Viskosität entsprechend gewählt, wobei die in Abschnitt 4.2.3 genannten Restriktionen bezüglich maximaler Geschwindigkeit und Viskosität gelten.

Um korrekte hydrodynamische Gleichungen zu erhalten, ist es weiterhin nötig, das Gleichgewicht des zur kinetischen Energie korrespondierenden Momentes zweiter Ordnung an die (durch das Differenzschema gewonnene) Temperatur zu koppeln. Nach [116] lauten die Gleichgewichte bzgl. der Momente m_e und m_ε für das $d3q15$ -Modell

$$m_e^{(0)} = (3c_{s0}^2 - 2)\rho + \frac{(5 - 3\gamma)}{2} \vec{j} \cdot \vec{j} - 3T(\vec{x}, t) \quad \text{und} \quad (4.74)$$

$$m_\varepsilon^{(0)} = -\rho \quad , \quad (4.75)$$

deren Parameter durch die in [118] beschriebene Stabilitätsanalyse ermittelt wurden. Die wählbare isotherme Schallgeschwindigkeit c_{s0} ist dabei u.a. durch die Forderung nach einer positiven Volumenviskosität bestimmt. Der Parameter γ entspricht dem Isentropenexponenten, d.h. dem Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten $\frac{C_p}{C_v}$ (Medium Luft: $\gamma = 1.4$ [94]). Die übrigen Gleichgewichtsmomente ergeben sich wie im isothermen Fall nach den Gleichungen (4.68) bis (4.71). Die Analyse in [118] führt auf die Schallgeschwindigkeit

$$c_s^2 = \gamma c_{s0}^2 \quad , \quad (4.76)$$

des Modells. Es kann gezeigt werden, dass damit eine entsprechende Kopplung zwischen dem Impuls- und Temperaturfeld im Sinne eines realen einatomigen Gases wiedergegeben werden kann. Auf Grund der Linearisierung des Kollisionsprozesses hängt die Schallgeschwindigkeit aber, im Widerspruch zum Verhalten molekularer Gase, nicht von der Temperatur ab.

Die Forderung nach Isotropie liefert für die Relaxationskoeffizienten des $d3q15$ -Modells die Beziehung

$$\frac{1}{s_{xy}} - \frac{1}{2} = \frac{1 - c_1}{8 + 2c_1} \left(\frac{1}{s_{xx}} - \frac{1}{2} \right) \quad , \quad (4.77)$$

wobei aus Gründen der Symmetrie

$$s_{ww} = s_{xx} \quad , \quad s_{zx} = s_{yz} = s_{xy} \quad \text{und} \quad s_{qx} = s_{qy} = s_{qz} \quad (4.78)$$

gilt. Die Transportkoeffizienten ergeben sich zu

$$\nu = \frac{1 - c_1}{10} \left(\frac{1}{s_{xx}} - \frac{1}{2} \right) \quad \text{und} \quad \zeta = \frac{13 + 2c_1 - 15\gamma c_{s0}^2}{15} \left(\frac{1}{s_e} - \frac{1}{2} \right) \quad . \quad (4.79)$$

Mit $c_1 = -7/3$ für das $d3q15$ -Modell und entsprechender Wahl der Transportkoeffizienten können somit die Relaxationsparameter bestimmt werden. Den Einfluss der Kompressibilität vernachlässigend wird man die Werte der kinematischen und der Volumenviskosität dabei in der gleichen Grössenordnung wählen.

Da der Faktor γ im konvektiven Term der mit dem Verfahren beschriebenen Energiegleichung

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \gamma u_i \frac{\partial T}{\partial x_i} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x_i^2} + (\gamma - 1) c_{s0}^2 \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (4.80)$$

enthalten ist, muss der Wärmediffusionskoeffizient zu

$$\alpha_{eff} = \alpha / \gamma \quad (4.81)$$

reskaliert werden [118]. Da die Berücksichtigung der akustischen Eigenschaften von realen Gasen für die hier betrachtete Problemklasse von untergeordneter Bedeutung ist, wird dieser Effekt zunächst vernachlässigt, indem der Parameter γ zu 1 gesetzt wird (einatomiges Gas). Somit fallen die bei der Chapman-Enskog Analyse erhaltenen zusätzlichen nichtlinearen Terme in der Energiegleichung weg [116]. Gleichung (4.80) reduziert sich in diesem Fall anschaulich auf die (inkompressible) Energiegleichung ohne viskose Dissipation (4.6).

4.3.3 Diskretisierung der Energiegleichung

Diskretisierung der Energiegleichung mit finiten Differenzen im Raum und einem expliziten Eulerverfahren erster Ordnung in der Zeit liefert

$$\frac{T_{i,j,k}(t + \Delta t) - T_{i,j,k}(t)}{\Delta t} = -\vec{J}_{i,j,k}(t) \nabla_{i,j,k}^{(h)} T_{i,j,k}(t) + \alpha \Delta_{i,j,k}^{(h)} T_{i,j,k}(t) + (\gamma - 1) c_{s0}^2 \nabla_{i,j,k}^{(h)} \cdot \vec{J}_{i,j,k}(t). \quad (4.82)$$

Zur Vermeidung numerischer Instabilitäten ist es dabei wichtig, dass die Differenzensterne, die bei der Diskretisierung der Energiegleichung verwendet werden, die gleiche Symmetrie wie die Menge der diskreten Geschwindigkeiten aufweisen, die bei der Diskretisierung des Phasenraums definiert wurden. Eine geeignete Interpolation kann durch einen Polynomansatz entsprechender Ordnung erreicht werden, indem Monome aus dem Pascalschen Dreieck gemeinsam mit daraus gebildeten Linearkombinationen als Ansatzfunktionen verwendet werden [116]. Die Verwendung von geeigneten Linearkombinationen ist nötig, da das Pascalsche Dreieck für einen Ansatz mehr Elemente liefert, als beim jeweiligen LB-Modell an Kollokationspunkten zur Verfügung stehen. Einsetzen der Kollokationspunkte des verwendeten Modells in die Polynomfunktion liefert pro Punkt eine Gleichung. Nach dem Bestimmen der Koeffizienten der Polynomfunktion durch Lösen des Gleichungssystems können die partiellen Ableitungen gebildet werden. Dies liefert die Differenzendarstellungen der entsprechenden Gradienten bzw. des Laplace-Operators für das verwendete Gitter-Boltzmann Modell.

Mit der Wahl der Ansatzfunktionen für die Polynomfunktion zu

$$\phi_0 := 1, \quad (4.83)$$

$$\phi_1 := x, \quad \phi_2 := y, \quad \phi_3 := z, \quad (4.84)$$

$$\phi_4 := x^2, \quad \phi_5 := y^2, \quad \phi_6 := z^2, \quad (4.85)$$

$$\phi_7 := xy, \quad \phi_8 := xz, \quad \phi_9 := yz, \quad (4.86)$$

$$\phi_{10} := x(x^2 + y^2 + z^2), \quad \phi_{11} := y(x^2 + y^2 + z^2), \quad \phi_{12} := z(x^2 + y^2 + z^2), \quad (4.87)$$

$$\phi_{13} := (x^2 + y^2 + z^2)^2 \quad \text{und} \quad (4.88)$$

$$\phi_{14} := xyz \quad (4.89)$$

können die Differenzen-Operatoren bezüglich der Kollokationspunkte (4.48) des $d3q15$ -Modells für einen Gitterpunkt (i, j, k) folgendermassen bestimmt werden. Die Indizierung der Temperaturen T_i bezüglich ihrer Gitterpositionen (i, j, k) folgt dabei der Numerierung der Basisvektoren \vec{e}_i^{d3q15} mit $i = 0, \dots, 14$.

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{i,j,k}^{(h)} = \frac{3}{4}(T_1 - T_2) + \frac{1}{16}(-T_7 + T_8 - T_9 + T_{10} - T_{11} + T_{12} - T_{13} + T_{14}) \quad (4.90)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{i,j,k}^{(h)} = \frac{3}{4}(T_3 - T_4) + \frac{1}{16}(-T_7 + T_8 - T_9 + T_{10} + T_{11} - T_{12} + T_{13} - T_{14}) \quad (4.91)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{i,j,k}^{(h)} = \frac{3}{4}(T_5 - T_6) + \frac{1}{16}(-T_7 + T_8 + T_9 - T_{10} - T_{11} + T_{12} + T_{13} - T_{14}) \quad (4.92)$$

$$\Delta_{i,j,k}^{(h)} = \frac{3}{2}(T_1 + T_2 + T_3 + T_4 + T_5 + T_6) + \frac{1}{8}(-T_7 - T_8 - T_9 - T_{10} - T_{11} - T_{12} - T_{13} - T_{14}) - 8T_0 \quad (4.93)$$

Besonderes Augenmerk ist auf die Implementierung der Randbedingungen zu richten. Seitens des Gitter-Boltzmann Verfahrens wird das sogenannte Bounce-Back Schema [76, 77] angewendet, um eine Hafttrandbedingung an den Wänden zu realisieren. Unter der Annahme, dass diejenigen Verteilungsfunktionen, die auf eine Wand treffen, an dieser antiparallel reflektiert werden, stellt sich die Impulsdichte auf halbem Weg zwischen Wand und erstem Fluidknoten, der sogenannten virtuellen Wandposition, im zeitlichen Mittel zu Null ein. Wird das gleiche Rechengitter für das MRT- und für das FD-Schema verwendet (koinzidierende Knoten), müssen die Randbedingungen des Temperaturfeldes in geeigneter Weise extrapoliert werden, um Dirichlet oder Neumann Bedingungen an dieser virtuellen Wandposition realisieren zu können [116]. Die Approximationsgüte des verwendeten Ansatzes zur Extrapolation sollte somit zumindest der Ordnung des numerischen Verfahrens entsprechen.

4.3.4 Validierung: Freie Konvektionsströmungen

Hinsichtlich natürlicher (freier) Konvektionsströmungen in einem vereinfachend als quader- bzw. würfelförmig angenommenen Innenraum kennt man im wesentlichen zwei Konfigurationen, die im Sinne der Ingenieur Anwendungen aus Kapitel 2 von Interesse sind [16]:

- Die Beheizung der Seitenwände eines Raumes oder
- die Beheizung des Bodens.

Voraussetzung für das Entstehen einer ausgeprägten freien Konvektionsströmung ist in der Regel das Vorhandensein von Massenkräften und Dichtegradienten, die nicht parallel zueinander gerichtet sind [11]. Neben den in Abschnitt 4.1.3 besprochenen dimensionslosen Kennzahlen besitzt das Verhältnis zwischen Grashof- und Reynoldszahl bei der Klassifizierung von Konvektionsvorgängen folgende Bedeutung:

- Für $Gr/Re^2 \approx 1$ liegen die Auftriebs- und Trägheitskräfte in der gleichen Grössenordnung,
- für $Gr/Re^2 \gg 1$ dominiert die freie Konvektion und

- für $Gr/Re^2 \ll 1$ überwiegt die erzwungene Konvektion.

Bezüglich der Konfigurationen, die im Rahmen der thermischen Gebäudesimulation von Bedeutung sind, wurden von zahlreichen Forschern eine Reihe von Korrelationen zur Bestimmung von entsprechenden konvektiven Wärmeübergangskoeffizienten abgeleitet. An dieser Stelle sei auf die zusammenfassende Übersicht von CLARKE [34] verwiesen.

Im Folgenden wird nun das im Rahmen dieser Arbeit implementierte hybride Verfahren anhand oben genannter Konfigurationen validiert. Zunächst beschränken wir uns dabei auf den zweidimensionalen Fall unter Verwendung des $d2d9$ -Modells. In Abschnitt 4.6 wird anschließend ein komplexes dreidimensionales Anwendungsbeispiel behandelt.

4.3.4.1 Wärmeübergang bei beheizten Seitenwänden

Der Wärmeübergang in einem Behältnis mit beheizten Seitenwänden wurde bereits von einigen Autoren im Kontext des Gitter-Boltzmann Verfahrens untersucht. EGGELS & SOMERS [54] haben etwa freie Konvektion von Luft in einem quadratischen Behältnis bei $Ra = 10^6$ mit einem hybriden Verfahren untersucht und konnten dabei gute Übereinstimmungen mit den Benchmark-Daten von LE QUÉRÉ [122] nachweisen. Von SHI ET AL. wurde ein (zweidimensionales) thermisches Gitter-Boltzmann Modell für Boussinesq-inkompressible Fluide entwickelt, wobei zwei unabhängige LBGK-Gleichungen zur Lösung des Geschwindigkeits- und des Temperaturfeldes verwendet wurden [183]. MEZRHAB ET AL. und LALLEMAND geben in [118] und [127] eine Konvergenzstudie bezüglich des oben beschriebenen hybriden thermischen Gitter-Boltzmann Verfahrens an. Es wurde einerseits die Nischenströmung im Sinne dieses Abschnittes in zwei und drei Raumdimensionen untersucht, weiterhin eine Stabilitätsanalyse der Rayleigh-Bénard Strömung hinsichtlich der kritischen Rayleigh-Zahl durchgeführt (vgl. auch Abschnitt 4.3.4.2). Es wurden dabei gute Übereinstimmungen mit entsprechenden Werten aus der Literatur gefunden.

Die in diesem Abschnitt betrachtete Konfiguration der Nischenströmung kann Abbildung 4.4 entnommen werden. An den Seitenwänden werden Dirichlet-Randbedingungen gesetzt, d.h. die Werte der Temperatur fest vorgegeben; an der oberen und unteren Wand wird jeweils eine adiabatische Randbedingung formuliert, womit auf den Rändern $\partial T/\partial n = 0$ gilt. Die Gravitationskraft wirkt in negativer z -Richtung. Die Situation ist von der Ausbildung einer Grenzschicht entlang der vertikalen Wände geprägt, womit eine geeignete Konfiguration

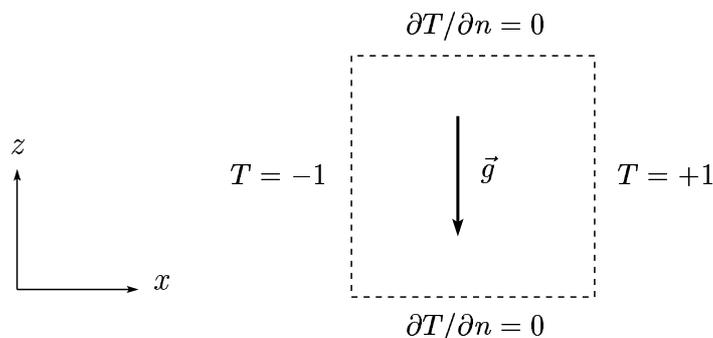


Abbildung 4.4: Konfiguration der Nischenströmung mit beheizten Seitenwänden

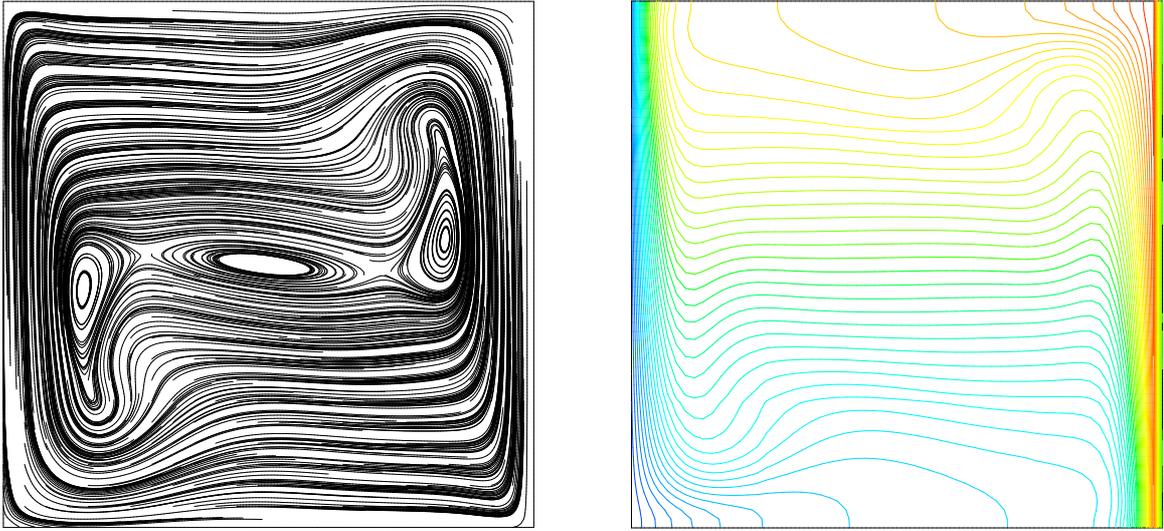


Abbildung 4.5: Stromlinien- und Isothermenverläufe bei $Ra = 10^6$, $Pr = 0.71$ und $\gamma = 1$. Als Randbedingungen wurden an den Seitenwänden jeweils die Dirichlet-Bedingungen $T_{links} = -1$ und $T_{rechts} = +1$, und an der oberen und unteren Wand die adiabatische Bedingung $\partial T/\partial n = 0$ gesetzt.

zur Studie des konvektiven Wärmeübergangs vorliegt. Je nach Seitenverhältnis unterscheidet man verschiedene Regime, die durch unterschiedliche Konvektionsarten charakterisiert sind (ausführlich z.B. in [16]). An dieser Stelle soll dabei ein quadratisches Behältnis mit jeweils N Gitterpunkten in x - und z -Richtung betrachtet werden.

Als Vergleichskriterien zwischen Simulationsergebnissen dienen in diesem Zusammenhang üblicherweise die Charakterisierung der mittleren Wärmeübertragung über die vertikalen Wände mit Hilfe der Nusselt-Zahl, die maximalen Beträge der Geschwindigkeiten entlang einer horizontalen bzw. vertikalen Ebene in der Mitte des Behältnisses und ggf. der dimensionslose vertikale Temperaturgradient in der Mitte der Nische [54]. Mit der Nusselt-Zahl kann dabei das Verhältnis zwischen konvektivem Wärmeübergang und Wärmeübertragung durch Wärmeleitung zwischen warmer und kalter Oberfläche ausgedrückt werden. Für den betrachteten Fall sind in der Literatur zahlreiche Simulationsdaten zu finden. Von DE VAHL DAVIS wurden in [41] Daten von zahlreichen Autoren quantitativ umfassend miteinander verglichen. In [40] werden entsprechende Benchmark-Daten für den Bereich $10^3 \leq Ra \leq 10^6$ zur Verfügung gestellt. Von LE QUÉRÉ sind in [122] Lösungen für Rayleigh-Zahlen bis 10^8 angegeben.

Abbildung 4.5 zeigt die auf einem Gitter der Größe 121×121 mit dem im Rahmen dieser Arbeit umgesetzten Prototypen erhaltenen Stromlinien- und Isothermenverläufe bei $Ra = 10^6$ und $\gamma = 1$ nach Konfiguration aus Abbildung 4.4. Für den Betrag der Geschwindigkeitskomponente in z -Richtung wurde dabei für ein einatomiges Gas ein maximaler Wert von $0.259\sqrt{2T_0g_z\beta N}$ ermittelt, der nahe bei den Werten von LE QUÉRÉ [122], $0.2618\sqrt{2T_0g_z\beta N}$ und EGGELS & SOMERS [54], $0.2615\sqrt{2T_0g_z\beta N}$, liegt. In Abbildung 4.6 ist der Verlauf des Geschwindigkeitsprofils der Komponente in z -Richtung für verschiedene Höhen z (Einheiten in Gitterknoten) dargestellt.

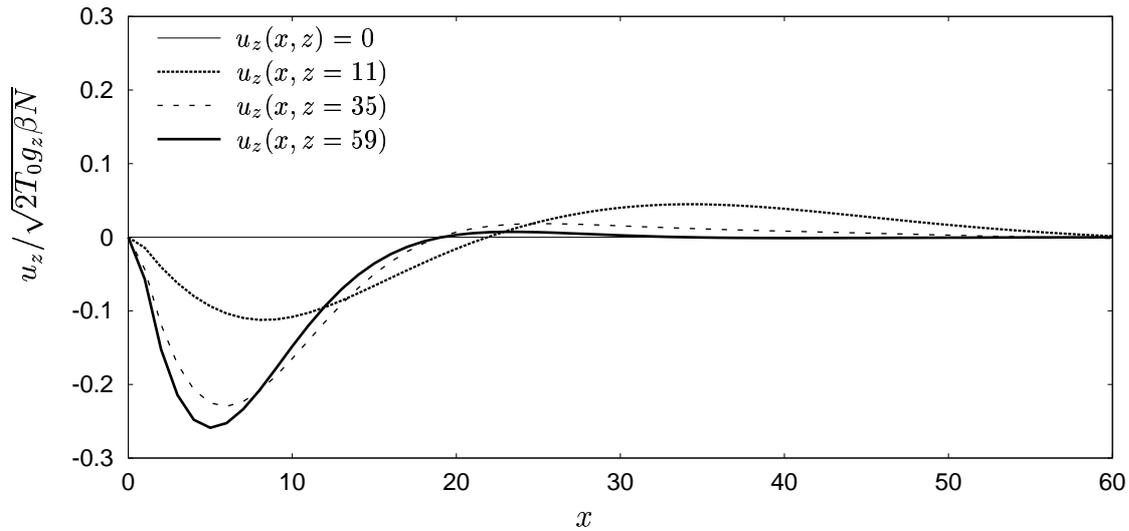


Abbildung 4.6: Verlauf der Geschwindigkeitskomponente in z -Richtung jeweils entlang einer horizontalen Ebene für verschiedenen Höhen z .

Die lokale effektive Nusselt-Zahl Nu_w und die volumengemittelte Nusselt-Zahl Nu_v werden nun für den zweidimensionalen Fall zu

$$Nu_w := \frac{1}{2T_0} \sum_1^{N_z-1} \left[\frac{\partial T}{\partial x} \right]_{x=\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad (4.94)$$

$$Nu_v := \frac{1}{2T_0 \alpha N_z} \sum_1^{N_z-1} \sum_1^{N_x-1} j_x T - 1 \quad (4.95)$$

definiert, wobei zur Approximation der partiellen Ableitung in (4.94) eine 4-Punkt-Formel verwendet wird [116]. In Abbildung 4.7 ist die zeitliche Entwicklung der Nusselt-Zahlen exemplarisch

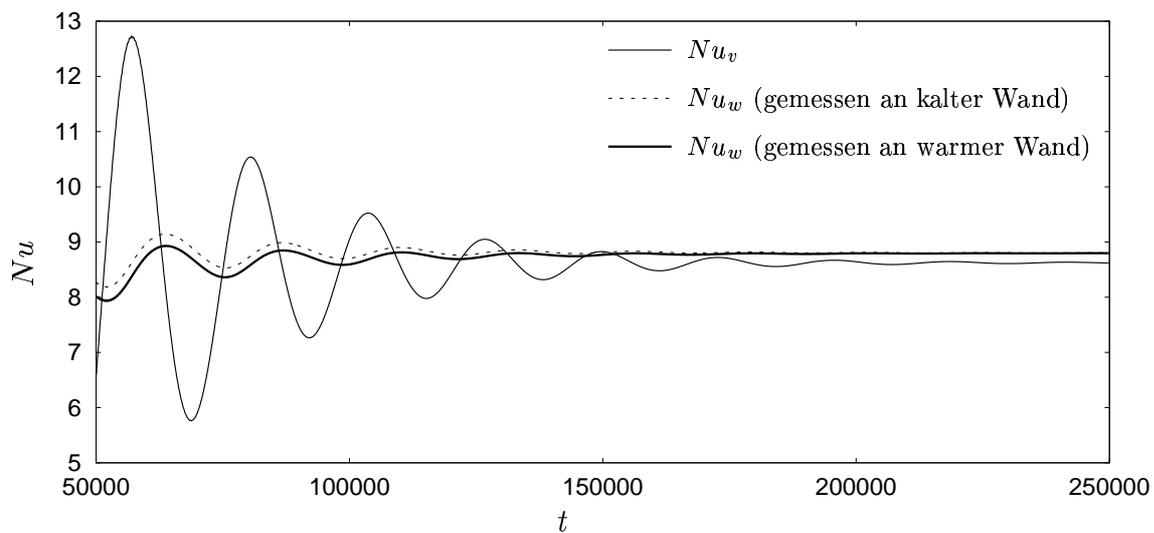


Abbildung 4.7: Zeitliche Entwicklung von Nu_w und Nu_v bei $Ra = 10^6$.

risch für eine Lattice-Boltzmann Simulation dargestellt, die auf einem 121×121 Gitterpunkte grossen Gebiet bei $Ra = 10^6$ durchgeführt wurde.

Tabellen 4.1 und 4.2 enthalten die Nusselt-Zahlen, die für Simulationen bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen und unterschiedlichen Gitterauflösungen erhalten wurden. In den Tabellen sind ebenfalls extrapolierte Werte Nu^∞ für grosse N und ein Vergleich mit Benchmark-Werten angegeben. Die Daten von LE QUÉRÉ [122] wurden mit einem pseudo-spektralen Chebyshev-Algorithmus ermittelt, diejenigen von DE VAHL DAVIS [40] mit Hilfe eines Finite-Differenzen Verfahrens zur numerischen Lösung der Stromfunktionsformulierung des Problems. Die im Rahmen dieser Arbeit erhaltenen Werte befinden sich dabei in sehr guter Übereinstimmung mit den Benchmarks.

Ra	N	Nu_w	Nu_w^∞	Ref. [122]	Ref. [40]
10^3	71^2	1.1162	1.1170	-	1.1170
10^4	101^2	2.2417	2.2435	-	2.2380
10^5	101^2	4.5079	4.5168	-	4.5090
10^6	121^2	8.8004	8.8239	8.8250	8.8170
10^7	121^2	16.5089	16.5571	16.5230	-

Table 4.1: Vergleich der lokalen effektiven Nusselt-Zahl mit Benchmark-Werten.

Ra	N	Nu_v	Nu_v^∞	Ref. [40]
10^3	71^2	1.1144	1.1177	1.1180
10^4	101^2	2.2274	2.2439	2.2430
10^5	101^2	4.4540	4.5159	4.5190
10^6	121^2	8.6243	8.7816	8.8000
10^7	121^2	15.5980	16.4083	-

Table 4.2: Vergleich der volumengemittelten Nusselt-Zahl mit Benchmark-Werten.

Weiterhin von Interesse ist die Untersuchung der Gitterabhängigkeit der Nusselt-Zahl bei sukzessiver Verfeinerung des Rechengitters. Diese ist in Abbildung 4.8 für den Fall $Ra = 10^6$ angegeben, wobei Nu_w jeweils an der warmen Oberfläche gemessen wurde. Sie zeigt eine quadratische Konvergenzrate in $1/N$, wobei N die Anzahl der Gitterpunkte je Richtung angibt. Studien zur Gitterabhängigkeit wurden in diesem Zusammenhang ebenfalls von MEZRHAB et al. in [127] durchgeführt.

Es wurde beobachtet, dass die Qualität der Ergebnisse dabei massgeblich von der Ordnung der extrapolierten Randbedingungen (vgl. Abschnitt 4.3.3) und von der Approximationsgüte, die bei der Berechnung der Temperaturgradienten zur Bestimmung der lokalen Nusselt-Zahlen verwendet wird, abhängt. Auch DE VAHL DAVIES weist auf grosse Abweichungen an den Rändern bei der Bildung von Nusselt-Zahlen hin und empfiehlt daher die Verwendung einer

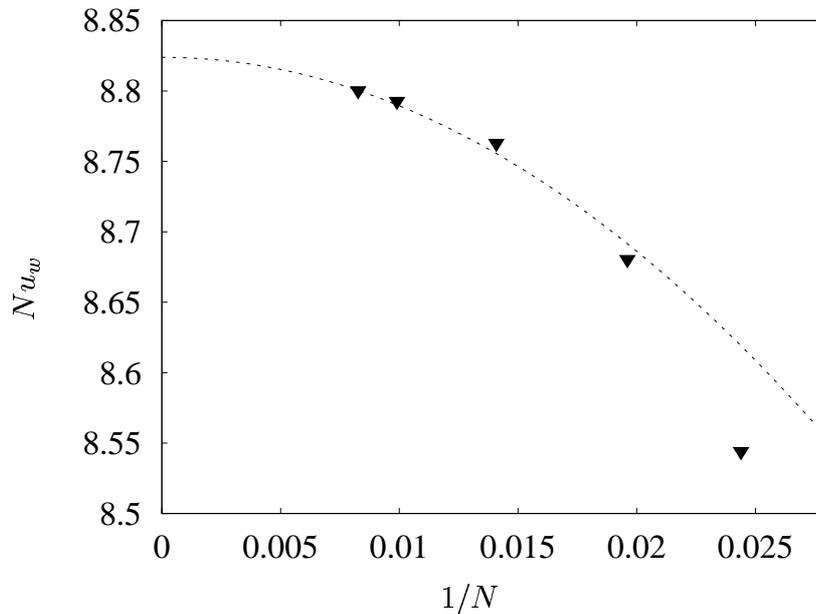


Abbildung 4.8: Gitterabhängigkeit von Nu_w bei $Ra = 10^6$ (gestrichelte Linie: quadratische Polynomfunktion).

volumengemittelten Nusselt-Zahl [40]. Weiterhin wird in [118] auf den (schwachen) Kompressibilitätseffekt des Gitter-Boltzmann Verfahrens hingewiesen, der den quantitativen Vergleich mit inkompressiblen Verfahren in diesem Fall erschwert.

4.3.4.2 Rayleigh-Bénard Konvektion

Im Unterschied zum Verhalten einer Strömung zwischen seitlich beheizten Flächen muss die Temperaturdifferenz bei einer Konfiguration mit einem antiparallel zur Gravitationskraft wirkenden Temperaturgradienten, d.h. unten beheizten und oben gekühlten Begrenzungsflächen (vgl. Abbildung 4.9), zunächst einen kritischen Wert überschreiten, bevor sich eine Konvektionsströmung ausbildet. Dieses Phänomen wird als *Rayleigh-Bénard Konvektion* bezeichnet. Verfügen beide horizontale Platten über eine hinreichende räumliche Ausdehnung, kann die Bedingung für das Einsetzen der Konvektion mit Hilfe der *kritischen Rayleigh-Zahl* beschrieben werden. Sie hat (im inkompressiblen Limes) einen theoretischen Wert von $Ra_{crit} \simeq 1708$ [16].

Die Simulationen wurden auf einem in x -Richtung periodischen Rechengitter mit verschiedenen Auflösungen $N_x \times N_z$ bei einem Seitenverhältnis von etwa 2 : 1 durchgeführt. An der oberen und unteren Platte wurden für das Strömungsfeld Hafttrandbedingungen und für das Temperaturfeld Dirichlet Bedingungen entsprechend Abbildung 4.9 gesetzt. Abbildung 4.10 zeigt die Verläufe von Stromlinien und Isothermen für die Simulation auf einem Gitter der Größe 60×32 mit den Parametern $Ra = 8000$, $Pr = 0.71$ und $\gamma = 1$.

Die Studien bezüglich der kritischen Rayleigh-Zahl wurden auf dem selben Gitter mit $\gamma = 1$

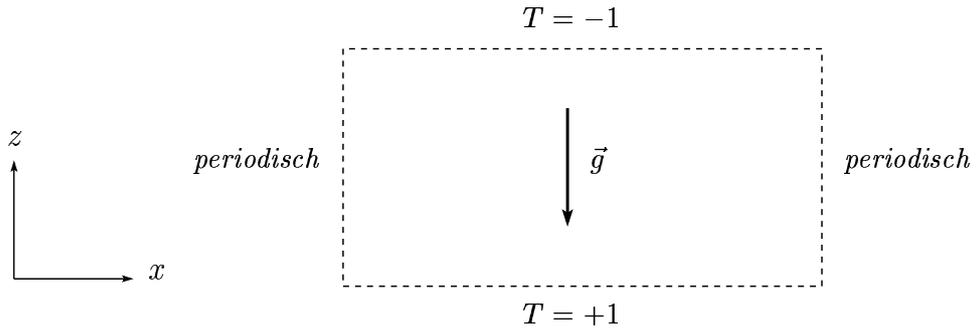


Abbildung 4.9: Randbedingungen für die Rayleigh-Bénard Simulation

und $Pr = 0.71$ durchgeführt. Hierfür wurde jeweils zunächst eine Simulation mit $Ra = 5000 > Ra_{crit}$ durchgeführt und diese Lösung als Anfangsbedingung gesetzt. Anschliessend wurden die Wachstumsraten bezüglich der kinetischen Energie

$$E_{kin}(t) := \sum_{k=1}^{N_z-1} \sum_{i=1}^{N_x-1} [j_x^2(i, k)(t) + j_z^2(i, k)(t)] \quad (4.96)$$

im System für eine Reihe von Rayleigh-Zahlen im Bereich um den kritischen Wert gemessen. In Abbildung 4.11 ist die zeitliche Entwicklung der kinetischen Energie für $Ra = 8000$ exemplarisch dargestellt. Für unterschiedliche Rayleigh-Zahlen ergibt sich dabei der in Abbildung 4.12 links ersichtliche Verlauf dieser Grösse. Mit der Definition der Wachstumsrate

$$\phi(Ra) := \left. \frac{\partial E_{kin}(t)}{\partial t} \right|_{Ra} \quad (4.97)$$

für eine gegebene Rayleigh-Zahl Ra kann der Wert der kritischen Rayleigh-Zahl durch lineare Interpolation zwischen den Werten $\phi(1720)$ und $\phi(1725)$ für dieses System zu $Ra_{crit} = 1722.63$ bestimmt werden ($\gamma = 1$). Der Gradient $\phi(Ra)$ ist in Abbildung 4.12 rechts dargestellt.

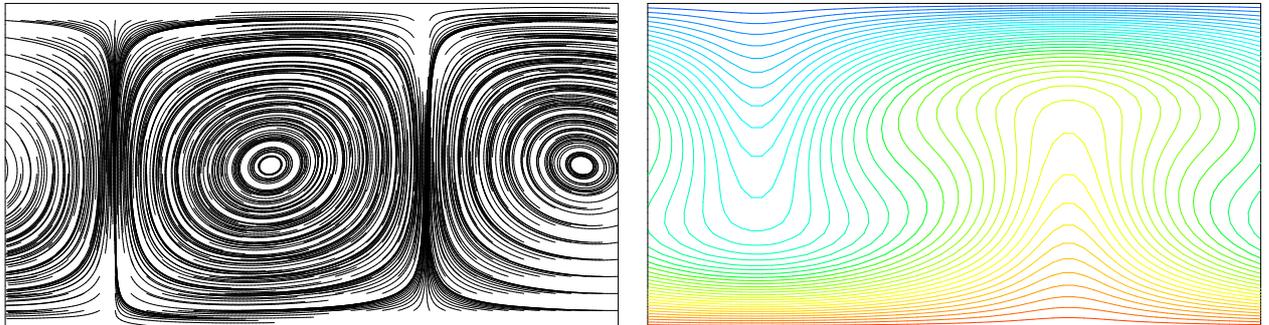


Abbildung 4.10: Stromlinien- und Isothermenverläufe für $Ra = 8000$, $Pr = 0.71$ und $\gamma = 1$. Das Rechengebiet ist periodisch in x -Richtung. An den oberen und unteren Rändern wurden die Dirichlet-Bedingungen $T_{oben} = -1$ und $T_{unten} = +1$ gesetzt.

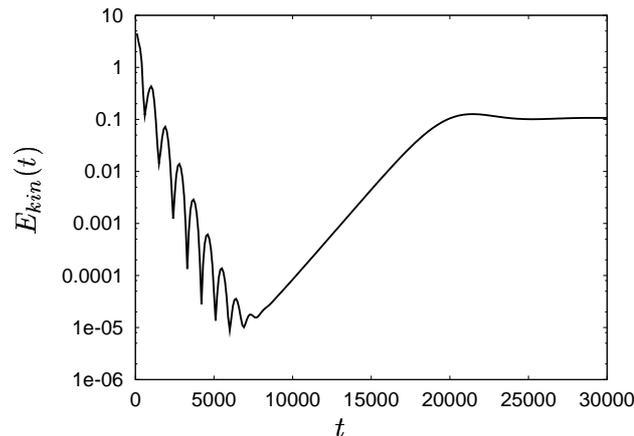


Abbildung 4.11: Beispiel: Zeitliche Entwicklung der kinetischen Energie nach Gl. (4.96) im System für $Ra = 8000 \gg Ra_{crit}$ bei Wahl der Anfangsbedingungen ($t = 0$) zu $\vec{u}_0 = T_0 = 0$.

Der Wert der kritischen Rayleigh-Zahl hängt dabei entscheidend vom Seitenverhältnis und von der Auflösung des numerischen Rechengitters ab. MEZRHAB ET AL. konnten für dieses Verfahren anhand einer Stabilitätsanalyse zeigen, dass eine gute Übereinstimmung im Sinne einer Tendenz zum theoretischen Wert bei sukzessiver Gitterverfeinerung erhalten werden kann [127].

Als abschliessendes Beispiel sollen nun die Ergebnisse der numerischen Simulation von turbulenter Rayleigh-Bénard Konvektion bei $Ra = 10^8$ und $\gamma = 1$ betrachtet werden, die auf einem Gitter der Grösse 1200×600 erhalten wurden (10^7 Freiheitsgrade). Abbildungen 4.13 und 4.14 zeigen die Verläufe der Stromlinien und Isothermen für diese Konfiguration. In Abbildung 4.15 sind die Geschwindigkeits- und Temperaturprofile entlang einzelner vertikaler Schnitte dargestellt. Die Einheiten der Daten wurden dabei nicht skaliert.

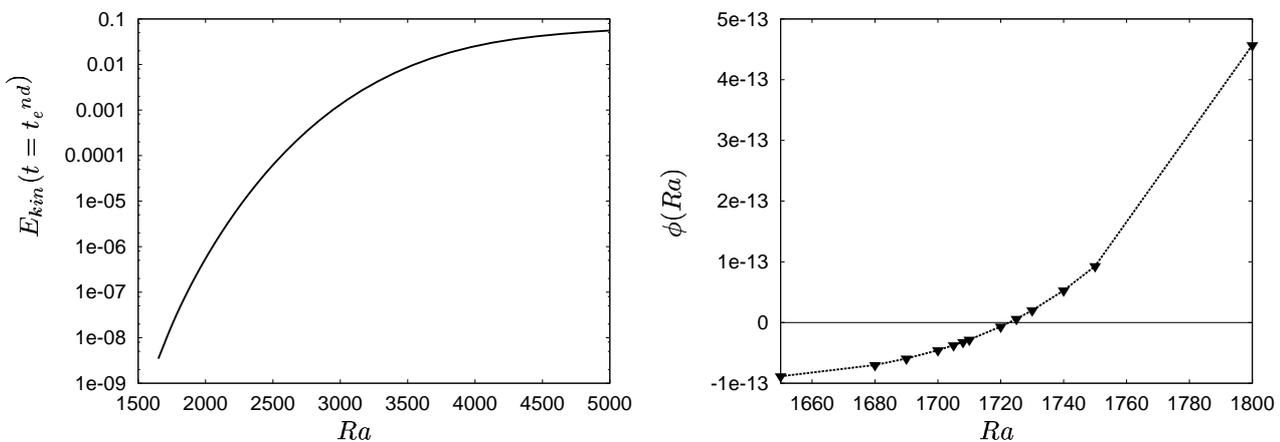


Abbildung 4.12: **Links:** Verlauf der kinetischen Energie im System in Abhängigkeit von der Rayleigh-Zahl, **rechts:** Wachstumsrate $\phi(Ra)$ nach Gl. (4.97).

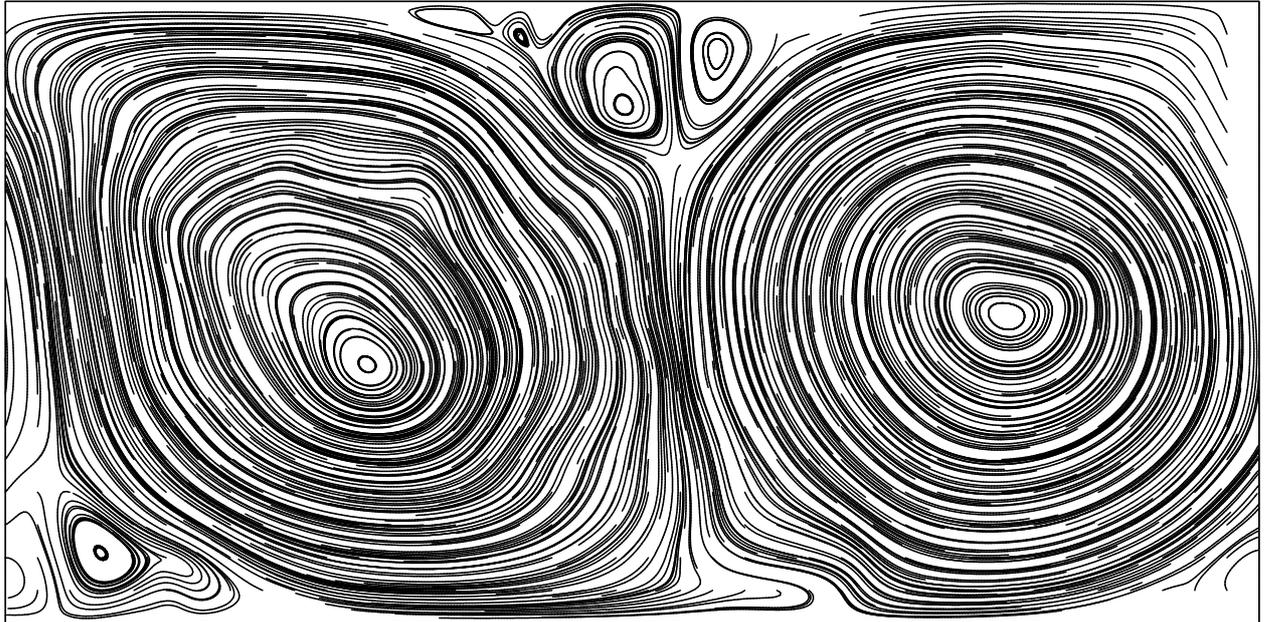


Abbildung 4.13: Verlauf der Stromlinien bei $Ra = 10^8$, $Pr = 0.71$ und $\gamma = 1$.

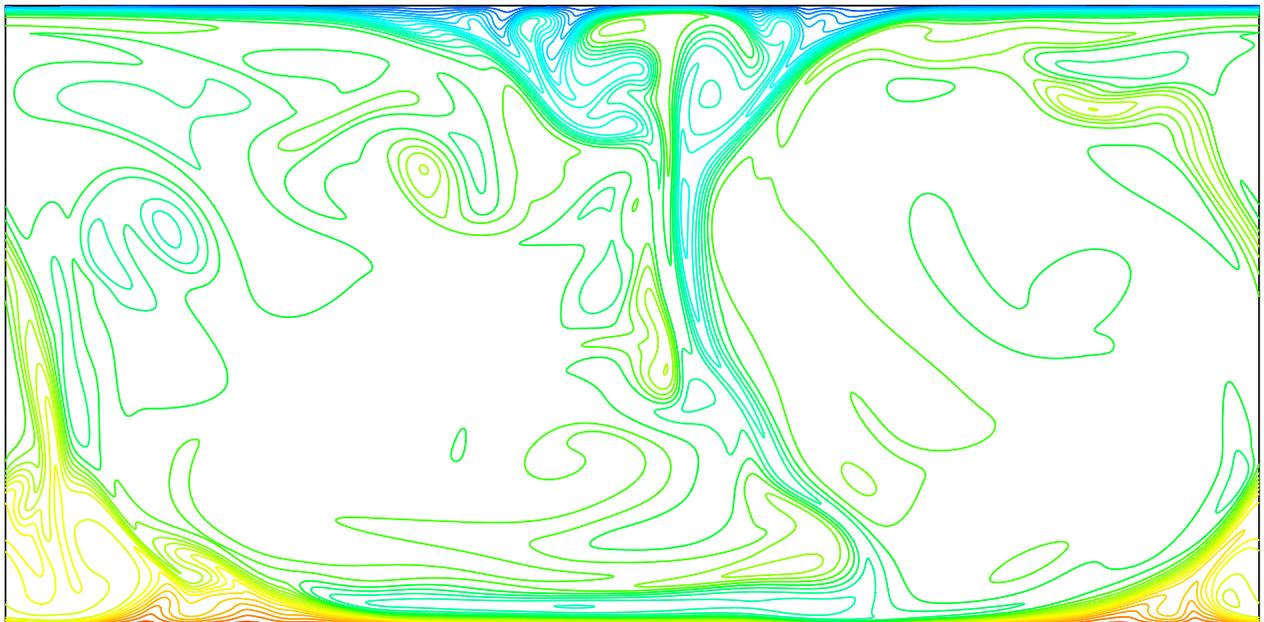


Abbildung 4.14: Isothermenverlauf bei $Ra = 10^8$, $Pr = 0.71$ und $\gamma = 1$.
Randbedingungen: $T_{unten} = +1$, $T_{oben} = -1$, periodisch in x -Richtung.

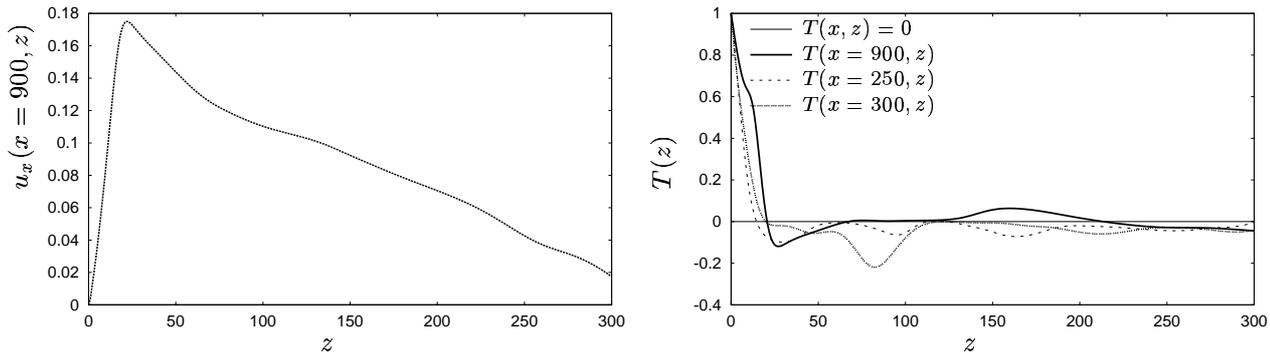


Abbildung 4.15: **Links:** Verlauf der Geschwindigkeitskomponente in x -Richtung entlang der vertikalen Ebene $x = 900$ zu Abb. 4.13, **rechts:** Temperaturprofil entlang verschiedener vertikaler Ebenen zu Abb. 4.14.

4.4 Gitter-Boltzmann Modell für turbulente konvektive Strömungen

4.4.1 Feinstruktur-Modell für die turbulenten Scheinspannungen

Im Kontext des Gitter-Boltzmann Verfahrens wurde der LES-Ansatz erstmals von HOU verfolgt [97]. Die Grundgleichungen der Large-Eddy Simulation (LES) wurden in Abschnitt 4.1.6 beschrieben und es wurde der Wirbelviskositätsansatz nach SMAGORINSKY vorgestellt. Die turbulente Viskosität ν_T wurde dabei mit der Deformationsrate $|\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}|$ zu

$$\nu_T = C_s^2 \Delta^2 |\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}| \quad (4.98)$$

in Beziehung gesetzt, worin C_s die Smagorinsky-Konstante bezeichnet. Die turbulenten Scheinspannungen lassen sich in diesem Modell zusammen mit der molekularen Viskosität ν_0 zu einer *totalen Viskosität*

$$\nu_{total} = \nu_0 + \nu_T \quad (4.99)$$

zusammenfassen. Die Viskosität wird somit zu einer zeitabhängigen und lokalen Größe, die vom transienten Dehnungstensor abhängt. Wie in Abschnitt 4.2.2 angemerkt wurde, liegen die Komponenten des Spannungstensors bei diesem Verfahren als lokale Knotengröße vor und müssen nicht aus den dafür zu bildenden Ableitungen des Geschwindigkeitsfeldes berechnet werden. Mit Kenntnis der Komponenten des Spannungstensors $S_{\alpha\beta}$ ist es damit möglich, die Komponenten des Deformationstensors $\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta}$ direkt zu bestimmen. Mit dem Impulsstromtensor $\Pi_{\alpha\beta}$, d.h. den Momenten zweiter Ordnung bezüglich der Verteilungsfunktionen f_i ,

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} f_i = c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta - 6\rho\nu_0 c_s^2 \tilde{\epsilon}_{\alpha\beta} \quad , \quad (4.100)$$

erhält man für den Deformationstensor den Ausdruck

$$\tilde{\epsilon}_{\alpha\beta} = \frac{1}{6\rho\nu_0 c_s^2} \underbrace{(c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta - \Pi_{\alpha\beta})}_{=: Q_{\alpha\beta}} = \frac{1}{6\rho\nu_0 c_s^2} Q_{\alpha\beta} \quad . \quad (4.101)$$

Die Komponenten des Spannungstensors $Q_{\alpha\beta}$ sind nach KRAFCZYK ET AL. [113] bezüglich der Momente folgendermassen gegeben, wobei $\delta\rho$ der Dichtefluktuation um $\rho_0 = 1$ entspricht:

$$Q_{xx} = \frac{1}{3} \delta\rho \delta_{xx} + j_x j_x - \frac{1}{3} [e + 2\delta\rho + 3p_{xx}] \quad (4.102)$$

$$Q_{yy} = \frac{1}{3} \delta\rho \delta_{yy} + j_y j_y - \frac{1}{3} [e + 2\delta\rho + \frac{1}{2}(3p_{ww} - 3p_{xx})] \quad (4.103)$$

$$Q_{zz} = \frac{1}{3} \delta\rho \delta_{zz} + j_z j_z - \frac{1}{3} [e + 2\delta\rho + \frac{1}{2}(3p_{ww} - 3p_{xx})] - p_{ww} \quad (4.104)$$

$$Q_{xy} = p_{xy}, \quad Q_{yz} = p_{yz}, \quad Q_{zx} = p_{zx}. \quad (4.105)$$

Die turbulente Viskosität kann nun mit $\Delta x = \Delta t = 1$ und $c_s = 1/\sqrt{3}$ zu

$$\nu_T = \frac{C_s^2 \Delta^2}{6 \rho \nu_0 c_s^2} \bar{Q} = \frac{3}{2} s_{xx} C_s^2 \bar{Q} \quad \text{mit} \quad \bar{Q} = \sqrt{\sum_{\alpha,\beta} Q_{\alpha\beta} \cdot Q_{\alpha\beta}} \quad (4.106)$$

bestimmt werden, womit für den neuen Relaxationsparameter s_{xx}^* des aktuellen Zeitschrittes

$$s_{xx}^* = \frac{1}{3(\nu_0 + \nu_T) + \frac{1}{2}} \quad (4.107)$$

gilt. Eine Möglichkeit, um die Stabilität einer numerischen Simulation zu erhöhen, besteht darin, ν_T implizit auf die Dehnungsraten des gegenwärtigen Zeitschrittes zu beziehen. Nach [97] und [113] erhält man in diesem Fall den Ausdruck

$$\nu_T = \frac{1}{6} \sqrt{(3\nu_0 + \frac{1}{2})^2 + 18C_s^2 \Delta^2 \bar{Q}} - (\nu_0 + \frac{1}{6}) \quad (4.108)$$

Von KRAFCZYK wird in [112] bzw. [113] ein Anwendungsbeispiel des LBGK- bzw. MRT-LES Modells hinsichtlich der Umströmung eines wandgebundenen Würfels in einem Kanal bei $Re = 40000$ gegeben und die Ergebnisse mit Benchmark-Daten verglichen. Dabei konnten die experimentell gefundenen Strömungsstrukturen weitgehend korrekt wiedergegeben werden.

4.4.2 Feinstruktur-Modell für den Wärmestrom

In Analogie zum Wirbelviskositätsansatz nach Abschnitt 4.1.6 kann auch der Feinstruktur-Wärmestrom q_i^{sgs} nach Gl. (4.22) näherungsweise modelliert werden. Der sogenannte *Wirbel-diffusivitätsansatz* lautet

$$q_i^{sgs} = \lambda_T \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} = \rho c_p \alpha_T \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i}, \quad (4.109)$$

wobei der Zusammenhang zwischen der turbulenten Wärmediffusivität α_T und der turbulenten Viskosität μ_T durch die (in der Kernschicht konstante) *turbulente Prandtl-Zahl* hergestellt wird:

$$Pr_T = \frac{\mu_T}{\alpha_T} \quad (4.110)$$

Diese kann nach SCHLICHTING theoretisch zu $Pr_T = 0.87$ bestimmt werden [168]. In der Praxis finden sich nach BREUER Werte zwischen 0.3 und 0.9 [25].

4.5 Algorithmus des HTLBE-LES Verfahrens

Der Algorithmus des (seriellen) hybriden thermischen Gitter-Boltzmann Verfahrens mit Feinstrukturmodell lässt sich damit folgendermassen zusammenfassen:

Algorithmus A-4 Prinzipieller Ablauf des hybriden MRT-LES Verfahrens

```

1: Initialisierung:
2: Berechnung der Simulationsparameter aus den gegebenen Grössen
3: Allokation des Speicherplatzes
4: Einlesen der Voxel-Geometrie und Setzen der Randbedingungen
5: Initialisierung der Felder für die Verteilungsfunktionen und die Temperatur

6: Zeitschleife:
7: while (! Konvergenz) && ( $t < t_{max}$ ) do
8:   for all Knoten ( $x, y, z$ ) do
9:     Berechnung der Relaxationsparameter
10:    if (Knoten == Rand) then
11:      Setzen entsprechender Randbedingungen
12:      bzw.
13:      Anwendung der Bounce-Back Randbedingung
14:    else
15:      Transformation der Verteilungsfunktionen in den Momentenraum
16:      1/2 Forcing Teil 1
17:      Ausgabe der makroskopischen Variablen
18:      Berechnung der Gleichgewichtsmomente
19:      Bestimmung des Spannungstensors und der lokalen Relaxationsparameter
20:      Relaxation der Momente
21:      1/2 Forcing Teil 2
22:      Rücktransformation in den Phasenraum
23:      Lösung der Energiegleichung
24:    end if
25:  end for
26:  Propagation der Verteilungsfunktionen
27:  Bestimmung der mittleren zeitlichen Felder
28: end while

```

4.6 Komplexes dreidimensionales Anwendungsbeispiel

Die Erweiterung des Gitter-Boltzmann Verfahrens durch die Feinstrukturmodelle und dessen prototypische Umsetzung soll nun anhand der Simulation der Raumluftrömung in einem Atrium unter Verwendung des in Abschnitt 3.5.5 vorgestellten Modells exemplarisch demonstriert werden.

Das Rechengebiet weist eine Grösse von $256 \times 256 \times 256$ Gitterknoten auf. Mit den 15 Freiheitsgraden des $d3q15$ -Modells zuzüglich vier hydrodynamischer Variablen, drei gemittelten Geschwindigkeitskomponenten, zwei Temperaturfeldern, den turbulenten Scheinspannungen und einem Feld zur Speicherung der Voxel-Geometrie, ergibt sich für die Konfiguration ein Speicherplatzbedarf von 3 GBytes. Mit einer Knotenupdaterate von etwa 10^6 Knoten pro Sekunde auf einem *AMD Opteron*-Prozessor lagen die Rechenzeiten pro Konfiguration bei jeweils ca. 3.9 Stunden für 1000 Zyklen bzw. bei etwa 16 Tagen für 100000 Zyklen.

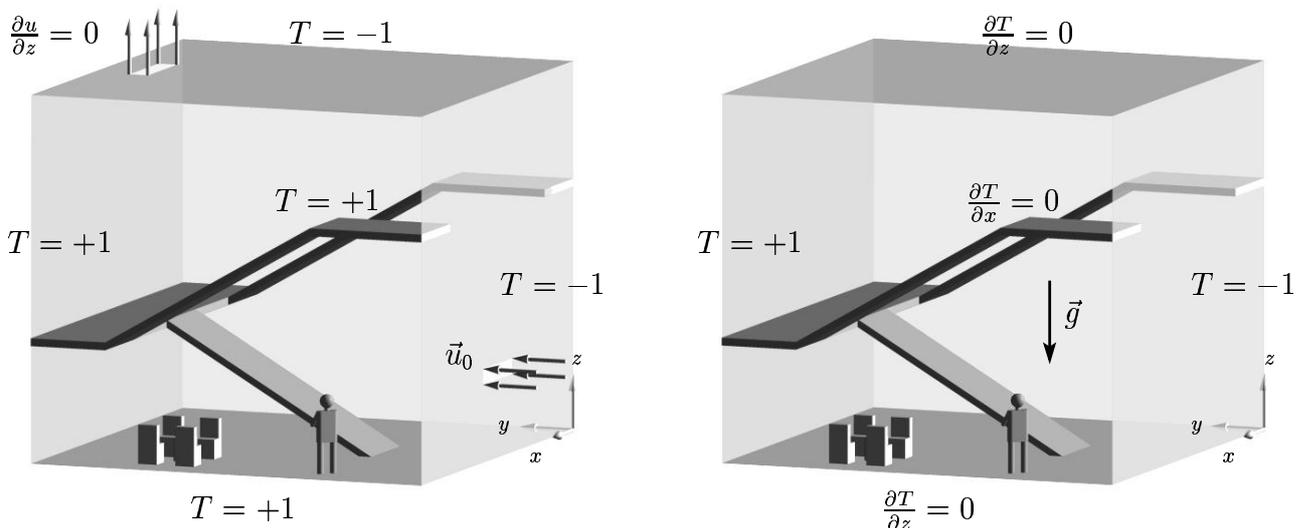


Abbildung 4.16: Zur Wahl der Randbedingungen: **links:** Konfiguration bei erzwungener Konvektion, **rechts:** Konfiguration bei freier Konvektion.

Nachstehend werden die beiden folgenden Konfigurationen betrachtet (vgl. Abbildung 4.16):

- *Erzwungene Konvektion ohne Kopplung des Temperaturfeldes an das Geschwindigkeitsfeld.* In diesem Fall wird im Bereich der vertikalen Fassade ein konstantes Einströmungsprofil vorgegeben und im Dachbereich eine Ausflussrandbedingung gesetzt. An allen Wänden werden Haftbedingungen und, hinsichtlich der Energiegleichung, Dirichlet-Bedingungen realisiert. Die Temperatur an der Oberfläche der Fassade ($x, y = 0, z$) wird zu $T = +1$ gesetzt, ebenso wie diejenige im Dachbereich. Alle anderen Oberflächentemperaturen werden zu $T = -1$ gewählt, wie in Abbildung 4.16 links ersichtlich ist.
- *Freie Konvektion mit Kopplung des Temperaturfeldes an das Geschwindigkeitsfeld.* Hierbei wird an allen Wänden eine Haftbedingung gesetzt. Im Bereich der vertikalen Fassade ($x, y = 0, z$) und an der gegenüberliegenden Wand ($x, y = 255, z$) werden Dirichlet-

Bedingungen formuliert, während an allen anderen Wänden adiabatische Bedingungen verwendet werden. Die Gravitationskraft wirkt in negativer z -Richtung.

Im Zusammenhang mit dem Gitter-Boltzmann Verfahren ist es erforderlich, dass die bezüglich makroskopischer Variablen gegebenen Randbedingungen auf die Verteilungsfunktionen übertragen werden. An den Rändern müssen dabei alle in das Rechengbiet weisenden Verteilungsfunktionen vorgegeben werden.

Ein übliches Vorgehen zur Realisierung einer *Hafttrandbedingung*, d.h. der Vorgabe einer festen Geschwindigkeit u_α am Rand, ist die Anwendung der sogenannten *Bounce-Back*-Randbedingung. Hierbei werden die eine feste Wand treffenden Verteilungsfunktionen antiparallel reflektiert, womit sich der zeitliche Mittelwert des Impulses an der Wand zu Null einstellt. Vom physikalischen Standpunkt betrachtet sind 'Partikelsysteme' nach einem Stossprozess unkorreliert; durch den antiparallelen Tauschvorgang kann aber Massenerhaltung gewährleistet werden, da keine Masse über den Rand ausgetauscht wird. Im Hinblick auf das explizite Zeitschrittverfahren liegt die Position einer 'virtuellen Wand' zur Hälfte zwischen den entsprechenden Fluid- und Randknoten. Das Vorgehen ist z.B. in [112] ausführlich beschrieben (vgl. auch Abschnitt 4.3.4.1). Darin werden auch Fälle anderer Wandpositionen diskutiert, die insbesondere bei krummlinigen Rändern von Bedeutung sind. Bei *Ausflussrandbedingungen* fordert man, dass die Ableitungen der Geschwindigkeitskomponenten normal zum Rand verschwinden, $\partial u_\alpha / \partial n = 0$. Eine *Einflussrandbedingung* kann nach LADD basierend auf dem Bounce-Back Verfahren zuzüglich eines linearen Termes mit der zu setzenden Geschwindigkeit formuliert werden [115]. Werte für den Druck können dabei durch Extrapolation erhalten werden [189]. Werden Anfangsbedingungen vorgegeben, muss auf die Divergenzfreiheit des Strömungsfeldes geachtet werden. Hinsichtlich der Besonderheiten des Gitter-Boltzmann Modells im Zusammenhang mit Rand- und Anfangsbedingungen wird an dieser Stelle auf [77, 112, 115] und die Referenzen darin verwiesen.

Für den Fall erzwungener Konvektion wurde in dem hier betrachteten Beispiel die Reynolds-Zahl zu $Ra = 50000$ gewählt. Dies entspricht einer Größenordnung der Einströmungsgeschwindigkeit von etwa $\mathcal{O}(0.1 \frac{m}{s})$. Abbildung 4.17 zeigt das zeitlich gemittelte Geschwindigkeitsfeld und das Temperaturfeld bei $t = 75000$, in Abbildung 4.18 sind Stromlinien des gemittelten Geschwindigkeitsfeldes dargestellt, die im Bereich der seitlichen Öffnung injiziert werden.

Die Simulation freier Konvektion wurde mit den Parametern $Ra = 10^8$ und $Pr = 0.71$ durchgeführt. Es sei angemerkt, dass für eine realistische Untersuchung etwa des Kaltluftabfalles an der Fassade für die Rayleigh-Zahl ein Wert von $\mathcal{O}(10^{12})$ erforderlich wäre. Die in Abbildung 4.19 dargestellten Stromlinien werden entlang einer horizontalen Ebene im Bereich der (kalten) Fassade injiziert. In Abbildung 4.20 ist das zeitlich gemittelte Geschwindigkeitsfeld und das Temperaturfeld bei $t = 100000$ ersichtlich.

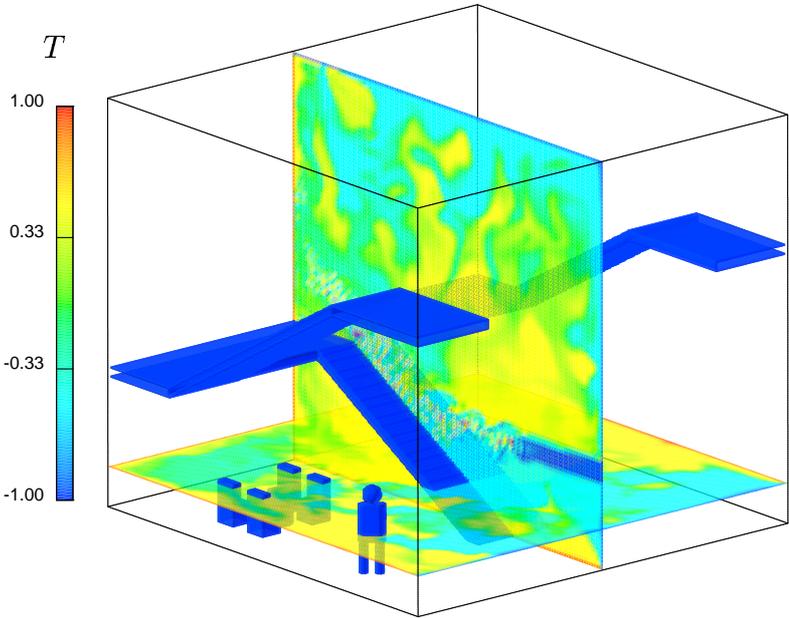
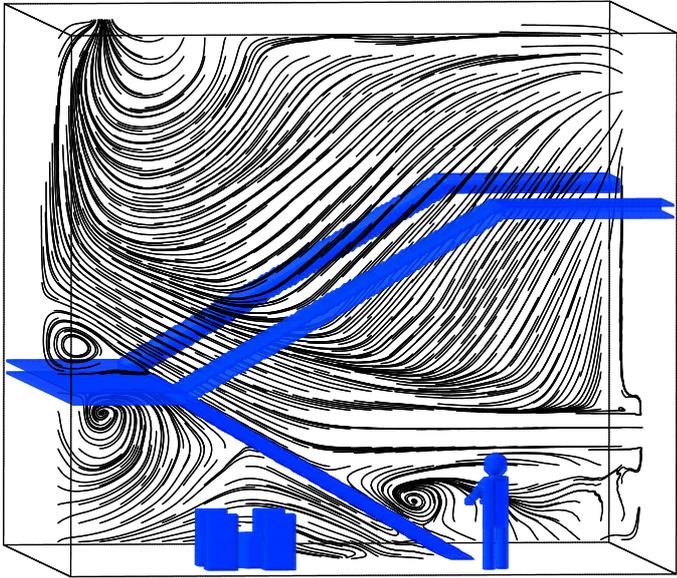


Abbildung 4.17: Erzwungene Konvektion bei $Re = 50000$, Konfiguration nach Abb. 4.16 links.
Oben: Zeitlich gemittelttes Geschwindigkeitsfeld,
unten: momentanes Temperaturfeld.

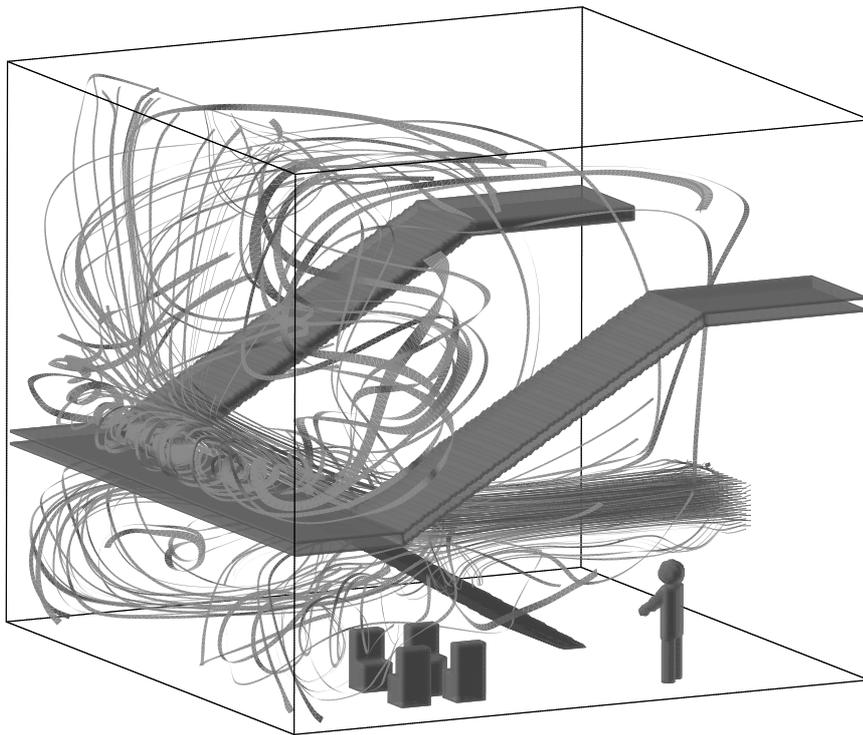


Abbildung 4.18: Erzwungene Konvektion bei $Re = 50000$ ($t=75000$). Die Stromlinien werden am Rand der Öffnung injiziert.

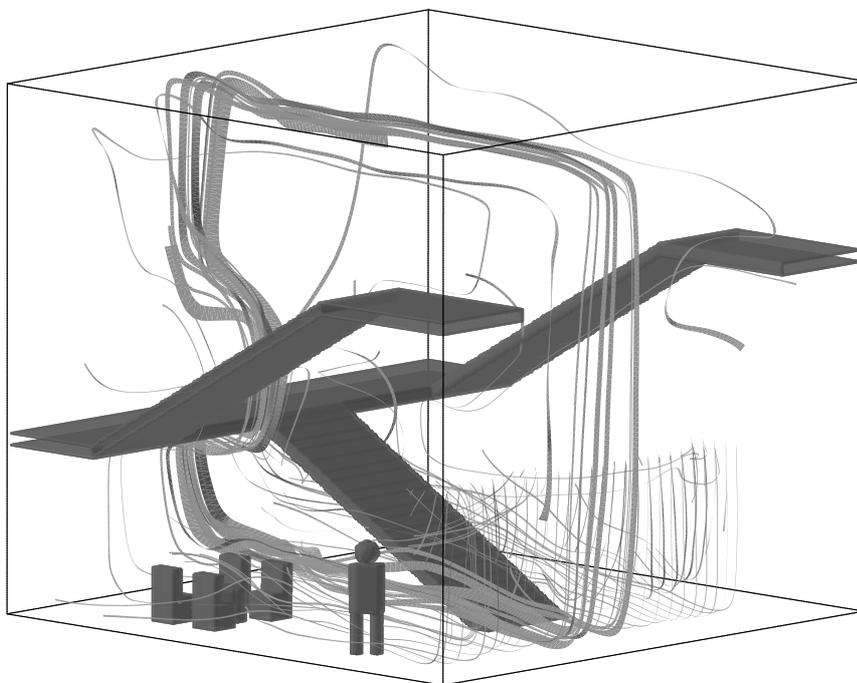


Abbildung 4.19: Freie Konvektion bei $Ra = 10^8$ ($t = 100000$). Die Stromlinien werden in einer horizontalen Ebene im Bereich der Fassade injiziert.

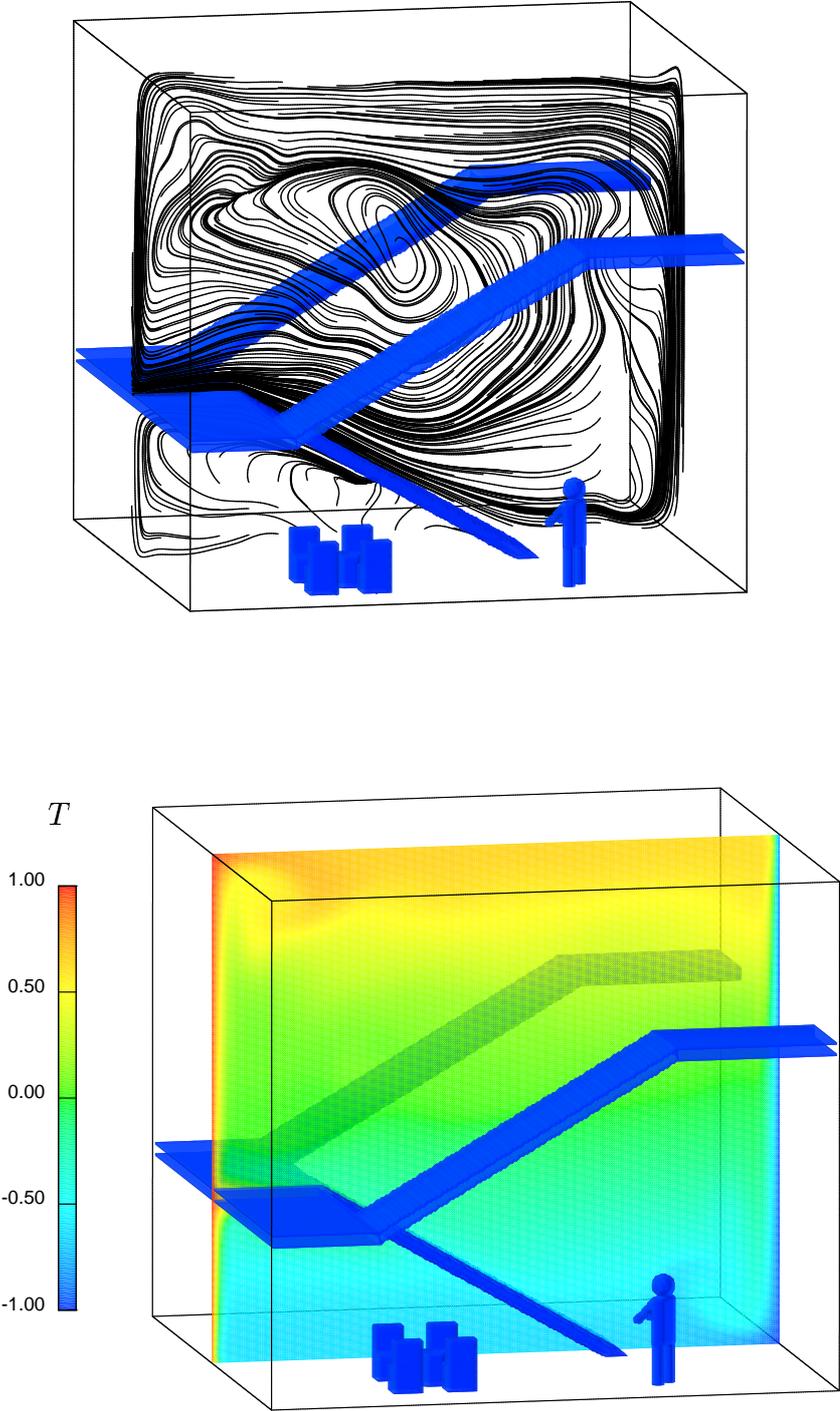


Abbildung 4.20: Freie Konvektion bei $Ra = 10^8$, Konfiguration nach Abb. 4.16 rechts.
Oben: Zeitlich gemittelttes Geschwindigkeitsfeld,
unten: momentanes Temperaturfeld.

4.7 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

In diesem Abschnitt wurde das Gitter-Boltzmann Verfahren vorgestellt und dessen Erweiterungen hinsichtlich Energieerhaltung und eines Large-Eddy-Feinstrukturmodells (LES) diskutiert. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Auswahl von Modellen und Parametern im Hinblick auf die Betrachtung von Raumluftrömungen und die Anbindung der in Kapitel 3 behandelten geometrischen Diskretisierungstechnik.

Es konnte gezeigt werden, dass das Gitter-Boltzmann Verfahren grundsätzlich eine leistungsfähige Alternative zu klassischen Methoden für die Simulation von inkompressiblen Strömungs- und Transportvorgängen darstellt. Das volle Potenzial der Methode kann aber erst ausgeschöpft werden, wenn geeignete Diskretisierungstechniken, wie z.B. hierarchische Gitter [38], und effiziente numerische Verfahren, wie z.B. Mehrgitterverfahren [189, 190], zur Lösung der diskreten Boltzmann-Gleichung eingesetzt werden.

Das Gitter-Boltzmann Verfahren zeichnet sich dadurch aus, dass es keine numerische Viskosität besitzt, eine hohe maximale Element-Reynoldszahl zulässt und unter Verwendung geeigneter Randbedingungen eine quadratische Konvergenzrate aufweist. Mit dem Differenzenschema erster Ordnung bezüglich der Verteilungsfunktionen erhält man eine Approximationsgüte zweiter Ordnung hinsichtlich der makroskopischen Momente. Zur Verbesserung der numerischen Stabilität wurde im Rahmen dieser Arbeit das Momentenmodell von D'HUMIÈRES eingesetzt, das auf einer Transformation der Verteilungsfunktionen in einen physikalisch äquivalenten Momentenraum beruht und die Wahl individueller Relaxationsparameter bezüglich der kinetischen Modi zulässt. Dadurch, dass die Komponenten des spurlosen Spannungstensors als lokale Knotengrößen vorliegen, ergibt sich ferner ein verhältnismässig einfaches Schema zur Bestimmung der turbulenten Scheinzähigkeit im Sinne eines SMAGORINSKY-Feinstruktur-Turbulenzmodells.

Die Kopplung zwischen Geschwindigkeits- und Temperaturfeld wurde unter Verwendung des hybriden thermischen Modells (HTLBE) von LALLEMAND realisiert. Die Validierungsrechnungen zeigen dabei sehr gute Übereinstimmungen mit entsprechenden Benchmark-Werten aus der Literatur.

Anhand des komplexen dreidimensionalen Beispiels der Innenraumluftrömung in einem Atrium wurde die prototypische Umsetzung des HTLBE-LES Verfahrens demonstriert. Dabei wurde der wandnahe Bereich (noch) nicht gesondert berücksichtigt. Im Sinne der Weiterentwicklung des vorhandenen Codes sollte bei Verwendung des Smagorinsky-Modells künftig ein Wandmodell eingesetzt werden. Weiterhin sind Untersuchungen zur Validierung des Modells im Bereich der turbulenten Wärmeübertragung erforderlich.

Hinsichtlich der Turbulenzmodellierung stellt zwar die LES eine interessante Alternative zur DNS dar, jedoch erscheint die Anwendung der LES für praktische Belange auf Grund der dafür benötigten Rechenzeiten noch 'zu teuer'. Es ist aber zu erwarten, dass unter Verwendung geeigneter Diskretisierungstechniken und effizienter numerischer Methoden eine deutliche Reduktion des Berechnungsaufwandes erfolgen kann. Im Kontext der thermischen Gebäudesimulation, insbesondere, wenn diese Simulationsverfahren mit CFD-Verfahren gekoppelt wer-

den sollen, erscheint der Einsatz von konventionellen RANS-Modellen sinnvoll, da die damit erreichbare Approximationsgüte für diese Aufgabenstellung vollkommen ausreicht und die Rechenzeit (pro Iteration) deutlich reduziert werden kann.

Dabei muss stets auch der Diskretisierungsprozess und der Aufwand für die Erstellung eines numerischen Modells berücksichtigt werden, insbesondere bei komplexe(re)n Geometrien. In diesem Bereich wird das vorgestellte Modell als extrem vorteilhaft angesehen. Als mögliches Anwendungsbeispiel wäre etwa die Komfortanalyse in KFZ-Innenräumen oder das Anwendungsfeld des *Computational Steering* zu nennen, wie aktuelle Arbeiten der Arbeitsgruppe belegen [206].

Kapitel 5

Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden Techniken zur numerischen Simulation und zur energetischen wie subjektiven Bewertung von Luftströmungen in Innenräumen dargestellt und die Anbindung dieser Techniken an ein Produktmodell diskutiert. Gegen Ende der Kapitel 2, 3 und 4 wurde jeweils eine knappe Zusammenfassung gegeben. Deshalb soll an dieser Stelle auf mögliche Erweiterungen, laufende Arbeiten und künftige Aktivitäten hingewiesen werden.

Anhand der Vorstudie einer gekoppelten Simulation eines Referenzgebäudes mit Atrium wurde der Einsatz einer Schnittstelle zur Kopplung des thermischen Mehrzonen-Gebäudemodells SMILE mit dem Programmpaket CFX demonstriert. Es wurden beide Herangehensweisen dargestellt und ihre Grenzen bezüglich des Auflösungsvermögens aufgezeigt. Dabei wurde festgestellt, dass die Auflösung physikalischer Effekte, insbesondere der Strahlungsverteilung, einen entscheidenden und nicht vernachlässigbaren Einfluss auf die Aussagekraft der Ergebnisse besitzt, gerade im Hinblick auf die Versorgung einer CFD-Simulation mit entsprechenden Randbedingungen. Vom Autor des SMILE-Gebäudemodells, C. NYTSCH-GEUSEN, wird derzeit an einer Erweiterung des Modells durch ein geometrisches Strahlenmodell gearbeitet. Die im Rahmen der vorliegenden Arbeit vorgestellte Diskretisierungstechnik eignet sich dabei auch zur Ableitung eines geometrischen Oberflächenmodells, das für die Berechnung von Sichtfaktoren benötigt wird. Der in diesem Zusammenhang von Radiosity-Verfahren zu lösende Sichtbarkeitsentscheid kann effizient mit den in Abschnitt 3.1.2.1 vorgestellten Baumdatenstrukturen realisiert werden. Eine Zusammenarbeit in diesem Bereich bietet sich geradezu an. Weiterhin wird im Rahmen des Forschungsprojektes *SIMFAS* [155] gegenwärtig u.a. an der Erweiterung der in Abschnitt 2.4 beschriebenen Kopplungsschnittstelle auf den bi-direktionalen Fall gearbeitet, d.h. der Kreis hinsichtlich einer Modifikation von Parametern des Mehrzonenmodells zur Laufzeit im Sinne eines Zeitschrittverfahrens geschlossen.

Zur Analyse der Gebäudestruktur und -topologie dient ein graphentheoretischer Ansatz. Es wurden ein Volumenmodell und verschiedene Graphen als Hilfsmittel zur Ableitung eines Raummodells identifiziert und Algorithmen zur Ableitung dieser Relationen entwickelt. Zielsetzung dabei war es, den Aufwand effektiv und wirksam zu reduzieren, der mit der Modellierung bzw. Vernetzung und der Kopplung zwischen dimensionsreduzierten und hochauflösenden Verfahren verbunden ist, indem die Simulationsverfahren an ein Produktmodell angebunden wurden. Das Softwarekonzept der Rahmenapplikation bedient sich dabei einer Reihe von Bibliotheken, um die Realisierung einer graphisch-interaktiven Benutzerumgebung

zu erleichtern, in der die Modelle visualisiert und die Algorithmen getestet werden können. Es wäre wünschenswert, dieses prototypisch gemeinsam mit ROMBERG entwickelte Konzept um weitere Grundfunktionalitäten im Bereich der Modellierung zu erweitern. Das zur graphentheoretischen Analyse von Struktur und Topologie entwickelte geometrische Modell kann weiterhin relativ einfach auf Objekte mit gekrümmten Oberflächen erweitert werden, obwohl dies hinsichtlich der üblicherweise im Bauwesen anzutreffenden Geometrien von zunächst untergeordneter Bedeutung zu sein scheint, vgl. Abbildungen 3.39ff.

Die Vorteile der Diskretisierungstechnik aus Kapitel 3 nutzend, wird zur Simulation konvektiver Raumluchtströmungen das Gitter-Boltzmann Verfahren eingesetzt. In Kapitel 4 wurde die Erweiterung des Verfahrens hinsichtlich Energieerhaltung vorgestellt und die Kopplung zwischen Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld im Sinne einer Boussinesq-Approximation vorgenommen. Es konnte gezeigt werden, dass das Verfahren verhältnismässig einfach um ein Feinstruktur-Turbulenzmodell erweitert werden kann. Gegenstand künftiger Arbeiten sind die in Abschnitt 4.7 angesprochenen Validierungsrechnungen hinsichtlich der konvektiven Wärmeübertragung im turbulenten Regime für den dreidimensionalen Fall und ein Vergleich mit entsprechenden Benchmark-Werten. Um die Auflösung des wandnahen Bereiches zu umgehen, wäre es ferner sinnvoll, das Modell um geeignete Wandfunktionen zu erweitern, und zwar sowohl für das Geschwindigkeits-, als auch für das Temperaturfeld, vgl. Abschnitte 2.3.6 und 4.1.6. In Abschnitt 4.7 wurde auf den Rechenzeitbedarf einer LES und das Optimierungspotenzial hinsichtlich geeigneter Diskretisierungstechniken (adaptive Verfahren) und effizienter numerischer Methoden hingewiesen. Eine weitere Möglichkeit der Reduktion des Rechenzeitbedarfes und einer Steigerung der Effizienz besteht in der Parallelisierung des Verfahrens, wie die diversen Vorarbeiten des Lehrstuhls in dem Bereich des 'High Performance Computings' beweisen [198].

Anhang A

Phasenraumdiskretisierung in 3D

A.1 Kollokationspunkte des $d3q15$ -Modells

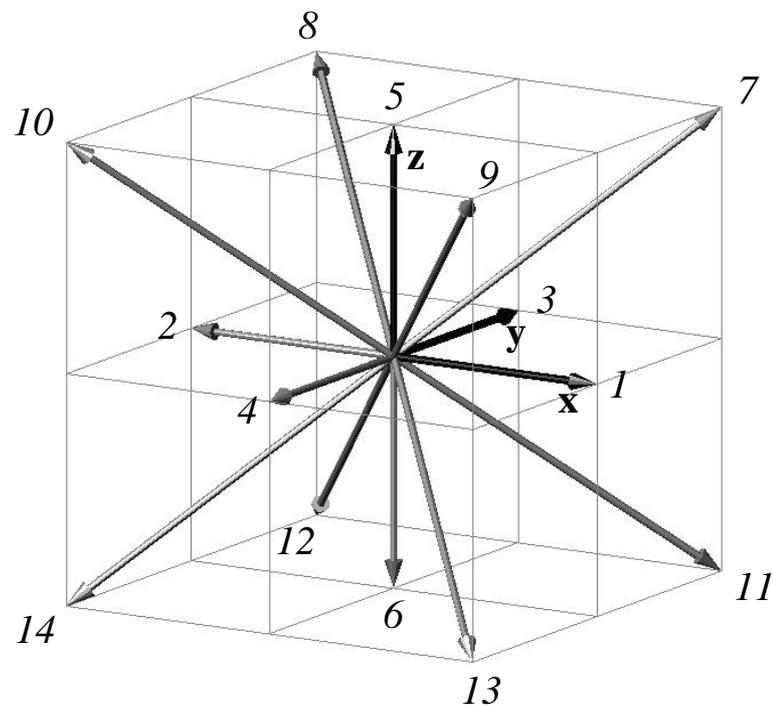


Abbildung A.1: Phasenraumgitter des $d3q15$ -Modells

Mit den spaltenweise gegebenen Koordinaten der Kollokationspunkte des $d3q15$ -Modells

$$\{\vec{e}_i^{d3q15}\} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

ergibt sich das dargestellte Gitter. Die Wichtungsfaktoren sind nach Gl. (4.51) gegeben.

A.2 Kollokationspunkte des $d3q19$ -Modells

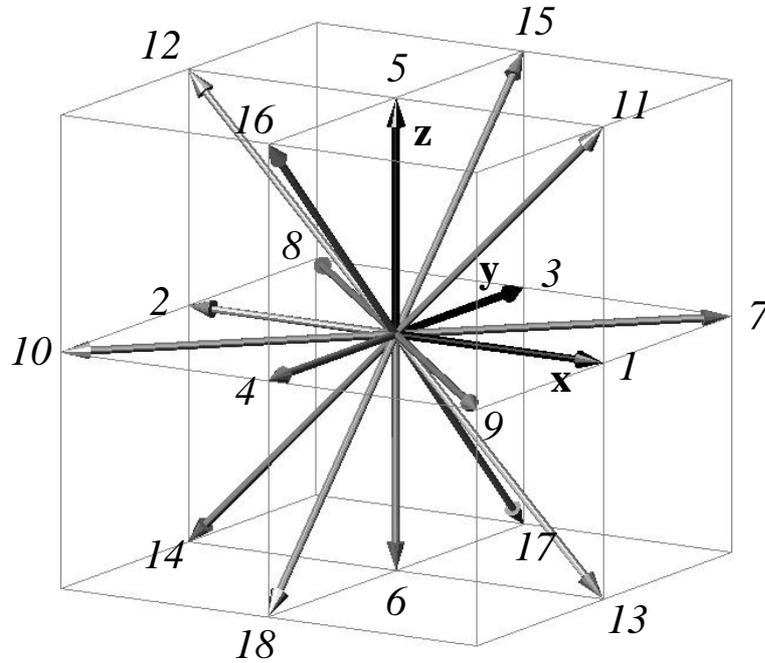


Abbildung A.2: Phasenraumgitter des $d3q19$ -Modells

Mit den spaltenweise gegebenen Koordinaten der Kollokationspunkte des $d3q19$ -Modells

$$\{\vec{e}_i^{d3q19}\} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

ergibt sich das dargestellte Gitter. Die Wichtungsfaktoren sind nach Gl. (4.51) gegeben.

Anhang B

Parameter des Generalisierten Lattice-Boltzmann Verfahrens in 2D

B.1 Transformationsmatrix des $d2q9$ -Modells nach [117]

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Bedeutung der Momente:

$$\begin{aligned} \vec{m} &= (m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6, m_7, m_8, m_9)^T \\ &= (\rho, j_x, j_y, e, p_{xx}, p_{xy}, q_x, q_y, \varepsilon)^T \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

B.2 Gleichgewichtsmomente des $d2q9$ -Modells nach [117]

$$e^{(0)} = (6c_{s0}^2 - 4)\rho + 3(2 - \gamma)(j_x^2 + j_y^2) \quad (\text{B.3})$$

$$\varepsilon^{(0)} = \rho - 3(j_x^2 + j_y^2) \quad (\text{B.4})$$

$$q_x^{(0)} = -j_x, \quad q_y^{(0)} = -j_y \quad (\text{B.5})$$

$$p_{xx}^{(0)} = (j_x^2 - j_y^2), \quad p_{xy}^{(0)} = j_x j_y \quad (\text{B.6})$$

Anhang C

Parameter des hybriden thermischen Lattice-Boltzmann Verfahrens in 2D

C.1 Parameter des $d2q9$ -Modells nach [116]

Kopplung des Gleichgewichtes des zur kinetischen Energie korrespondierenden Momentes an das Temperaturfeld:

$$m_e^{(0)} = 2(3c_{s0}^2 - 2)\rho + 3(2 - \gamma) \vec{j} \cdot \vec{j} + 6T(\vec{x}, t) \quad (\text{C.1})$$

Schallgeschwindigkeit des Modells:

$$c_s^2 = \gamma c_{s0}^2 \quad (\text{C.2})$$

Transportkoeffizienten (mit $s_e = s_4$, $s_{xx} = s_5$, $s_{xy} = s_6$ und $s_{yy} = s_{xy}$):

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{s_{xx}} - \frac{1}{2} \right) \quad \text{und} \quad \zeta = \left(\frac{2}{3} - \gamma c_{s0}^2 \right) \left(\frac{1}{s_e} - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{C.3})$$

C.2 Diskretisierung der Energiegleichung nach [118]

Wahl der Ansatzfunktionen für die Polynomfunktion zur Bestimmung der FD-Operatoren:

$$\phi_0 := 1, \quad (\text{C.4})$$

$$\phi_1 := x, \quad \phi_2 := y, \quad (\text{C.5})$$

$$\phi_3 := (x^2 - y^2), \quad \phi_4 := xy, \quad \phi_5 := (x^2 + y^2), \quad (\text{C.6})$$

$$\phi_6 := x(x^2 + y^2), \quad \phi_7 := y(x^2 + y^2), \quad (\text{C.7})$$

$$\phi_8 := (x^2 + y^2)^2 \quad (\text{C.8})$$

Finite-Differenzen Operatoren des $d2q9$ -Modells:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{i,j}^{(h)} = T_1 - T_3 - \frac{1}{4}(T_5 - T_6 + T_8 - T_7) \quad (\text{C.9})$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{i,j}^{(h)} = T_2 - T_4 - \frac{1}{4}(T_5 - T_8 + T_6 - T_7) \quad (\text{C.10})$$

$$\Delta_{i,j}^{(h)} = 2(T_1 + T_3 + T_2 + T_4) - \frac{1}{2}(T_5 + T_6 + T_8 + T_7) - 6T_0 \quad (\text{C.11})$$

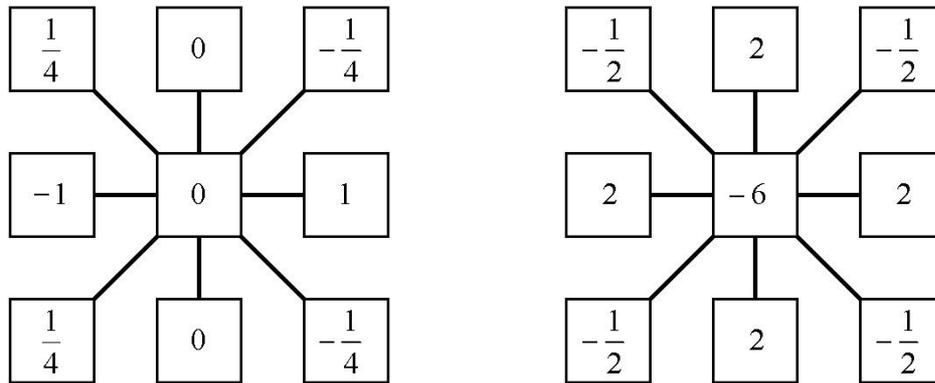


Abbildung C.1: Differenzensterne des $d2q9$ -Modells: $\left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{i,j}^{(h)}$ bzw. $(\Delta T)_{i,j}^{(h)}$

Literaturverzeichnis

- [1] S. Abramowski and H. Müller. *Geometrisches Modellieren*. BI Wissenschaftsverlag, 1991.
- [2] ACIS-Website. Spatial Corporation, USA. <http://www.spatial.com>.
- [3] ACS – Fachmesse für Computersysteme im Bauwesen, 2004. <http://www.acs-show.de>.
- [4] F. Allard, M. Santamouris, S. Alvarez, E. Dascalaki, G. Guarracino, E. Maldonado, S. Sciuto, and L. Vandaele. *Natural ventilation in buildings*. James and James, 1998.
- [5] R. Anderl. *CAD-Schnittstellen, Methoden und Werkzeuge zur CA-Integration*. Hanser Verlag, 1993.
- [6] R. Anderl and D. Trippner. *STEP – Standard for the exchange of product model data*. Teubner Verlag, 2000.
- [7] Apache – System for analysing thermal performance and energy use of buildings. Vertrieb durch IES Limited, Glasgow, UK.
- [8] Arbeitsstättenrichtlinie. Lüftung. ASR 5, Bundesministerium für Arbeit und Sozialordnung.
- [9] ATLAS Projekt, 1992. <http://www.newcastle.research.ec.org/esp-syn/text/7280.html>.
- [10] Autodesk Architectural Desktop 3.3. *OMF Developer's guide*. Autodesk, 2002.
- [11] D. Baehr and K. Stephan. *Wärme- und Stoffübertragung*. Springer Verlag, 3rd edition, 1998.
- [12] W. Bartelheimer. Validation and application of cfd to vehicle aerodynamics. Technical report, BMW Group, JSAE Spring Convention, 2001.
- [13] B.G. Baumgart. Winged-Edge Polyhedron Representation. STAN-CS-72-320, Computer Science Department, Stanford University, 1972.
- [14] V. Bazjanac. Improving building energy performance simulation with software interoperability. In *Proc. 8th IBPSA Conf. Building Simulation*, Eindhoven, Netherlands, 2003.
- [15] I. Beausoleil-Morrison. *The adaptive coupling of heat and air flow modelling within dynamic whole building simulation*. PhD thesis, University of Strathclyde, Glasgow, 2000.

- [16] A. Bejan. *Convection heat transfer*. John Wiley & Sons, Inc., 1993.
- [17] J. Bernsdorf. Introduction to lattice gas and lattice Boltzmann methods. In *DFG and KONWIHR-Workshop on Lattice Boltzmann Methods*, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, FAU Erlangen-Nürnberg, 2001.
- [18] P. Bhatnagar, E.P. Gross, and M.K. Krook. A model for collision processes in gases. *Physical Review*, 94(3):511–525, 1954.
- [19] M. Böhm and G. Storer. ATLAS - Architecture, methodology and tools for computer-integrated large scale engineering. In *Proc. JSPE-IFIP WG 5.3 Workshop, DIISM'93*, Tokyo, 1994.
- [20] J. Bonet and R.D. Wood. *Nonlinear continuum mechanics for finite element analysis*. Cambridge University Press, 1997.
- [21] O. Borkner-Delcarlo. *Eine Halbfacetten-Datenstruktur für die Modellierung von 'non-manifold'-Körpern*. PhD thesis, Berichte aus dem konstruktiven Ingenieurbau, Technische Universität München, 1996.
- [22] H. Bosshard and W. Sutter. Plansatz Atrium Grafenau, Zug (Schweiz). Grundrisse, Ansichten und Fassadenaufbau, Architekturbüro Bosshard & Sutter, Kirchenstr. 13, CH-6301 Zug, 1992.
- [23] P. Bourke. *STL Format*. Centre for Astrophysics and Supercomputing, <http://astronomy.swin.edu.au/~pbourke/geomformats/stl>, 1999.
- [24] J.E. Bresenham. Algorithm for Computer Control of a Digital Plotter. *IBM Systems Journal*, 4(1):25–30, 1965.
- [25] M. Breuer. *Direkte numerische Simulation und Large-Eddy Simulation turbulenter Strömungen auf Hochleistungsrechnern*. Professorial dissertation, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 2001.
- [26] H. Bröker. *Integration von geometrischer Modellierung und Berechnung nach der p-Version der FEM*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2001.
- [27] H. Bröker, V. Nübel, M. Bernreuther, and B. Firmenich. Erfahrungsbericht zur Entwicklung und Anwendung der Methode der Volumenmodellierung. Beitrag zum Arbeitskreis 'Produktmodelle' im Rahmen des Schwerpunktprogramms 1103 der DFG: Vernetzt kooperative Planungsprozesse im Konstruktiven Ingenieurbau, 2002.
- [28] I.N. Bronstein and K.A. Semendjajew. *Taschenbuch der Mathematik*. B.G. Teubner, 25. edition, 1991.
- [29] I. Bryn and P.A. Schiefloe (editors). Atrium models for the analysis of thermal comfort and energy use. Report of Task 12, Project A.3, Atrium Model Development, International Energy Agency (IEA), 1996.

- [30] Bundesamt für Energie und Klima-Suisse. Lüftung von grossen Räumen. Handbuch für Planer, Bundesamt für Energie und Klima-Suisse, Zürich, 1997.
- [31] H.-J. Bungartz, M. Griebel, and Ch. Zenger. *Einführung in die Computergraphik*. Vieweg Verlag, 1996.
- [32] CFX-5, Computational Fluid Dynamics Software, ANSYS, Inc., 2004. <http://www.ansys.com>.
- [33] S. Chapman and T.G. Cowling. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Cambridge University Press, 1939.
- [34] J.A. Clarke. *Energy simulation in building design*. Butterworth-Heinemann, 2nd edition, 2001.
- [35] COMBI Projekt, 1995. <http://wwwcib.bau.tu-dresden.de/combi>.
- [36] J. Corney. *3D modeling with the ACIS kernel and toolkit*. John Wiley & Sons, 1997.
- [37] J. Corney and T. Lim. *3D modeling with ACIS*. Saxe-Coburg Publications, 2001.
- [38] B. Crouse. *Lattice-Boltzmann Strömungssimulation auf Baumdatenstrukturen*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2003.
- [39] E. Cziesielski. Wärmebrücken im Hochbau. *Bauphysik*, 5, 1985.
- [40] G. De Vahl Davis. Natural convection of air in a square cavity: a bench mark numerical solution. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 3:249–264, 1983.
- [41] G. De Vahl Davis and I.P. Jones. Natural convection in a square cavity: a comparison exercise. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, 3:227–248, 1983.
- [42] J.W. Deardorff. A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large reynolds numbers. *J. of Fluid Mechanics*, 41(2):453–480, 1970.
- [43] P. Deuffhard, C. Nytsch-Geusen, J. Rädler, J. Nuez v. Voigt, and C. Klempin. Kopplung von thermischer Gebäudesimulation und Raumluftrömungssimulation mit CAAD-Programmen über den IFC-Standard zur energetischen Gebäudesimulation. Abschlussbericht DBU-Projekt AZ:15531, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, 2003.
- [44] D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, and L.-S. Luo. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360:437–451, 2002.
- [45] R. Diestel. *Graphentheorie*. Springer Verlag, 2. edition, 2000.
- [46] DIN 1946 Teil 2. *Raumluftechnik, Gesundheitstechnische Anforderungen*. DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Beuth Verlag, 1994.
- [47] DIN 33403 Teil 2. *Klima am Arbeitsplatz und in der Arbeitsumgebung*. DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Beuth Verlag, 2001.

- [48] DIN EN ISO 7730. *Analytische Bestimmung und Interpretation der thermischen Behaglichkeit durch Berechnung des PMV- und des PPD-Indexes und der lokalen thermischen Behaglichkeit*. DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Beuth Verlag, 2003.
- [49] J. Duffie and W. Beckman. *Solar Engineering of Thermal Processes*. John Wiley and Sons Inc., New York, 1991.
- [50] F. Durst. *Skriptum Grundlagen der Strömungsmechanik*. Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 2000.
- [51] A. Düster. *High order finite elements for three-dimensional, thin-walled nonlinear continua*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2001.
- [52] A. Düster and E. Rank. *Skriptum Bauinformatik Vertiefung II*. Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2003.
- [53] C.M. Eastman. *Computer Environments Supporting Design and Construction*. CRC Press LLC, 1999.
- [54] J.G.M. Eggels and J.A. Somers. Numerical simulation of free convective flow using the lattice Boltzmann scheme. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 16:357–364, 1995.
- [55] EN ISO 10211 – Part 1 and 2. *Wärmeströme und Oberflächentemperaturen*. DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Beuth Verlag, 1995.
- [56] Energieeinsparverordnung (EnEV). *Verordnung über energieeinsparenden Wärmeschutz und energieeinsparende Anlagentechnik*. Bundesgesetzblatt Nr. 59 vom 21. Nov. 2001, 2001.
- [57] EnergyPlus Simulationssoftware. Vertrieb durch US Department of Energy, EE-41, Washington DC, USA.
- [58] H. Erhorn and E. Tammes. Eine einfache Methode zum Abschätzen balkenförmiger Wärmebrücken in Bauteilen mit planparallelen Oberflächen. *Bauphysik*, 1, 1985.
- [59] T. Ernst, C. Klein-Robbenhaar, A. Nordwig, and T. Schrag. Modellierung und Simulation hybrider Systeme mit SMILE. *Informatik Forschung und Entwicklung, Berlin, Heidelberg*, 15(1):33–50, 2000.
- [60] Europäische Kommission. Energy in Europe – European Union energy outlook to 2020. *Shared Analysis Project, Special Issue*, 1999.
- [61] Eurostep Group AB. *The IFC STEP Toolbox, Version 2.X, Beschreibung der IFC Toolbox Classic*. <http://www.eurostep.com>, 2000.
- [62] P.O. Fanger. *Thermal comfort*. Robert E. Krieger, Malabar, 1982.
- [63] P.O. Fanger, B.M. Ipsen, G. Langkilde, B.W. Olesen, N.K. Christensen, and S. Tanabe. Comfort limits for asymmetric thermal radiation. *Energy and Buildings*, 80:142–157, 1974.

- [64] P.O. Fanger, A.K. Melikov, H. Hanzawa, and J. Ring. Air turbulence and sensation of draught. *Energy and Buildings*, 12:21–39, 1988.
- [65] P.O. Fanger, J. Ostergaard, O. Olesen, T. Madsen, and Lund. The effect on man's comfort of a uniform air flow from different directions. *ASHRAE Transactions*, 80:142–157, 1974.
- [66] G. Farin. *Curves and surfaces for computer aided geometric design*. Academic Press, 4. edition, 1997.
- [67] W. Feist. *Passivhäuser in Mitteleuropa*. PhD thesis, Universität Kassel, Institut Wohnen und Umwelt, Darmstadt, 1993.
- [68] W. Feist. *Thermische Gebäudesimulation, Kritische Prüfung unterschiedlicher Modellansätze*. C.F. Müller Verlag, Heidelberg, 1994.
- [69] O. Filippova and D. Hänel. Boundary-fitting and local grid refinement for LBGK models. *Int. J. Mod. Phys. C*, 8:1271–1279, 1998.
- [70] O. Filippova and D. Hänel. A novel lattice BGK approach for low mach number combustion. *J. Comp. Phys.*, 158:139–160, 2000.
- [71] T. Fink, M. Weise, and P. Katranuschkov. *Arbeitskreis 'Tragwerksplanung', ST-4 Projekt*. http://www.iai-ev.de/projekte/documents/iai_arbeitskreis_tragwerksplanung.htm, 2004.
- [72] E.U. Finlayson, D.K. Arasteh, C. Huizenga, and M.D. Rubin. WINDOW 4: Documentation of calculation procedures. Technical report, Lawrence Berkeley Laboratory, University of California, 1993.
- [73] A.C. Frank. *Organisationsprinzipien zur Integration von geometrischer Modellierung, numerischer Simulation und Visualisierung*. PhD thesis, Lehrstuhl für Informatik, Technische Universität München, 2000.
- [74] Fraunhofer-Institut für Bauphysik Holzkirchen (IBP), Website, 2004. <http://www.ibp.fhg.de>.
- [75] K. Gersten. *Einführung in die Strömungsmechanik*. Vieweg, 6. edition, 1991.
- [76] I. Ginzburg and P. Adler. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model. *J. Phys. II France*, 4:191–214, 1994.
- [77] I. Ginzburg and D. d'Humières. Local second-order boundary methods for lattice Boltzmann models. *J. Stat. Phys.*, 84:927–971, 1996.
- [78] B. Glück. *Wärmetechnisches Raummodell*. C.F. Müller Verlag, Heidelberg, 1997.
- [79] M. Glück. *Ein Beitrag zur numerischen Simulation von Fluid-Struktur-Interaktionen – Grundlagenuntersuchungen und Anwendung auf Membrantragwerke*. PhD thesis, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Universität Erlangen-Nürnberg, 2002.

- [80] M.M. Gonzalez. *Thermal simulation of large glazed spaces, Atrium Grafenau Zug*. Diploma thesis, 2003.
- [81] D. Gray and A. Giorgini. On the validity of the boussinesq approximation for liquids and gases. *Journal of Heat Mass Transfer*, 19:545–551, 1976.
- [82] M. Griebel, T. Dornseifer, and T. Neunhoeffler. *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik*. Vieweg Verlag, 1995.
- [83] G. Grosche, Ziegler V., Ziegler D., and Zeidler E. *Taschenbuch der Mathematik Teil II*. B.G. Teubner, 7. edition, 1995.
- [84] D. Hänel. *Molekulare Gasdynamik*. Springer Verlag, 2004.
- [85] D. Harris and C. Elliot. Energy accounting for recycled building components. In *Proc. 2nd Int. Conf. on Buildings and the Environment*, CIB TG8, Paris, 1997.
- [86] W. Haupt. Zur Simulation von auftriebserregten Raumlufströmungen mit Hilfe von Computational Fluid Dynamics (CFD). *Bauphysik*, 23/6:338–343, 2001.
- [87] G. Hauser and H. Stiegel. *Wärmebrücken Atlas für den Mauerwerksbau*. Bauverlag Wiesbaden, 1990.
- [88] G. Hausladen, K. Kippenberg, and J. Oeltzen. Kontext Bauphysik, Komplexität als Konzept. In D. Danner, F.H. Dassler, and J. Krause, editors, *Die klima-aktive Fassade*, pages 30–39. AIT Edition Intelligente Architektur, 1999.
- [89] X. He, S. Chen, and G.D. Doolen. A novel thermal model for the LBM in incompressible limit. *J. Comp. Phys.*, 146:282–300, 1998.
- [90] X. He and L.-S. Luo. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. *J. Stat. Phys.*, 88(3/4):927–944, 1997.
- [91] P. Heiselberg, S. Murakami, and C.-A. (editors) Roulet. Ventilation of large spaces in buildings. Report of Annex 26, Energy Efficient Ventilation of Large Enclosures, International Energy Agency (IEA), 1998.
- [92] J.L.M Hensen. *On the thermal interaction of building structure and heating and ventilating system*. PhD thesis, University of Strathclyde, Glasgow, 1991.
- [93] J.L.M. Hensen. A comparison of coupled and de-coupled solutions for temperature and air flow in a building. *ASHRAE Trans.*, 105(2):962–969, 1999.
- [94] E. Hering, R. Martin, and M. Stohrer. *Physik für Ingenieure*. VDI Verlag, 1992.
- [95] M. Herrlin and F. Allard. Solution methods for the air balance in multizone buildings. *Energy and Buildings*, (18):159–170, 1992.
- [96] HOOPS 3D Product Suite 7.0. *Reference Manual*. Tech Soft America, Oakland, CA, USA, <http://www.hoops3d.com>, 2002.

- [97] S. Hou et al. A lattice-Boltzmann subgrid model for high Reynolds number flows. *Fields Inst. Comm.*, 6:151–165, 1996.
- [98] Industrieallianz für Interoperabilität, e.V. (IAI). *Industry Foundation Classes (IFC) – Management Übersicht*. <http://www.iai-ev.de>, 1999.
- [99] Inopso GmbH – Interoperable Solutions. *IFC-Utility 2x for ADT 3.3*. <http://www.inopso.com>, 2003.
- [100] International Alliance for Interoperability (IAI). <http://www.iai-international.org>.
- [101] International Alliance for Interoperability (IAI). *IFC Technical guide for release 2x*. <http://iaiweb.lbl.gov>, 2000.
- [102] International Alliance for Interoperability (IAI). *IFC Release 2x Specification (online)*. <http://www.iai-ev.de/spezifikation/Ifc2x>, 2004.
- [103] ISO 10303 (STEP) – Part 1. *Industrial automation systems and integration – Product data representation and exchange – Part 1: Overview and fundamental principles*. International Organization for Standardization, 1994.
- [104] ISO 10303 (STEP) – Part 11. *Industrial automation systems and integration – Product data representation and exchange – Part 11: Description methods: The EXPRESS language reference manual*. International Organization for Standardization, 1994.
- [105] ISO 10303 (STEP) – Part 21. *Industrial automation systems and integration – Product data representation and exchange – Part 21: Implementation methods: Clear text encoding of the exchange structure*. International Organization for Standardization, 2002.
- [106] S. Jaksch. *Facettierung dreidimensionaler Gebiete und Gittergenerierung unter Verwendung von Octree-Datenstrukturen*. Diploma thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2001.
- [107] G. Kähler. Reaktion und Gleichgewicht, Vom Iglu zur klima-aktiven Fassade. In D. Danner, F.H. Dassler, and J. Krause, editors, *Die klima-aktive Fassade*, pages 10–17. AIT Edition Intelligente Architektur, 1999.
- [108] F.-J. Kasper, R. Müller, and R. Rudolphi. Numerische Untersuchung geometriebedingter Wärmebrücken. Technical report, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin, 1990.
- [109] A. Klar. The Boltzmann equation, discrete models and the relation to the Navier-Stokes equations. In *DFG and KONWIHR-Workshop on Lattice Boltzmann Methods*, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, FAU Erlangen-Nürnberg, 2001.
- [110] S.A. Klein et al. *TRNSYS, A transient system simulation program, reference manual 14.2*. Solar Energy Laboratory, University of Wisconsin-Madison, 1994.
- [111] W. Kowalczyk. *Ein interaktiver Modellierer für evolutionäre Produktmodelle*. PhD thesis, Berichte aus dem konstruktiven Ingenieurbau, Technische Universität München, 1997.

- [112] M. Krafczyk. *Gitter-Boltzmann Methoden: Von der Theorie zur Anwendung*. Professorial dissertation, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2001.
- [113] M. Krafczyk, J. Tölke, and L.-S. Luo. Large-eddy simulations with a multiple-relaxation-time LBE-model. *Int. J. Modern Physics B*, 17:33–39, 2003.
- [114] S. Kühner and R. Romberg. Manipulation von IFC Produktmodellldaten mit der Euro-step IFC Toolbox. In R. Romberg and M. Schulz, editors, *Forum Bauinformatik, Junge Wissenschaftler forschen, München '01*, Fortschrittberichte VDI, Reihe 4, Nr.169, pages 18–26, 2001.
- [115] A.J.C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. *J. Fluid Mech.*, 271:285, 1994.
- [116] P. Lallemand. private communications, 2002.
- [117] P. Lallemand and L.-S. Luo. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. *Physical Review E*, 61(6):6546–6562, 1999.
- [118] P. Lallemand and L.-S. Luo. Theory of the lattice Boltzmann method: Acoustic and thermal properties in two and three dimensions. *Physical Review E*, 68(036706), 2003.
- [119] A. Lämmle. *Konvertieren eines IFC-Produktmodells in ein ACIS Geometriemodell*. Diploma thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2003.
- [120] W. Lang. *Typologische Klassifikation von Doppelfassaden und experimentelle Untersuchung von dort eingebauten Lamellensystemen aus Holz zur Steuerung des Energiehaushaltes hoher Häuser unter besonderer Berücksichtigung der Nutzung von Solarenergie*. PhD thesis, Lehrstuhl für Gebäudetechnologie, Technische Universität München, 2000.
- [121] B.E. Launder and D.B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3:269–289, 1974.
- [122] P. Le Quéré. Accurate solutions to the square thermally driven cavity at high Rayleigh number. *Computers Fluids*, 20(1):29–41, 1991.
- [123] G.-W. Mainka and H. Paschen. Wärmebrückenkatalog als Arbeitshilfe. *Bauphysik*, 1, 1987.
- [124] M. Mäntylä. Methodological background of the geometric workbench. CAD-Project HTKK-TK0-B30, Laboratory of Information Processing Science, Helsinki University of Technology, 1981.
- [125] M. Mäntylä. *An introduction to solid modeling*. Computer Science Press, 1988.
- [126] METEONORM V 4.0. *Global meteorological database for solar energy and applied climatology*. Meteotest, <http://www.meteotest.ch/products/meteonorm>, 2000.
- [127] A. Mezrhab, M. Bouzidi, and P. Lallemand. Hybrid lattice-Boltzmann finite-difference simulation of convective flows. preprint subm. to Elsevier Science, 2002.

- [128] G.P. Mitalas and D.G. Stephenson. Calculation of heat conduction transfer functions for multi-layer slabs. *ASHRAE annual meeting, Washington D.C.*, 1971.
- [129] H.F.O. Müller, C. Nolte, and T. Pasquay. Die Mittel aktiv zu sein, Von der Aufgabenstellung zur Lösung. In D. Danner, F.H. Dassler, and J. Krause, editors, *Die klima-aktive Fassade*, pages 40–113. AIT Edition Intelligente Architektur, 1999.
- [130] A. Muthler, D. Düster, W. Volk, M. Wagner, and E. Rank. High order finite elements applied to the computation of elastic spring back in sheet metal forming. In *NUMIFORM 2004. 8th International Conference on Numerical Methods in Industrial Forming Processes*, The Ohio State University, Columbus, Ohio, USA, 2004.
- [131] C.O.R. Negraõ. *Conflation of computational fluid dynamics and building thermal simulation*. PhD thesis, University of Strathclyde, Glasgow, 1995.
- [132] F. Neuberg. *Ein Softwarekonzept zur Internet-basierten Simulation des Ressourcenbedarfs von Bauwerken*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2004.
- [133] C. Nytsch and G. Bartsch. Anwendung der Simulationsumgebung SMILE zur Abbildung des zonalen und interzonalen Luftwechsels in Gebäuden. Festschrift zum 60. geb. von prof. gummert, Institut für Mechanik, Technische Universität Berlin, 1998.
- [134] C. Nytsch-Geusen. *Berechnung und Verbesserung der Energieeffizienz von Gebäuden und ihren energietechnischen Anlagen in einer objektorientierten Simulationsumgebung*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, VDI-Verlag, 2001.
- [135] C. Nytsch-Geusen and G. Bartsch. An object-oriented multizone thermal building model based on the simulation environment SMILE. In *Proc. 7th IBPSA Conf. Building Simulation*, Rio de Janeiro, Brazil, 2001.
- [136] B.W. Olesen, M. Scholer, and P.O. Fanger. Discomfort caused by vertical air temperature differences. In P.O. Fanger and O. Valbjorn, editors, *Indoor Climate*. Danish Building Research Institute, Kopenhagen, 1979.
- [137] OpenGL-Website. The Industry's Foundation for High Performance Graphics. <http://www.opengl.org>.
- [138] J. O'Rourke. *Computational geometry in C*. Cambridge University Press, 2. edition, 1998.
- [139] P.J. Pahl and R. Damrath. *Mathematische Grundlagen der Ingenieurinformatik*. Springer Verlag, 2000.
- [140] E. Pauli and Ruch R. Grafenau Zug – Gebäude- und Anlagenbeschrieb. Interner Bericht, Eicher & Pauli AG, Liestal, Schweiz, 1994.
- [141] G. Peng, Haowen Xi, Duncan C., and So-Hsiang Chou. Finite volume scheme for the lattice Boltzmann method on unstructured meshes. *Phys. Review E*, 59(4):4675–4682, 1999.

- [142] PERL Skriptsprache, 2004. <http://www.perl.org>.
- [143] A. Pernpeintner. *Skriptum Aerodynamik der Bauwerke*. Lehrstuhl für Fluidmechanik, Technische Universität München, 1995.
- [144] A. Pernpeintner and J. Fischer. Der Wind als Faktor in der Bauwerksplanung. In *Proc. Kongress ClimaDesign auf der Messe BAU2003*, München, 2003.
- [145] M. Petersen and U. Meißner. Energieoptimierte Gebäudeplanung mit verteilter Informationsmodellierung. In *Proc. IKM – Bauhaus-Universität Weimar*, Weimar, 2000.
- [146] C.-H. Petzinka. Düsseldorf Stadttor, Glas- und Gebäudetechnologie. In *3. Fachkongress Innovatives Bauen mit Glas*, Bauzentrum München, 1995.
- [147] W.J. Platzer. Fenster und Verglasungen. In Marko and Braun, P.O. (Fraunhofer ISE), editors, *Thermische Solarenergienutzung an Gebäuden*. Springer Verlag, 1994.
- [148] prEN 30077:1993. *Fenster, Türen und Abschlüsse, Rechenmethode*. DIN Deutsches Institut für Normung e.V., Beuth Verlag, 1994.
- [149] G. Pültz. *Bauklimatischer Entwurf für moderne Glasarchitektur, Passive Massnahmen der Energieeinsparung*. Verlag Ernst und Sohn, 2002.
- [150] Python Skriptsprache, 2004. <http://www.python.org>.
- [151] Y.H. Qian, D. d’Humières, and P. Lallemand. Lattice BGK models for Navier-Stokes equations. *Europhys. Lett.*, 17(6):479–484, 1992.
- [152] QT Online-Referenz, 2004. <http://www.trolltech.com>.
- [153] E. Rank. *Skriptum Bauinformatik I (CAD)*. Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2001.
- [154] E. Rank, C. van Treeck, B. Crouse, T. Schrag, and C. Katz. 1. Zwischenbericht zum Forschungsprojekt SIMFAS. Förderung: Bayerische Forschungstiftung, AZ:468/01, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2003.
- [155] E. Rank, C. van Treeck, T. Schrag, and C. Katz. 2. Zwischenbericht zum Forschungsprojekt SIMFAS. Förderung: Bayerische Forschungstiftung, AZ:468/01, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2004.
- [156] E. Rank, C. Zenger, H.-J. Bungartz, R. Romberg, and R.-P. Mundani. DFG Projektbericht über 1. Phase. Schwerpunktprogramm 'Volumenorientierte Modellierung als Grundlage einer vernetzt-kooperativen Planung im konstruktiven Ingenieurbau', Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2002.
- [157] W. Rodi. *Turbulence Models and their application in hydraulics*. A.A. Balkema Publishers, Rotterdam, 3rd edition, 1993.
- [158] R. Romberg. *Produktmodell-basierte Strukturanalyse im Bauwesen*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, noch nicht veröffentlicht.

- [159] R. Romberg, A. Niggel, C. van Treeck, and E. Rank. Structural analysis based on the product model standard IFC. In *ICCCBE, Xth International Conference on Computing in Civil and Building Engineering*, Weimar, 2004.
- [160] R. Romberg, C. van Treeck, A. Niggel, and E. Rank. Volumenmodelle als Basis numerischer Simulationen. In *Int. Koll. Anwendg. d. Informatik u. d. Mathematik in Architektur und Bauwesen (IKM)*, Weimar, 2003.
- [161] D. Rothman and S. Zaleski. *Lattice-Gas Automata: Simple models of complex fluids*. Cambridge University Press, 1997.
- [162] M. Rubin. Calculating heat transfer through windows. *U.S. Energy Research*, 6:341–349, 1982.
- [163] M. Rubin. Solar optical properties of windows. *U.S. Energy Research*, 6:123–133, 1982.
- [164] P. Sagaut. *Large Eddy simulation for incompressible flows*. Springer Verlag, 2. edition, 2001.
- [165] R.J. Scherer. COMBI: Overview and objectives, product and process modelling in the building industry 94. pages 503–510. Balkema, Rotterdam, 1995.
- [166] R.J. Scherer and H.-M. Sparacello. COMBI final report. EU/CEC ESPRIT III Project No. 6609, Technische Universität Dresden, 1996.
- [167] P.G. Schild, P.O. Tjelflaat, and D. Aiulfi. Guidelines for CFD modeling of atria. *ASHRAE Transactions: Symposia*, SD-95-18-5:1311–1331, 1995.
- [168] H. Schlichting and K. Gersten. *Grenzschicht-Theorie*. Springer Verlag, 9. edition, 1996.
- [169] A. Schälin. Messdaten zum Atrium Grafenau Zug, private communications, 2003.
- [170] E. Schlünder et al. *VDI-Wärmeatlas*. VDI-Verlag, 1984.
- [171] T. Schrag. *Modellierung, Simulation und Optimierung solarthermischer Anlagen in einer objektorientierten Simulationsumgebung*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2000.
- [172] A. Schub. *Skriptum Produktionsplanung und Ablaufplanung*. Lehrstuhl für Tunnelbau und Baubetrieb, Technische Universität München, 5. edition, 1994.
- [173] M. Schuler and T. Lechner. Rahmenbedingungen, Ökologie, Ökonomie und Komfort. In D. Danner, F.H. Dassler, and J. Krause, editors, *Die klima-aktive Fassade*, pages 18–29. AIT Edition Intelligente Architektur, 1999.
- [174] U. Schumann. Subgrid-scale model for finite-difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli. *J. of Comput. Physics*, 18:376–404, 1975.
- [175] H.R. Schwarz. *FORTTRAN-Programme zur Methode der Finiten Elemente*. B.G. Teubner, 3. edition, 1991.

- [176] H.R. Schwarz. *Methode der Finiten Elemente*. B.G. Teubner, 3. edition, 1991.
- [177] H.R. Schwarz. *Numerische Mathematik*. B.G. Teubner, 4. edition, 1997.
- [178] J. Sedlacek. *Einführung in die Graphentheorie*. Verlag Harri Deutsch, 2. edition, 1972.
- [179] A.G. Seitz. *Entwurf und Implementierung einer geometrischen Partitionierung von Gebäudemodellen unter Verwendung des Geometriemodellierkerns ACIS*. Diploma thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2002.
- [180] X. Shan. Simulation of Rayleigh-Bénard convection using lattice Boltzmann method. *Physical Review E*, 55:2780, 1997.
- [181] X. Shan and H. Chen. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, 47:1815–1819, 1993.
- [182] X. Shan and X. He. Discretization of the velocity space in solution of the Boltzmann equation. *Physical Review Letters*, pages 65–68, 1998.
- [183] B.-C. Shi, Z.-L. Guo, and N.-C. Wang. Lattice Bhatnagar-Gross-Krook simulations of turbulent natural convection in a cavity. *Chin. Phys. Lett.*, 19(4):515–517, 2002.
- [184] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations, I, The basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, 91:99–165, 1963.
- [185] R. Steinmann. *Website of IAI-Implementation Support Group (ISG)*. http://www.iai.fhm.edu/iai_isg, 2004.
- [186] TAS – Thermal Analysis Software. Vertrieb durch IFES GmbH, 50226 Frechen, Deutschland.
- [187] Spatial Technology, Inc. *ACIS 3D Toolkit – Getting Started Guide*. Spatial Technology, USA, 1999.
- [188] Spatial Technology, Inc. *ACIS 3D Toolkit – Technical Overview*. Spatial Technology, USA, 1999.
- [189] J. Tölke. *Die Lattice-Boltzmann-Methode für Mehrphasenströmungen*. PhD thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, 2001.
- [190] J. Tölke, M. Krafczyk, M. Schulz, E. Rank, and R. Berrios. Implicit discretization and non-uniform mesh refinement approaches for FD discretizations of LBGK models. *Int. J. of Mod. Physics C*, 9(8):1143–1157, 1998.
- [191] V. Turau. *Algorithmische Graphentheorie*. Addison-Wesley, 1996.
- [192] J. van Kan and A. Segal. *Numerik partieller Differentialgleichungen für Ingenieure*. B. Teubner, Stuttgart, 1995.

- [193] C. van Treeck. *Numerische Bestimmung der Transmissionswärmeverluste durch Wärmebrücken in der dynamischen Gebäudesimulation am Beispiel eines hochwärmegeprägten Mehrfamilienhauses*. Diploma thesis, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München und Fraunhofer-Institut für solare Energiesysteme (ISE), Freiburg, 1997.
- [194] C. van Treeck, M. Krafczyk, S. Kühner, and Rank E. Direct building energy simulation based on large eddy techniques and lattice boltzmann methods. In *Proc. 7th IBPSA Conf. Building Simulation*, Rio de Janeiro, Brazil, 2001.
- [195] C. van Treeck, M. Krafczyk, and M. Schulz. Lattice-Boltzmann Verfahren im Bauwesen – Tutorial eines grafisch-interaktiven Strömungssimulators in 2D. In R. Romberg and M. Schulz, editors, *Forum Bauinformatik, Junge Wissenschaftler forschen, München '01*, Fortschrittberichte VDI, Reihe 4, Nr.169, pages 249–259, 2001.
- [196] C. van Treeck and E. Rank. Analysis of building structure and topology based on graph theory. In *ICCCBE, Xth International Conference on Computing in Civil and Building Engineering*, Weimar, 2004.
- [197] C. van Treeck, R. Romberg, and Rank E. Simulation based on the product model standard IFC. In *Proc. 8th IBPSA Conf. Building Simulation*, Eindhoven, Netherlands, 2003.
- [198] C. van Treeck, R. Romberg, and E. Rank. Graphentheoretische Analyse von Produktmodelldaten hinsichtlich Raumtopologie und Gebäudestruktur. In *Festschrift 60. Geb. Prof. Hartmann, Tagungsband*. VDI-Verlag, 2004.
- [199] G.N. Walton. A computer program for building air flow network modeling. 89-4072, National Institute of Standards and Technology (NIST), 1988.
- [200] Wärmeschutzverordnung vom 16. August 1994 (WSchVo). Bundesministerium für Wirtschaft, Bonn, 1994.
- [201] T.R. Weber. Checking of simulation models in a ventilation test room. In *18th annual AIVC conference*, Athens, 1997.
- [202] K. Weiler. *Topological structures for geometric modeling*. PhD thesis, Faculty of Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York, 1986.
- [203] K. Weiler. The radial-edge structure: a topological representation for non-manifold geometric boundary modeling. In M. Wozny, H. McLaughlin, and J. Encarnacao, editors, *Geometric Modeling for CAD Applications*, pages 3–36. Elsevier Science Publishers, North-Holland, 1988.
- [204] M. Weise and P. Katranuschkov. *ST-4 Project 'Structural Analysis Model and Steel Construction'*. <http://cib.bau.tu-dresden.de/icss/structural>, 2004.
- [205] H. Wengle. *Vorlesung und Skriptum Numerische Berechnung Turbulenter Strömungen*. Lehrstuhl für Fluidmechanik, Technische Universität München, 2001.

-
- [206] P. Wenisch, C. van Treeck, and E. Rank. Interactive indoor air flow analysis using high performance computing and virtual reality techniques. In *Roomvent Conference, submitted.*, Portugal, 2004.
- [207] P. Wenisch and O. Wenisch. Technical report, Lehrstuhl für Bauinformatik, Technische Universität München, unpublished.
- [208] H. Werner and Wengle H. Large eddy simulation of turbulent flow over and around a cube in a plate channel. In Schumann et al., editors, *8th Symp. on Turb. Shear Flows, Schumann et al. (eds.)*. Springer Verlag, Berlin, 1993.
- [209] D.A. Wolf-Gladrow. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*. Springer Verlag, 2000.
- [210] X. Yuan, A. Moser, and P. Suter. Wall functions for numerical simulation of turbulent natural convection along vertical planes. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 36(18):4477–4485, 1993.
- [211] G. Zanetti and McNamara. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2332–2335, 1998.