

**BEITRÄGE
ZUR
MATERIALTHEORIE**

Herausgeber: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Lion

Sebastian Faller

**Bestimmung der temperatur-
und aushärtegradabhängigen
Wärmeleitfähigkeit mit Hilfe
finiter Volumen gestützter
inverser Methoden**

**Bestimmung der temperatur-
und aushärtegradabhängigen
Wärmeleitfähigkeit mit Hilfe finiter
Volumen gestützter inverser Methoden**

von

Sebastian Faller

Universität der Bundeswehr München
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik
Institut für Mechanik (LRT 4)
Werner-Heisenberg-Weg 39
85579 Neubiberg
Deutschland

Heft 01/11 der Reihe

Beiträge zur Materialtheorie

Herausgeber: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Lion

ISSN 1862-5703

Herausgeber:

Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Lion
Universität der Bundeswehr München
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik
Institut für Mechanik (LRT 4)
Werner-Heisenberg-Weg 39
85579 Neubiberg
Deutschland

Sebastian Faller:
Bestimmung der temperatur-
und aushärtegradabhängigen
Wärmeleitfähigkeit mit Hilfe finiter
Volumen gestützter inverser Methoden

Beiträge zur Materialtheorie 01/11
Neubiberg 2011
ISSN 1862-5703

Postanschrift des Verfassers:

Sebastian Faller
Werner-Heisenberg-Weg 411/116
85579 Neubiberg

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist unzulässig und strafbar. Insbesondere gilt dies für die Übersetzung, den Nachdruck sowie die Speicherung auf Mikrofilm, mit vergleichbaren Verfahren oder in Datenverarbeitungsanlagen.

Inhaltsverzeichnis

Kurzzeichenverzeichnis	iii
1 Einleitung	1
2 Ziel der Arbeit	3
3 Versuch	5
3.1 Versuchsaufbau	5
3.2 Theoretische Grundlagen zur Infrarotmessung	8
3.3 Ergebnisse	10
4 Materialmodellierung	13
4.1 Reaktionskinetik	13
4.2 Reaktionsenthalpie	15
4.3 Spezifische Wärmekapazität	18
4.4 Dichte	20
4.5 Wärmeleitfähigkeit	22
5 Simulation des Aushärtevorgangs	24
5.1 Finite Volumen Methode	24
5.2 Wärmeleitfähigkeit bei veränderlichen Stoffparametern	29
5.3 Randbedingungen	30
5.3.1 Adiabater Rand	32
5.3.2 Rand mit freier Konvektion	34
5.3.3 Rand mit Konduktion	35
5.4 Gitter	37
5.5 Zeitliche Diskretisierung	39
5.5.1 Explizites Verfahren	40
5.5.2 Implizites Verfahren	41
5.6 Berücksichtigung des Styrodurs	42
5.7 Validierung der Simulation	46
5.8 Ergebnisse der Simulation	53
6 Inverse Methode zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit	63
6.1 Optimierungsproblem	63
6.2 Ergebnisse	66

Inhaltsverzeichnis

7	Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit	69
7.1	Veränderter Versuchsaufbau	69
7.2	Simulation des Temperaturverlaufs in vertikaler Richtung	73
7.3	Modifiziertes Optimierungsproblem	75
8	Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier und Maxwell-Cattaneo	80
8.1	Theoretische Grundlagen der Wärmeleitung nach Maxwell-Cattaneo . .	80
8.2	Ergebnisse	81
9	Zusammenfassung	88
	Literaturverzeichnis	89
	Abbildungsverzeichnis	90
	Tabellenverzeichnis	93
	Anhang	94

Kurzzeichenverzeichnis

Geometrische Größen

Zeichen	Einheit	Bedeutung
A	m^2	Grenzfläche zwischen zwei benachbarten Teilvolumen
R_{Sty}	mm	Radius des Styrodurs
r_{Probe}	mm	Radius der Probe
Δr	m	Abstand zwischen zwei Knotenpunkten in radialer Richtung
V	m^3	Volumen
dV	m^3	Endlich kleines Teilvolumen
$Y_{Plexiglas}$	mm	Höhe des Plexiglases
Y_{Sty}	mm	Höhe des Styrodurs
$Y_{Sty-Boden}$	mm	Höhe der Boden-Styrodurplatte
y_{Probe}	mm	Höhe der Probe
Δy	m	Abstand zwischen zwei Knotenpunkten in vertikaler Richtung

Materialspezifische Stoffgrößen

Zeichen	Einheit	Bedeutung
$c_{p,Luft}$	$J/(kgK)$	spezifische Wärmekapazität der Luft
$c_{v,Plexiglas}$	$J/(kgK)$	spezifische Wärmekapazität des Plexiglases
$c_{v,PMMA}$	$J/(kgK)$	spezifische Wärmekapazität der stabilisierten Flüssigkeit
$c_{v,Sty}$	$J/(kgK)$	spezifische Wärmekapazität des Styrodurs
k	$W/(m K)$	Allgemeine Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements
k_{fest}	$W/(m K)$	Wärmeleitfähigkeit des ausgehärteten Knochenzements
$k_{flüssig}$	$W/(m K)$	Wärmeleitfähigkeit des flüssigen Knochenzements
k_{Luft}	W/mK	Wärmeleitfähigkeit der Luft
$k_{Plexiglas}$	$W/(mK)$	Wärmeleitfähigkeit des Plexiglases

Inhaltsverzeichnis

k_{PMMA}	$W/(mK)$	Wärmeleitfähigkeit der stabilisierten Flüssigkeit
k_{Sty}	$W/(mK)$	Wärmeleitfähigkeit des Styrodurs
ν_{Luft}	m^2/s	kinematische Viskosität der Luft
ρ_0	kg/m^3	Dichte des Knochenzements im flüssigen Zustand bei 37°C
ρ_{Luft}	kg/m^3	Dichte der Luft
$\rho_{Plexiglas}$	kg/m^3	Dichte des Plexiglases
ρ_{PMMA}	kg/m^3	Dichte der stabilisierten Flüssigkeit
ρ_{Sty}	kg/m^3	Dichte des Styrodurs

Weitere physikalische Größen

Zeichen	Einheit	Bedeutung
c	m/s	Lichtgeschwindigkeit
c_p	J/kgK	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	J/kgK	Spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$E_{Bindung}$	J	Bindungsenergie eines Valenzelektrons
E_{Photon}	J	Energie eines Photons
g	m/s^2	Gravitationskonstante
HR	K/W	Wärmewiderstand
h	J/kg	Massenspezifische Reaktionsenthalpie
h_{fest}	J/kg	Enthalpie des ausgehärteten Knochenzements
$h_{flüssig}$	J/kg	Enthalpie des unausgehärteten Knochenzements
h_{Pl}	Js	Planck Konstante
h_{tot}	J/kg	Massenspezifische Totalenthalpie
\bar{h}	W/m^2K	Wärmeübergangskoeffizient Über die Probenoberfläche
\bar{h}_{horz}	W/m^2K	gemittelter Wärmeübergangskoeffizient Über die Mantelfläche
\bar{h}_{vert}	W/m^2K	gemittelter Wärmeübergangskoeffizient Über die Mantelfläche
M_λ	W/m^3	Spektrale Verteilung der Strahlung
m	kg	Masse
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
\dot{Q}	J/s	Allgemeiner Wärmestrom
\dot{Q}_{Sty}	J/s	Wärmestrom zwischen Knochenzement und Styrodur
\dot{Q}_{Quelle}	J/s	Quellterm
q		Polymerisationsgrad bzw. Aushärtegrad

Inhaltsverzeichnis

q_{end}		Maximal erreichbarer Polymerisationsgrad
R_G	$J/(Kmol)$	Allgemeine Gaskonstante
$R_{th,K}$	Km^2/W	Kontaktwiderstand
T	K	Temperatur
T_0	K	Referenztemperatur
T_∞	K	Umgebungstemperatur
$T_{g,0}$	$^\circ C$	Glasübergangstemperatur im unausgehärteten Zustand
$T_{g,1}$	$^\circ C$	Glasübergangstemperatur im ausgehärteten Zustand
$T_{Heizplatte}$	K	Temperatur der Heizplatte
T_{Sty}	K	Temperatur des Styrodurs
t	s	Zeit
U	J	Innere Energie
W	J	Arbeit
ϵ		Emissionsgrad
ϵ_{th}	$1/K$	Temperaturausdehnungskoeffizient
$\Delta\epsilon_{th}$	$1/K$	Änderung des Temperaturausdehnungs- koeffizienten vom flüssigen in den vollständig ausgehärteten Zustand
λ	m	Wellenlänge
ρ	kg/m^3	Dichte
τ	s	Relaxationszeit
φ		Volumetrische Dehnung
χ		Schrumpfung

Mathematische Symbole

Zeichen	Einheit	Bedeutung
a_1	$W/(m K)$	Variable zu Beschreibung der Wärmeleitfähigkeit
Δa_1	$W/(mK)$	Veränderung der Zielgröße a_1
$a_{1,min}$		Untere Grenze für die Zielgröße a_1
$a_{1,max}$		Obere Grenze für die Zielgröße a_1
$a_{1,optimal}$		Zu bestimmende Größe des ersten Optimierungsproblems
b_1	$W/(m K^2)$	Variable zu Beschreibung der Wärmeleitfähigkeit
$b_{1,min}$		Untere Grenze für die Zielgröße b_1
$b_{1,max}$		Obere Grenze für die Zielgröße b_1
$b_{1,optimal}$		Zu bestimmende Größe des ersten Optimierungsproblems
erf		Gauß'sches Fehlerintegral

Inhaltsverzeichnis

f_D		Diffusionsfaktor
F		Fehlerfunktion
Fo		Fourierzahl
$\Delta h_{0,Fehler}$	J/g	Fehler in der Enthalpiedifferenz
$\Delta T_{Verlauf,\bar{h}_{horz}}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Wärmeübergangskoeffizientenfehlers
k_{Ersatz}	$W/(mK)$	Ersatzwärmeleitfähigkeit
$k_{PMMMA,bestfit}$	$W/(mK)$	Zu bestimmende Größe des modifizierten Optimierungsproblems
$\overline{Nu_r}$		Auf den Radius bezogene gemittelte Nusselt-Zahl
Pr		Prandtl-Zahl
Ra_r		Auf den Radius bezogene Rayleighzahl
$\Delta R_{th,K}$	Km^2/W	Fehler im Kontaktwiderstand
$R_{th,K,bestfit}$	km^2/W	Zu bestimmende Größe des modifizierten Optimierungsproblems
s_{a_1}	$W/(mK)$	Schrittweite für die Zielgröße a_1
s_{b_1}	$W/(mK^2)$	Schrittweite für die Zielgröße b_1
T_{in}	K	Eingebrachte Temperaturdifferenz
T_{start}	$^{\circ}C$	Starttemperatur der Messung
ΔT_{Start}	K	Fehler in der Starttemperatur
ΔT_{Quelle}	K	Temperaturerhöhung durch chemische Reaktion
$\Delta T_{Verlauf,a_1}$	K	Empfindlichkeit des Temperaturverlaufs auf die Zielgröße a_1
$\Delta T_{Verlauf,Gesamt}$	K	Gesamter auftretender Fehler im Temperaturverlauf
$\Delta T_{Verlauf,h_0}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Enthalpiedifferenzfehlers
$\Delta T_{Verlauf,\bar{h}_{horz}}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Wärmeübergangskoeffizientenfehlers
$\Delta T_{Verlauf,Korrelation}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Korrelationsfehlers
$\Delta T_{Verlauf,Messung}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Emissionskoeffizientenfehlers
$\Delta T_{Verlauf,RB}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Fehlers in der Randbedingung
$\Delta T_{Verlauf,R_{th,K}}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Kontaktwiderstandfehlers
$\Delta T_{Verlauf,Start}$	K	Temperaturfehler aufgrund des Starttemperaturfehlers
$\Delta t_{Korrelation}$	s	Korrelationsfehler zwischen Messung und Simulation
Z_K		Anzahl der möglichen Kombination an Zielgrößen

Inhaltsverzeichnis

γ	Dimensionslose Kenngröße
$\Delta\epsilon$	Fehler im Emissionskoeffizienten
μ	Dimensionslose Orts-Zeit-Koordinate

Konstanten des Materialmodells

Zeichen	Einheit	Wert
a_2	$W/(m K)$	0.2788
a_{fest}	J/kgK	1112
$a_{flüssig}$	J/kgK	1226
b		0.1917
b_2	$W/(m K^2)$	-0.000423
b_{fest}	J/kgK^2	3.011
$b_{flüssig}$	J/kgK^2	3.288
c_1	Wm^2	$3.74 \cdot 10^{-16}$
c_2	Km	$1.44 \cdot 10^{-2}$
E_1	J/mol	$7.964 \cdot 10^4$
E_2	J/mol	$4.571 \cdot 10^4$
K_{10}		$1.792 \cdot 10^{10}$
K_{20}		$3.234 \cdot 10^6$
ΔT	$^{\circ}C$	20
α		2.05
β		0.95
κ		2.5021
ξ		-1.3592

1 Einleitung

Der medizinische Einsatz von Kunststoffen fand in der Dentalchirurgie seinen Anfang. Doch seit über 40 Jahren werden Kunststoffe auf Basis von Polymethylmethacrylat (kurz PMMA) auch in der Endoprothetik angewendet. Durch diese Verwendung kam PMMA zu dem Namen Knochenzement, was ursprünglich allgemein für kaltpolymerisierende Kunststoffe stand [1]. Bei der Verankerung von künstlichen Gelenken dient der Knochenzement dazu, die vom Implantat aus einwirkende Kräfte auf den Knochen (und umgekehrt) zu übertragen [2]. Des Weiteren kann der Knochenzement auch als Trägermatrix für lokale Applikationen von Antibiotikum benutzt werden. Das aktuellste Anwendungsgebiet ist die Behandlung von Wirbelkörperbrüchen durch Osteoporose. Hierbei wird der Knochenzement über Punktionsnadeln in den Wirbelkörper injiziert. So wird er von innen ausgefüllt und stabilisiert. Um einen Operationserfolg zu garantieren, ist es wichtig, den Knochenzement gleichmäßig im Wirbel zu verteilen. Dies wird dadurch gewährleistet, dass die Operation in einer Röntgenröhre durchgeführt wird. Durch den Zusatz von Zirkondioxid im Knochenzement ist dieser auf der Röntgenaufnahme sichtbar. So lässt sich die Verteilung intraoperativ steuern. Es fehlt allerdings noch ein exaktes mathematisches Modell, um diesen Vorgang beschreiben zu können. So ist es noch nicht möglich eine genaue Vorhersage zu treffen, wie sich der Knochenzement bei bestimmten Bedingungen im Wirbel verteilen wird. Wenn der Knochenzement den Wirbel nicht optimal ausfüllt, besteht die Gefahr der aseptischen Lockerung durch Hitze nekrose. Diese entsteht in Folge einer kurzfristigen Temperaturspitze während der Aushärtung. Darüber hinaus kann das umliegende Gewebe beschädigt werden.

Bevor dieser Vorgang modelliert werden kann, müssen erst die thermischen und mechanischen Eigenschaften des Knochenzements während der Aushärtung bestimmt werden. Im Folgenden wird die veränderliche Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements während der Aushärtung untersucht. Die Wärmeleitfähigkeit hängt sowohl von der Temperatur, als auch vom Aushärtegrad des PMMA ab. Nur durch ein genaues Kenntnis dieses Zusammenhangs kann die Temperaturverteilung und damit das inhomogene Aushärteverhalten in osteoporotischen Wirbelkörpern korrekt wiedergegeben werden. Die Ergebnisse stellen die Grundlage für eine spätere Simulation des Vorgangs dar. Darüber hinaus ist die Kenntnis der Wärmeleitfähigkeit wichtig, um fundierte Aussagen treffen zu können, welche Temperaturspitzen im Wirbelkörper auftreten und an welcher Stelle sich diese befinden. Die Operationsergebnisse können mit Hilfe dieses Wissens verbessert und die Gefahr von Hitze nekrose gesenkt werden.

Es gibt verschiedene experimentelle Vorgehensweisen zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit. Diese beruhen im Allgemeinen darauf, dass dem Material Energie in Form von Wärme zugeführt wird und die entsprechende Temperaturantwort des Systems gemessen wird. Aus diesem Verhältnis kann anschließend die Wärmeleitfähigkeit be-

1 Einleitung

rechnet werden. In dem betrachteten Fall des Knochenzements sind derartige Methoden allerdings ungeeignet. Durch eine Wärmezufuhr von Außen wird eine lokale Aushärtung des Materials induziert. Somit kommt es zu einer Verfälschung des Messergebnisses. Darüber hinaus kann auch die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit vom Aushärtegrad nicht bestimmt werden. Es ist also nötig, eine neue Methode zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit zu entwickeln, die den Aushärtevorgang des Knochenzements nicht beeinflusst. In der vorliegenden Arbeit soll eine Möglichkeit gefunden werden, die Wärmeleitfähigkeit mit Hilfe inverser Methoden zu berechnen.

2 Ziel der Arbeit

Ziel der Arbeit ist es, die Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements mit Hilfe einer inversen Methode zu berechnen. Dabei soll ausgehend von der Temperaturverteilung an der Oberfläche des Materials die Wärmeleitfähigkeit bestimmt werden. Da sich die Temperatur unter anderem aus dieser Größe ergibt, handelt es sich bei der umgekehrten Aufgabenstellung um ein inverses Problem. Die Temperatur an der Oberfläche ändert sich während der Aushärtung aufgrund der durch die Polymerisation des PMMA freigesetzten Energie und den gegebenen Randbedingungen. Sie ist somit zeitlich veränderlich. In einem Versuch soll der zeitliche Verlauf der Oberflächentemperatur mittels einer Infrarotkamera bestimmt werden.

Aufgrund bereits bekannter Abhängigkeiten der restlichen Stoffparameter des Knochenzements von Temperatur und Aushärtegrad, ist es möglich den Aushärtevorgang zu simulieren. Da allerdings der genaue Zusammenhang zwischen der Wärmeleitfähigkeit und dem Aushärtegrad, beziehungsweise der Temperatur noch nicht bekannt ist, wird bei der Simulation für diesen Parameter ein Wert angenommen. Dieser Wert berechnet sich anhand der Formel

$$k = k_{flüssig} (1 - q) + k_{fest} q \quad (2.1)$$

$$k = [a_1 + b_1 (T - T_0)] (1 - q) + [a_2 + b_2 (T - T_0)] q \quad (2.2)$$

Die Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements k setzt sich nach (2.1) aus zwei Komponenten zusammen. Dabei beschreibt $k_{flüssig}$ den rein flüssigen Zustand und k_{fest} das vollständig ausgehärtete PMMA. Während des Aushärtevorgangs steigt der Aushärtegrad q von 0 auf maximal 1 an. Die Wärmeleitfähigkeit des flüssigen Materials geht somit in die Wärmeleitfähigkeit des festen Zustandes über. In Gleichung (2.2) wurde zusätzlich die Temperaturabhängigkeit berücksichtigt. Dabei bezieht sich die Temperatur T auf eine Referenztemperatur T_0 . Die Parameter a_2 und b_2 sind bekannt. Da sie den ausgehärteten Knochenzement beschreiben, konnten sie im Vorfeld mit Hilfe des Laser-Flash-Verfahrens bestimmt werden. Nachdem die Polymerisation in diesem Zustand bereits abgeschlossen ist, hat die für diese Methode nötige Energieeinbringung in das Material keinen Einfluss mehr auf die Stoffeigenschaften.

Mit Hilfe der Simulation kann die Oberflächentemperatur in Abhängigkeit der Variablen a_1 und b_1 berechnet werden. Durch den Vergleich der Messergebnisse mit den berechneten Daten, kann ein Fehler in Abhängigkeit dieser Größen bestimmt werden. Die wesentliche Aufgabe besteht darin, diesen Fehler durch Anpassen der Variablen zu minimieren. Daraus ergibt sich eine Optimierungsaufgabe für die Zielgrößen a_1 und b_1 . Die zu minimierende Zielfunktion dieses Optimierungsproblems wird durch die Abweichung zwischen Simulationsergebnis und Messergebnis beschrieben. Die optimalen Werte der Zielgrößen werden am globalen Minimum der Zielfunktion erreicht. Mit

2 Ziel der Arbeit

Hilfe dieses Verfahrens ist es möglich eine Parameteridentifikation der beiden unbekanntenen Größen durchzuführen. Somit kann die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit vom Aushärtegrad und von der Temperatur bestimmt werden.

3 Versuch

Um die Optimierungsaufgabe lösen zu können, ist es nötig, die Oberflächentemperatur des Knochenzements experimentell zu bestimmen. Mit Hilfe einer Infrarotkamera wird während der Aushärtung eine Thermographieaufnahme von der Probe erstellt. Diese Aufnahmen können anschließend mit entsprechender Software ausgewertet und die Temperaturdaten exportiert werden.

3.1 Versuchsaufbau

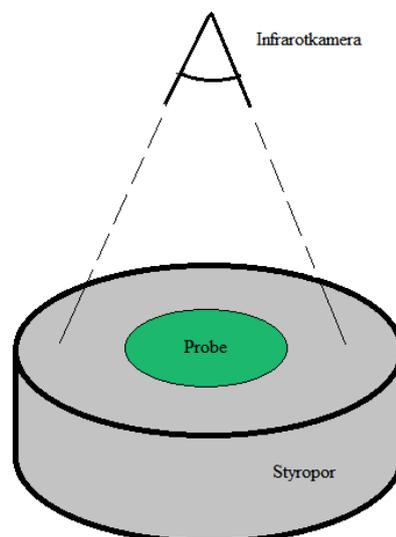


Abbildung 3.1: prinzipieller Versuchsaufbau

Abbildung 3.1 stellt den prinzipiellen Versuchsaufbau dar. Der Knochenzement wird nach dem Anrühren in eine zylinderförmige Form aus Styropor gegossen. Das Styropor dient dabei aufgrund seiner niedrigen Wärmeleitfähigkeit als Wärmeisolation. Ursprünglich sollte so eine annähernd adiabate Randbedingung geschaffen werden. Allerdings stellte sich heraus, dass der Wärmestrom in das Styropor zwar gering ist, aber dennoch nicht vernachlässigt werden kann. Oberhalb der Probe wird die Infrarotkamera montiert. Sie nimmt das Wärmebild des PMMA und des umliegenden Styropors auf.

Nach den ersten Testmessungen zeigte sich allerdings, dass der ursprüngliche Versuchsaufbau Mängel aufweist. Beim Aushärtevorgang des Knochenzements entsteht

3 Versuch

durch Polymerisation aus dem Monomer Methylmethacrylat (MMA) das Polymer Polymethylmethacrylat (PMMA). Das Monomer enthält dabei die dazu nötigen Radikale. Beim Styropor handelt es sich allerdings ebenfalls um ein Polymer (Polystyrol). Bei Kontakt zwischen dem Monomer und dem Styropor beginnt sich dieses aufzulösen. Die Radikale im MMA zerstören die Struktur des Styropors. Abbildung 3.2 zeigt die Auswirkungen dieser chemischen Reaktion.



Abbildung 3.2: chemischen Reaktion zwischen Monomer und Styropor

Durch diese Reaktion wird zum einen die Probengeometrie zerstört und zum anderen die Polymerisation des Knochenzements beeinflusst. Um den Kontakt zwischen Monomer und Styropor zu verhindern, wird eine dünne Folie aus Polyethylen zwischen die beiden Materialien gebracht. Mit Hilfe eines Heißluftföhns wird sie an das Styropor angepasst. Somit kommt es zu keiner Reaktion der beiden Stoffe. Der Nachteil der Schutzfolie ist, dass die Probenränder nicht mehr glatt sind. Abbildung 3.3 zeigt den zerfurchten Probenrand. Diese Falten entstehen beim Anpassen der Folie an das Styropor und übertragen sich direkt auf die Probengeometrie. Da die Abweichungen aber relativ gering im Vergleich zum Radius sind, können sie vernachlässigt werden.



Abbildung 3.3: Probe (ausgehärteter Knochenzement)

Darüber hinaus zeigen die Testmessungen ein weiteres Problem auf. Während der Aushärtung erhitzt sich der Knochenzement auf etwa 100°C . In diesem Bereich ist das Styropor nicht mehr Temperaturbeständig. Es beginnt seine feste Struktur zu verlieren und die Probe sinkt ab. Das Styropor wurde daraufhin durch Styrodur ersetzt.

3 Versuch

Wie Styropor ist auch Styrodur ein Polymer, allerdings ist die Wärmebeständigkeit besser. Das Einsinken der Probe kann so wesentlich reduziert werden. Des Weiteren bietet Styrodur noch weitere Vorteile gegenüber dem herkömmlich Styropor. Es hat eine niedrigeren Wärmeleitfähigkeit als Styropor und eignet sich somit noch besser zur Wärmeisolation. Dazu ist Styrodur dichter und feinkörniger. Dies erleichtert die Verarbeitung und die Realisierung glatter Oberflächen.

Insgesamt wurden fünf verschiedene Messungen durchgeführt. Dabei wurden die Probenabmessungen und die Starttemperaturen verändert. Die Starttemperaturen T_{Start} beziehen sich dabei auf die Oberflächentemperatur der Probe direkt nach dem Einfüllen in die zylindrische Form. Die Umgebungstemperatur war für alle Messungen konstant $T_{\infty} = 22^{\circ}C$. Die aufgeführten Werte sind gleichzeitig Eingabeparamter für die Simulation der Aushärtung. Abbildung 3.4 stellt den rotationssymmetrischen Querschnitt des Versuchsaufbaus dar.

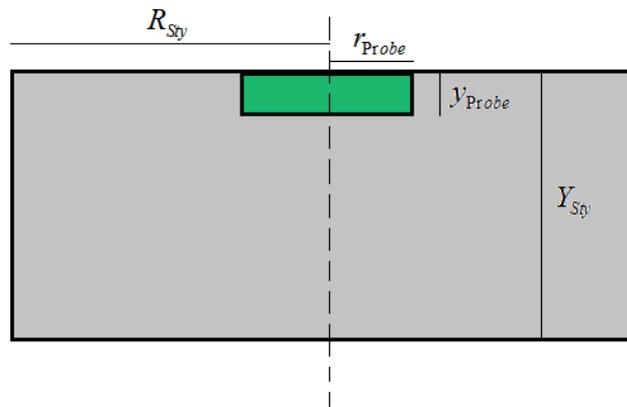


Abbildung 3.4: Probengeometrie

Messung	T_{Start} in $^{\circ}C$	r_{Probe} in [mm]	y_{Probe} in [mm]
1	16.4	28	5
2	20.3	27.5	4
3	21.5	22.5	7
4	21.4	15	15
5	20.4	22.5	5

Tabelle 3.1: Messungen

Geometrie Styrodur	Stoffdaten Styrodur
$R_{Sty} = 120mm$	$\rho_{Sty} = 30 kg/m^3$
$Y_{Sty} = 70mm$	$c_{c,Sty} = 1500 J/(kgK)$
	$k_{Sty} = 0.035 W/(mK)$

Tabelle 3.2: Styrodur Daten

3.2 Theoretische Grundlagen zur Infrarotmessung

Das Prinzip der Infrarot Thermographie basiert auf dem physikalischen Phänomen, dass jeder Körper mit einer Temperatur oberhalb des absoluten Nullpunktes elektromagnetische Strahlung aussendet [3]. Dabei besteht ein direkter Zusammenhang zwischen der ausgesandten Strahlung und der Oberflächentemperatur des Körpers. Die Temperatur eines Objekts kann somit berührungslos durch die Ermittlung der Strahlungsintensität bestimmt werden.

Als Modellkörper für die Theorie dient dazu der schwarze Strahler. Er zeichnet sich durch einen Emissionsgrad ϵ von 1 aus und besitzt die für eine bestimmte Temperatur größt mögliche Strahlungsintensität. Die spektrale Verteilung der Strahlung ist dabei stark von der Temperatur des Materials abhängig. Für einen schwarzen Strahler kann sie folgender Maßen berechnet werden.

$$M_\lambda = \frac{c_1}{\lambda^5 \left(\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) - 1 \right)} \quad (3.1)$$

Folgende Graphik 3.5 stellt die spektrale Verteilung in Abhängigkeit der Wellenlänge λ bei verschiedenen Temperaturen dar. Es ist zu erkennen, dass die Strahlungsintensität mit steigender Temperatur zunimmt. Die Wellenlänge der maximalen Strahlungsintensität kann bei schwarzen Strahlen mit Hilfe des Wienschen Verschiebungsgesetzes (3.2) bestimmt werden.

$$\lambda_{Max} T = 2896 \mu m K \quad (3.2)$$

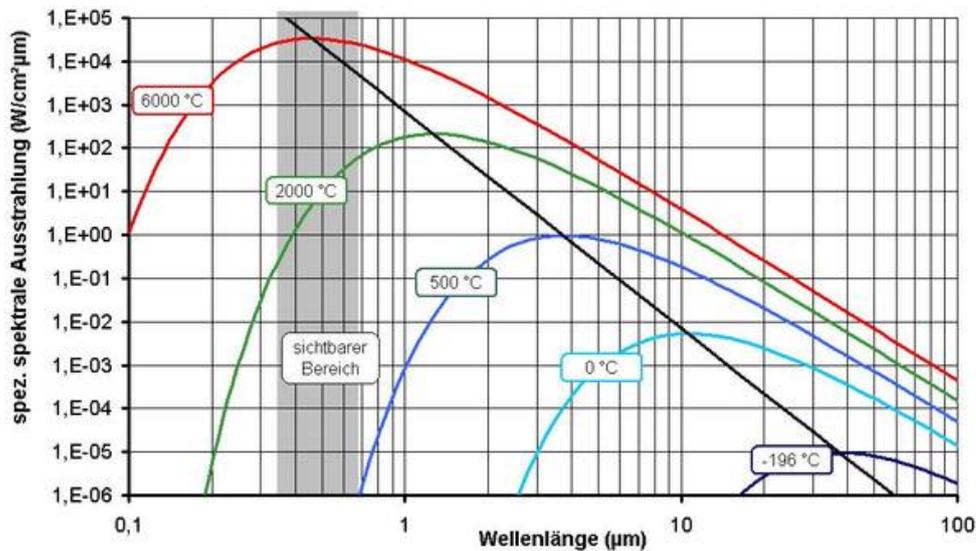


Abbildung 3.5: Spektrale Verteilung [3]

Für die Messung der elektromagnetischen Strahlung eines Objekts ist zu beachten, dass es sich dabei nicht um einen schwarzen Strahler handelt. Der Emissionsgrad ist

3 Versuch

in der Realität nie konstant 1. Er ist von verschiedenen Faktoren abhängig (siehe Gleichung (3.3)) und kann Werte zwischen 0 und 1 annehmen. Bis auf den Winkel zur Flächennormalen ändern sich all diese Parameter während der Aushärtung. Für den Versuch wurde ein konstanter Emissionsgrad von 1 gewählt. Der daraus resultierende Fehler ist allerdings unbekannt.

$$\epsilon = f(\text{Material, Oberflächenrauigkeit, Temperatur, Polymerisationsgrad, Winkel zur Flächennormalen}) \quad (3.3)$$

Darüber hinaus ist der Transmissionsgrad der Luft τ zu berücksichtigen. Er beschreibt die Durchlässigkeit der Luft für elektromagnetische Wellen und variiert zwischen 0 und 1 (0 entspricht keiner Durchlässigkeit). Abbildung 3.7 zeigt die Abhängigkeit des Transmissionsgrades der Luft von der Wellenlänge. Bei einem niedrigen Transmissionsgrad ist es für die Infrarotkamera schwieriger, die entsprechende Wellenlänge zu detektieren. Um diesen Einfluss auf ein Minimum zu begrenzen, ist die Kamera möglichst nahe an der Probe montiert.

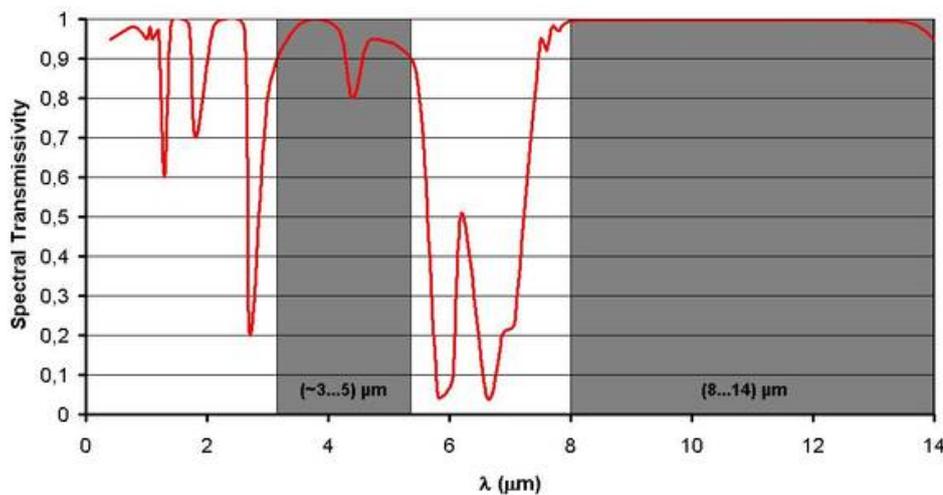


Abbildung 3.6: Transmissionsgrad von Luft [3]

Im für den Versuch relevanten Temperaturbereich von 15°C bis 100°C beträgt die Wellenlänge der ausgesandten Strahlung zwischen 7,5 μm und 10 μm . Sie liegt somit größtenteils innerhalb des sogenannten atmosphärischen Fensters, in dem die Luft durchlässig für elektromagnetische Wellen ist.

In der Infrarotkamera befinden sich Sensoren zum Erfassen der vergleichsweise kurzwelligeren Infrarotstrahlung. Die Energie der einfallenden Photonen ist dabei abhängig von deren Wellenlänge (3.4). Die Sensoren sind dabei so ausgelegt, dass diese Energie des Photons ausreicht um vom Detektor absorbiert zu werden (3.5). Der so entstehende photoelektrische Effekt verursacht einen Photostrom, der einen direkten Rückschluss

3 Versuch

auf die Wellenlänge und damit auf die Oberflächentemperatur des Objekts zulässt. Anschließend wird jeder Temperatur eine Farbe zugewiesen und die Verläufe zwischen den Datenpunkten interpoliert. So entsteht das Thermographiebild.

$$E_{\text{Photon}} = \frac{h_{Pl} c}{\lambda} \quad (3.4)$$

$$E_{\text{Photon}} \geq E_{\text{Bindung}} \quad (3.5)$$

3.3 Ergebnisse

Für die Auswertung der Messergebnisse wurde der Temperaturverlauf über den Probenradius betrachtet. Da es sich um einen rotationssymmetrischen Körper handelt, liegt es nahe, auch von einer rotationssymmetrischen Temperaturverteilung auszugehen. Diese Annahme wird auch durch die Messungen belegt. Folgende Abbildung 3.7 zeigt eine Momentaufnahme der Infrarotaufnahme des Knochenzements nach 1020 Sekunden. Der Knochenzement befindet sich zu diesem Zeitpunkt bereits in der Abkühlphase. Die rotationssymmetrische Temperaturverteilung ist gut zu erkennen. Die verwendete Infrarotkamera ist von der Firma InfraTec mit der Bezeichnung "VarioCam hr".

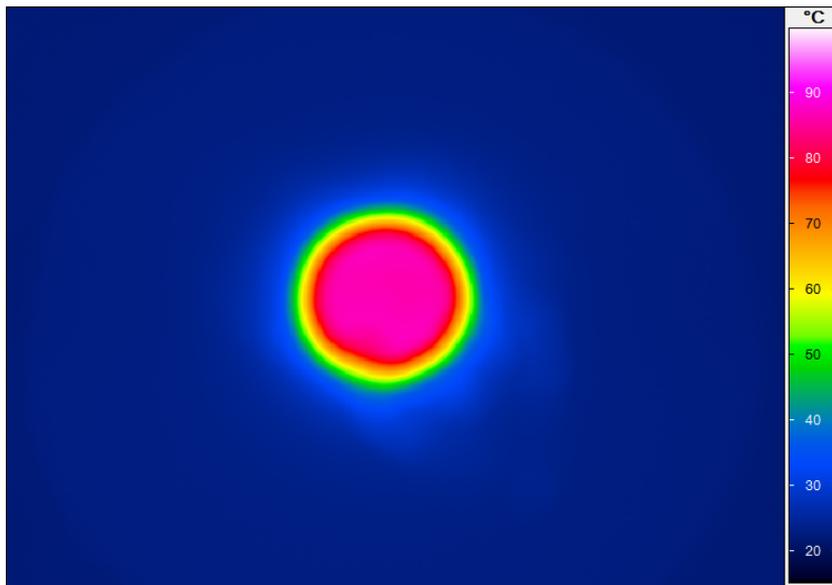


Abbildung 3.7: Momentaufnahme der Oberflächentemperatur von Messung 3 nach 1020 sek

Es ist weiterhin zu sehen, dass das Styrodur einen wesentlichen Einfluss auf das Temperaturfeld hat. Im Falle einer adiabaten Randbedingung würde der Knochenzement nach außen nicht abkühlen, da ein Wärmestrom über den Rand per Definition nicht möglich ist. Die Temperaturverteilung müsste somit für jeden Zeitschritt homogen sein, da eine Abkühlung nur über freie Konvektion möglich wäre. Die Graphik 3.7 zeigt, dass ein Wärmestrom in das Styrodur vorhanden ist und es wichtig ist, diesen in der Simulation ebenfalls zu berücksichtigen.

3 Versuch

In Abbildung 3.8 wird der zeitliche Verlauf der Temperatur über den Radius dargestellt. Der Export der Temperaturdaten erfolgte mit Hilfe der Software Irbis 3 Professional. Zur Bearbeitung und Darstellung wurde die Software Matlab 2009b verwendet.

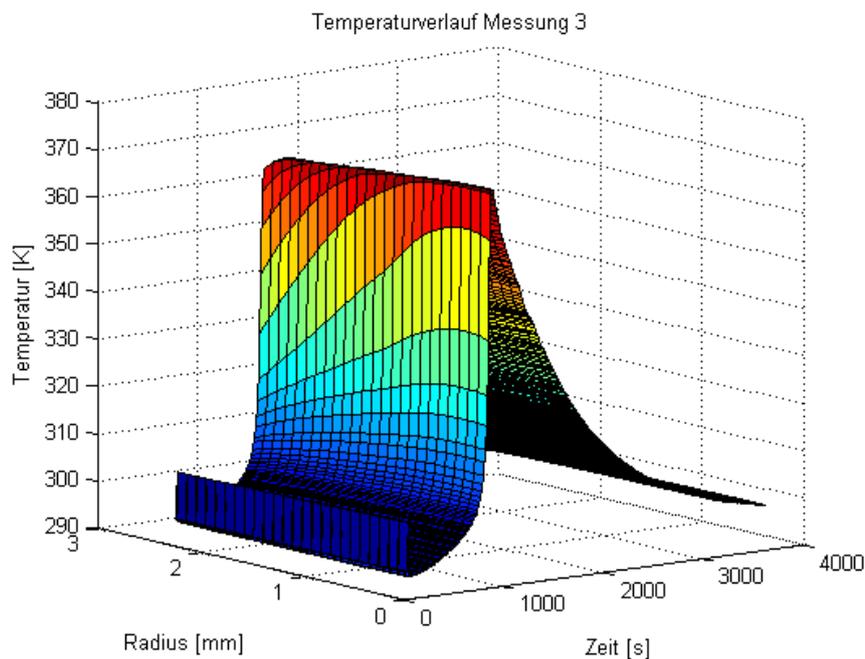


Abbildung 3.8: Zeitlicher Temperaturverlauf über den Radius (Messung 3)

Um eine zeitliche Korrelation mit der Simulation zu ermöglichen, ist es nötig, die Infrarotaufnahme gleich nach dem Anrühren des Knochenzements zu starten. Dieser befindet sich zu diesem Zeitpunkt aber noch nicht in der Styrodurform. Der anfängliche Temperaturanstieg zeigt an, wann der Knochenzement in die Form gegossen wurde. Nachdem die Kamera dabei einen Teil der Hand filmt, steigt die angezeigte Temperatur stellenweise kurzzeitig auf etwa 37°C . Die Polymerisation setzt nach einer gewissen Zeit relativ abrupt ein, was einen starken Anstieg der Temperatur zur Folge hat. Obwohl der zeitliche Verlauf über den Radius nicht konstant ist, wird dennoch über einen großen Teil der Fläche die gleiche Spitzentemperatur von knapp 100°C erreicht. Nur am äußersten Rand fällt diese geringer aus. Allerdings tritt die Höchsttemperatur mit zunehmendem Radius später auf. Anschließend folgt die Abkühlphase, in der der Knochenzement Wärme über freie Konvektion an die Luft und Wärmeleitung in das Styrodur abgibt. Aufgrund der geringen Wärmeleitfähigkeit des Styrodurs und dem kleinen Konvektionskoeffizienten der Luft, erstreckt sich diese Phase über einen vergleichsweise langen Zeitraum und die Starttemperatur wird bis zum Ende der Messung nicht mehr erreicht.

In Abbildung 3.9 sind alle Messungen aufgetragen. Dabei wurde exemplarisch der Punkt X ($X = r_{Probe}/2$) ausgewählt.

Es ist zu sehen, dass die einzelnen Verläufe stark von der Anfangstemperatur und der Probengeometrie abhängen. Messung 1 und Messung 2 haben eine ähnliche Proben-

3 Versuch

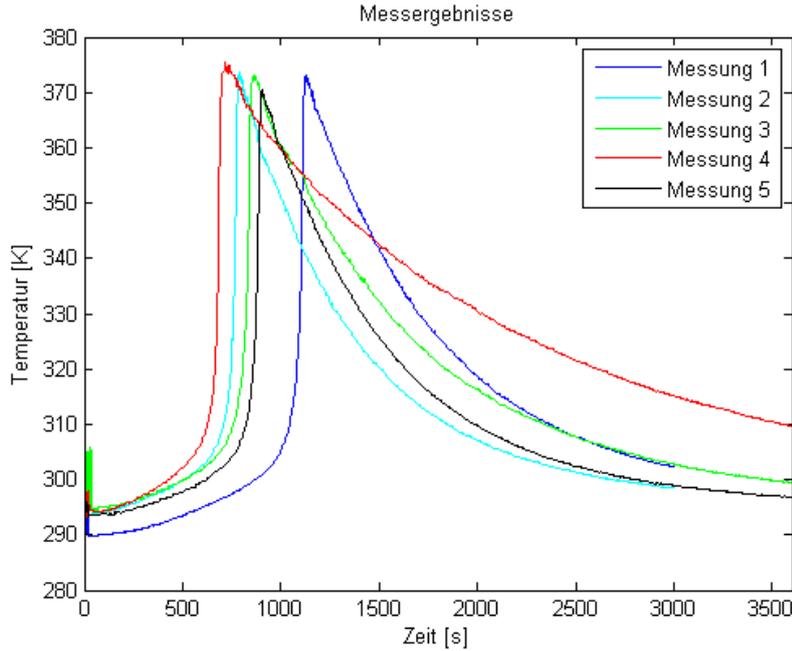


Abbildung 3.9: Alle Messungen am Punkt $X = r_{Probe}/2$

größe, aber einen Unterschied in der Starttemperatur von 3.9°C . Obwohl sich die beiden Verläufe qualitativ ähneln, führt der Temperaturunterschied zu einem zeitlichen Versatz von 500 Sekunden. Messung 1 weist die niedrigste Anfangstemperatur auf, demzufolge startet auch die Polymerisation und damit der Temperaturanstieg am spätesten. Messung 3 und 4 haben eine nahezu identische Starttemperatur, unterscheiden sich aber im Radius und in der Höhe. Es kommt ebenfalls zu einer zeitlichen Verschiebung und zu einer Veränderung der Spitzentemperatur. Auffallend ist auch die Abkühlphase von Messung 4. Diese dauert wesentlich länger als bei den anderen Messungen. Daraus ergibt sich, dass die Summe der austretenden Wärmeströme am kleinsten ist. Da Probe 4 den kleinsten Radius aufweist, ist auch die Konvektion am geringsten. Die freie Konvektion ist direkt proportional zur Oberfläche. Die größere Mantelfläche und der damit größere Wärmestrom ins Styrodur können die geringe Konvektion nicht ausgleichen. Demzufolge hat die Konvektion den größten Anteil am Verlauf der Abkühlphase. Die Versuche zeigen, dass der Temperaturverlauf sehr sensibel auf die Anfangs- und Randbedingungen reagiert.

4 Materialmodellierung

Basierend auf vorangegangene Experimente, konnte bereits ein mathematisches Modell für die meisten Stoffeigenschaften des Knochenzements gefunden werden. Auch die Reaktionskinetik ist modelliert. Diese Gleichungen bilden die Grundlage der Simulation. So können alle relevanten Parameter zu jedem Zeitpunkt bestimmt werden.

Im Folgenden wird näher auf einzelne Stoff- und Reaktionsgrößen eingegangen und gegebenenfalls die für die Simulation nötige Diskretisierung erläutert. Darüber hinaus erfolgt eine graphische Darstellung der Parameter im Verlauf der Polymerisation unter isothermen Bedingungen. Dies dient sowohl zur Veranschaulichung als auch gleichzeitig zur Verifizierung der Implementierung des mathematischen Modells.

4.1 Reaktionskinetik

Die Reaktionskinetik beschreibt den Verlauf der Reaktion. Die bei dem Aushärtprozess stattfindende Polymerisation ist ausschlaggebend für die Veränderung sämtlicher Materialeigenschaften des Knochenzements. Sie wird mit Hilfe des Polymerisationsgrades beziehungsweise Aushärtgrades q beschrieben. Zu Beginn hat der Aushärtgrad den Wert 0. Nach einer vollständigen Polymerisation würde ein Polymerisationsgrad von 1 vorliegen. Der Aushärtgrad wird durch die Differentialgleichung (4.1) beschrieben.

$$\frac{dq}{dt} = (K_1 + K_2 q^\alpha)(1 - q)^\beta f_D(q) \quad (4.1)$$

mit

$$K_1 = K_{10} \exp\left(\frac{-E_1}{R_G T}\right) \quad (4.2)$$

$$K_2 = K_{20} \exp\left(\frac{-E_2}{R_G T}\right) \quad (4.3)$$

$$f_D(q) = \frac{2}{1 + \exp\left(\frac{q - q_{\text{end}}}{b}\right)} - 1 \quad (4.4)$$

$$q_{\text{end}} = \frac{f(T) - \xi}{\kappa} \quad (4.5)$$

$$f(T) = \frac{T + \Delta T - T_{g,0}}{T_{g,1} - T_{g,0}} \quad (4.6)$$

Die Gleichung (4.2) ergibt sich aus einem Ansatz zur Beschreibung autokatalytischer Reaktionen nach Kamal und Sourour. Damit auch eine unvollständige Aushärtung beschrieben werden kann, wird ein Diffusionsfaktor $f_D(q)$ eingeführt. Dieser ist nach (4.4)

4 Materialmodellierung

abhängig von einem maximalen Polymerisationsgrad q_{end} , der bei einer bestimmten isothermen Aushärtetemperatur erreicht werden kann. Diese Größe ist unter anderem abhängig von den Glasübergangstemperaturen im flüssigen Zustand $T_{g,0}$ ($q = 0$) und im vollständig ausgehärteten Zustand $T_{g,1}$ ($q = 1$), siehe Gleichung (4.6). ΔT beschreibt die Differenz zwischen der isothermen Härtetemperatur T zur dabei erreichten Glasübergangstemperatur ($q = q_{end}$). Sie beträgt konstant 20°C . Die Gleichung (4.5) zur Beschreibung des maximal erreichbaren Aushärtegrades gilt allerdings nur in einem Temperaturbereich von 15°C bis 80°C . Da im Versuch Maximaltemperaturen von 95°C aufgetreten sind, ist mit einem Fehler in diesem Bereich zu rechnen.

Für die Implementierung in die Simulation muss diese Differentialgleichung zeitlich diskretisiert werden. Dazu wird das explizite Eulerverfahren verwendet. Dieses ergibt sich aus dem Polygonzugverfahren, bei dem der Verlauf in den einzelnen Zeitschritten Δt als Gerade angenähert wird. Damit lässt sich der Aushärtegrad zu einem Zeitpunkt p durch die Gleichung (4.7) bestimmen.

$$q_p \approx q_{p-1} + \Delta t \frac{dq}{dt} \quad (4.7)$$

Dabei stellt q_{p-1} den Startwert und dq/dt die Steigung der Geraden dar. Aufgrund der gegebenen Differentialgleichung (4.1) ist die Steigung zum Zeitpunkt $p - 1$ bekannt.

$$\left. \frac{dq}{dt} \right|_{p-1} = f(t_{p-1}, q_{p-1}) \quad (4.8)$$

$$\text{mit } f(t_{p-1}, q_{p-1}) = (K_1(T_{p-1}) + K_2(T_{p-1}) q_{p-1}^\alpha) (1 - q_{p-1})^\beta f_D(q_{p-1}, T_{p-1}) \quad (4.9)$$

Für hinreichend kleine Zeitschritte gilt damit die Beziehung

$$q_p \approx q_{p-1} + \Delta t f(t_{p-1}, q_{p-1}) \quad (4.10)$$

Da bei expliziten Verfahren der neue Zeitschritt p allein aus den Daten von einem vorherigem Zeitschritt $p - 1$ berechnet wird, kann es bei zu großen Schrittweiten Δt zur Instabilität kommen. Allerdings scheint diese Differentialgleichung gut konditioniert zu sein, da auch relativ große Schrittweiten bis über $\Delta t = 2\text{sek}$ stabil berechnet werden. In der Simulation werden aufgrund der schnell ablaufenden Polymerisation und dem daraus folgendem steilen Temperaturanstieg möglichst kleine Schrittweiten verwendet, um den Verlauf exakt darstellen zu können. Somit hat die Begrenzung der Zeitschritte nach oben durch das explizite Verfahren keinen Einfluss. Die Differentialgleichung muss für jeden Knotenpunkt und zu jedem Zeitschritt neu berechnet werden. Aus Gründen der Laufzeitoptimierung ist das Eulerverfahren demnach einem aufwendigerem Verfahren vorzuziehen.

Abbildung 4.1 stellt den Verlauf des Polymerisationsgrades bei unterschiedlichen Aushärtetemperaturen dar. Dabei ist die Aushärtetemperatur konstant gehalten. Die Polymerisation ist stark von der gewählten Temperatur abhängig. Höhere Temperaturen führen zu einem vorzeitigen Beginn des Aushärtetvorgangs und zu einem höheren

4 Materialmodellierung

maximalen Aushärtegrad. Bei 80°C, der höchsten zulässigen Temperatur, setzt die Aushärtung nahezu sprunghaft ein und es wird ein Polymerisationsgrad von 0.93 erreicht. Bei der Simulation des Polymerisationsprozesses wird die Temperatur allerdings nicht konstant gehalten, sondern steigt während der Aushärtung aufgrund der chemischen Reaktion an. Daher können auch höhere Aushärtegrade als die hier aufgezeigten für die jeweiligen Starttemperaturen erreicht werden.

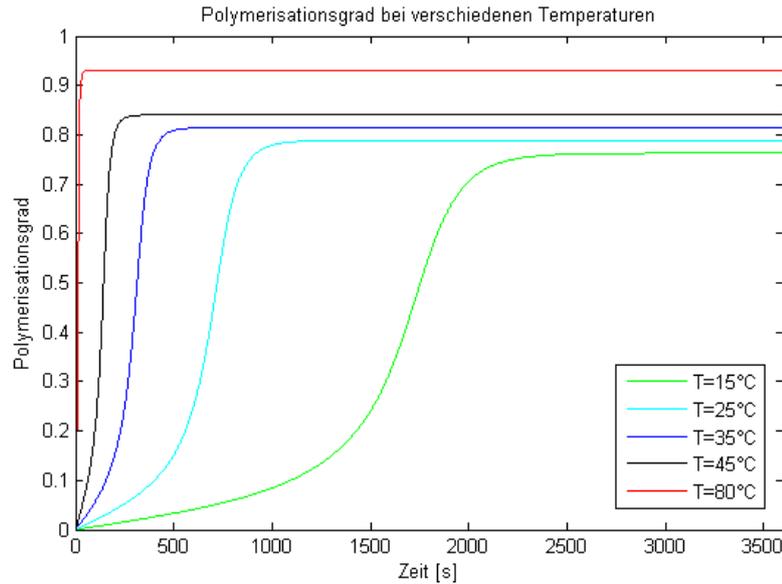


Abbildung 4.1: Polymerisationsgrad bei verschiedenen isothermen Temperaturen

4.2 Reaktionsenthalpie

Die massenspezifische Reaktionsenthalpie h ist ausschlaggebend für die freigesetzte Wärme während der Polymerisation. Diese, durch die chemische Reaktion hervorgerufene Wärme, wird als Quellterm bezeichnet. Der Quellterm \dot{Q}_{Quelle} beschreibt die Energie, die während der Aushärtung von dem Knochenzement abgegeben wird.

$$\dot{Q}_{Quelle} = \frac{dh}{dt} dm \quad \text{mit } dm = \rho dV \quad (4.11)$$

Mit Hilfe des Quellterms kann die, durch freigesetzte Energie hervorgerufene Temperaturerhöhung dT_{Quelle} , berechnet werden. Dabei wird die Änderung der inneren Energie U mit der abgegebenen Energie gleichgesetzt.

$$\frac{dU}{dt} = \dot{Q}_{Quelle} \quad (4.12)$$

$$\rho c_v \frac{dT}{dt} dV = \frac{dh}{dt} \rho dV \quad (4.13)$$

$$dT_{Quelle} = \frac{dh}{c_v} \quad (4.14)$$

Die Enthalpie wird von der Temperatur und vom Aushärtegrad des Knochenzements beeinflusst. Für die Simulation wurde sie linear abhängig vom Polymerisationsgrad und quadratisch abhängig von der Temperatur modelliert. Daraus ergibt sich die Gleichung (4.15).

$$h(T, q) = h_{flüssig}(T) (1 - q) + h_{fest}(T) q \quad (4.15)$$

$$h_{flüssig}(T) = h_{flüssig,0} + a_{flüssig} (T - T_0) + \frac{1}{2} b_{flüssig} (T - T_0)^2 \quad (4.16)$$

$$h_{fest}(T) = h_{fest,0} + a_{fest} (T - T_0) + \frac{1}{2} b_{fest} (T - T_0)^2 \quad (4.17)$$

Dabei ist $h_{flüssig}$ die Reaktionsenthalpie des unausgehärteten und h_{fest} die Enthalpie des vollständig ausgehärteten Materials. Die Temperatur ist auf eine Referenztemperatur von $T_0 = (37 + 273.15)K$ bezogen. Die Enthalpiedifferenz Δh zum Zeitpunkt p ergibt sich dann aus

$$\Delta h_p = h(T_{p-1}, q_p) - h(T_{p-1}, q_{p-1}) \quad \text{mit } |h_{fest,0} - h_{flüssig,0}| = 100 \frac{J}{g} \quad (4.18)$$

Abbildung 4.2 stellt den zeitlichen Verlauf von $(\Delta h_p / \Delta t)$ bei einer konstanten Temperatur dar. Da die Reaktionsenthalpie direkt mit dem Aushärtegrad verknüpft ist, zeigt sich ebenfalls eine starke Abhängigkeit von der Temperatur. Je höher die Temperatur ist, desto früher beginnt der Anstieg der Enthalpiedifferenz pro Zeitschritt Δt und desto größere Maxima werden erreicht. Allerdings ist auffallend, dass eine steigende Temperatur auch zu einer Verschmälerung des Verlaufs führt. Die gesamte Enthalpiedifferenz des Aushärtevorgangs Δh_{Ges} (von $q = 0$ bis $q = q_{end}$) wird dennoch, wie in Abbildung 4.3 gezeigt, mit höheren Temperaturen geringfügig größer.

$$\Delta h_{Ges} = \frac{\Delta h_p}{\Delta t} \cdot (t(q = q_{end}) - t(q = 0)) \quad (4.19)$$

4 Materialmodellierung

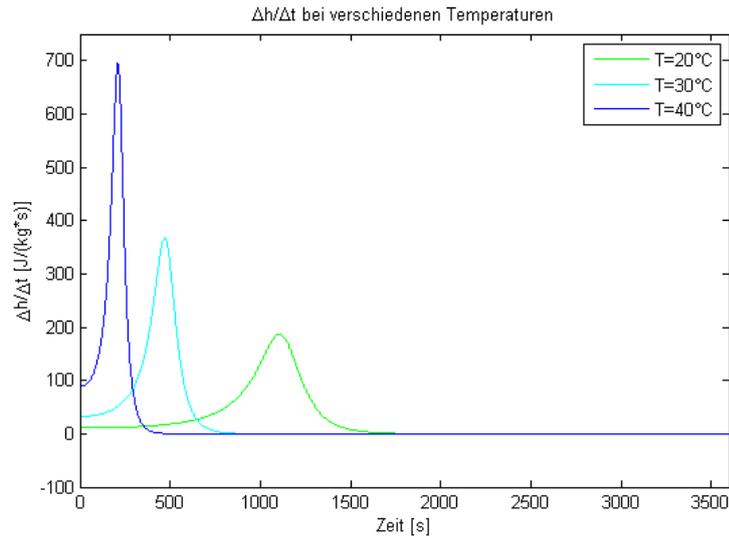


Abbildung 4.2: $(\Delta h_p / \Delta t)$ über die Zeit bei verschiedenen Temperaturen

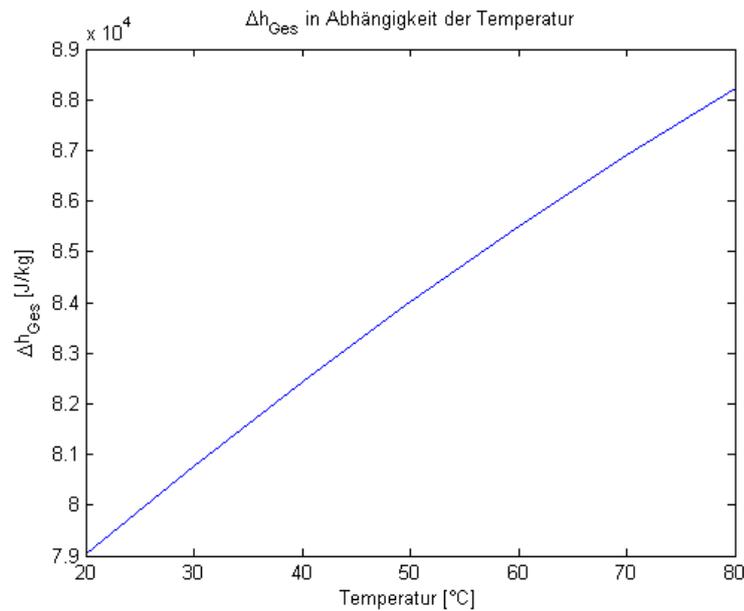


Abbildung 4.3: Δh_{Ges} in Abhängigkeit der Temperatur

Der Zusammenhang zwischen der Enthalpiedifferenz pro Zeitschritt und dem Polymerisationsgrad wird in der Graphik 4.4 verdeutlicht. Ein Anstieg des Aushärtegrades geht mit einem Anstieg der Enthalpiedifferenz überein. Das Maximum von $(\Delta h_p / \Delta t)$ fällt dabei auf die Stelle der größten Steigung des Polymerisationsgrades. Nachdem der Aushärtegrad seinen Maximalwert erreicht hat, liegt keine Enthalpiedifferenz mehr vor.

4 Materialmodellierung

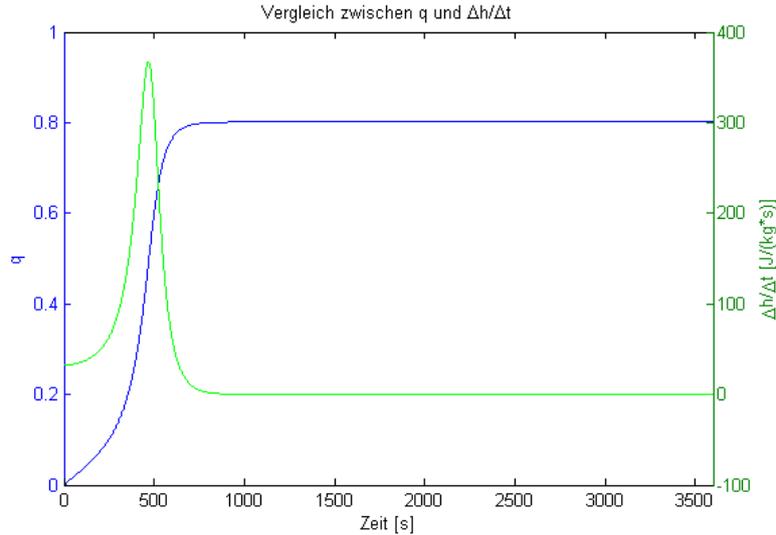


Abbildung 4.4: Vergleich des Aushärtegrades mit der Enthalpiedifferenz ($T = 30^\circ\text{C}$)

Mit der Beziehung (4.18) kann die Gleichung für die Temperaturerhöhung (4.14), unter Voraussetzung eines bekannten Polymerisationsgrades, zeitlich diskretisiert werden.

$$\Delta T_{\text{Quelle},p} = \frac{\Delta h_p}{c_v} \quad (4.20)$$

daraus folgt

$$T_p = \frac{h(T_{p-1}, q_p) - h(T_{p-1}, q_{p-1})}{c_v} + T_{p-1} \quad (4.21)$$

Gleichung (4.21) beschreibt die Temperatur zu einem Zeitpunkt p in Abhängigkeit der Temperatur zum vergangenen Zeitpunkt $p-1$ und dem Aushärtegrad zu beiden Zeiten. In der Simulation des Aushärtevorgangs muss somit erst der Polymerisationsgrad für beide Zeitschritte berechnet werden, bevor die neue Temperatur bestimmt werden kann. Im folgendem Kapitel wird gezeigt, dass auch die spezifische Wärmekapazität c_v keine Konstante ist, und in die Diskretisierung mit einbezogen werden muss. Zu beachten ist auch, dass bis jetzt keine abgehenden Wärmeströme betrachtet wurden. Gleichung 4.21 beschreibt nur den Temperaturanstieg aufgrund der chemischen Reaktion. Eine Abkühlung während und nach diesem Prozess ist dabei nicht berücksichtigt.

4.3 Spezifische Wärmekapazität

Als spezifische Wärmekapazität wird die auf eine Masse bezogene Wärmekapazität bezeichnet. Sie gibt an, wieviel Wärmeenergie zugeführt werden muss, damit 1kg des Materials um 1K erhitzt wird. Die Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p ist definiert als

4 Materialmodellierung

$$c_p = \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_p \quad (4.22)$$

Für eine Enthalpie nach (4.15) ergibt sich daraus

$$c_p(T, q) = \frac{\partial h_{flüssig}}{\partial T} (1 - q) + \frac{\partial h_{fest}}{\partial T} q \quad (4.23)$$

$$c_p(T, p) = [a_{flüssig} + b_{flüssig} (T - T_0)] (1 - q) + [a_{fest} + b_{fest} (T - T_0)] q \quad (4.24)$$

Wenn Aushärtegrad und Temperatur bekannt sind, kann die spezifische Wärmekapazität somit für jeden Zeitpunkt berechnet werden. Für Feststoffe sind die spezifischen Wärmekapazitäten bei konstantem Druck und bei konstantem Volumen näherungsweise identisch. Somit gilt

$$c_v \approx c_p \quad (4.25)$$

Im Zusammenhang mit Gleichung (4.21) ergibt sich daraus für die Temperatur zu einem Zeitpunkt p

$$T_p \approx \frac{h(T_{p-1}, q_p) - h(T_{p-1}, q_{p-1})}{c_v(T_{p-1}, q_{p-1})} + T_{p-1} \quad (4.26)$$

Folgende Abbildung 4.5 zeigt den Verlauf der spezifischen Wärmekapazität. Dabei ist die Temperatur konstant und nur der Polymerisationsgrad ändert sich.

Es ist zu sehen, dass die spezifische Wärmekapazität während der Aushärtung abnimmt. Je höher die Temperatur ist, desto schneller erfolgt die Abnahme. Da bei hohen Temperaturen die Polymerisationsgeschwindigkeit größer ist, ist auch die Steigung der spezifischen Wärmeleitfähigkeit betragsmäßig höher. Die Graphik 4.6 verdeutlicht den Zusammenhang zwischen Aushärtegrad und spezifischer Wärmekapazität. Mit Beginn der Polymerisation sinkt die spezifische Wärmekapazität. Nachdem der Aushärtevorgang beendet ist, bleibt sie konstant.

4 Materialmodellierung

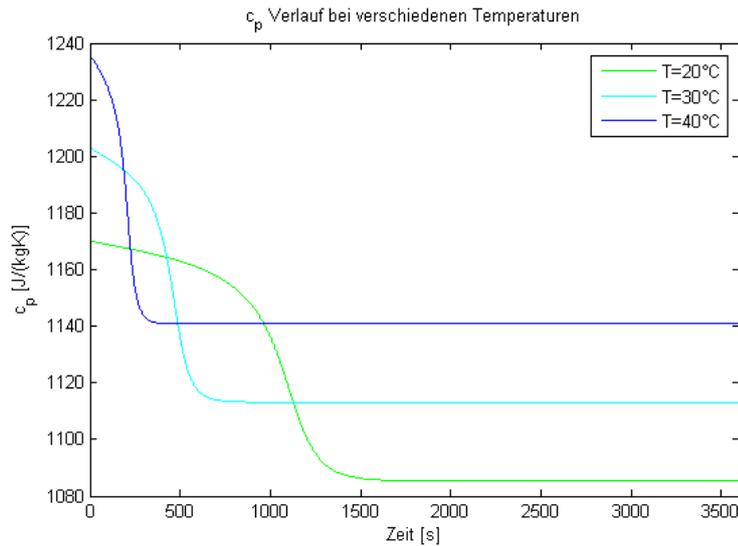


Abbildung 4.5: spezifische Wärmekapazität bei verschiedenen Temperaturen

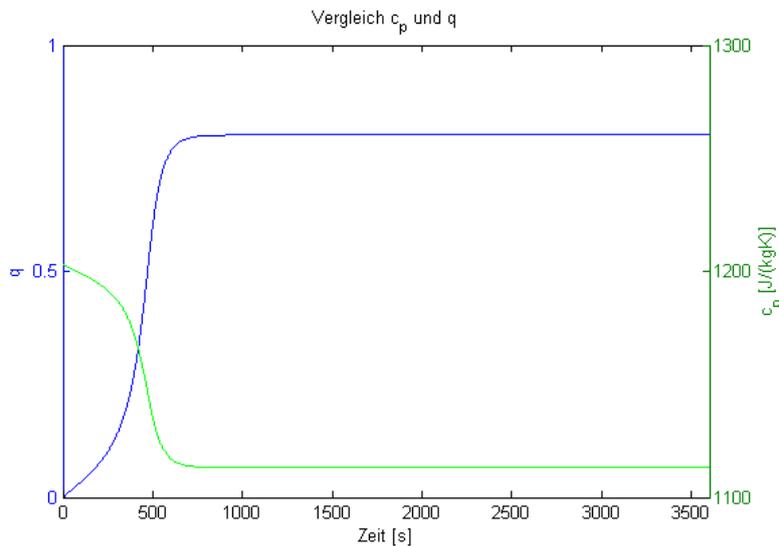


Abbildung 4.6: Vergleich des Aushärtegrades mit der spezifischen Wärmekapazität ($T = 30^{\circ}C$)

4.4 Dichte

Die Dichte des Knochenzements wird für die Simulation des Aushärtevorgangs benötigt, da durch sie die innere Energie bestimmt werden kann. Aufgrund der indirekten Proportionalität zum Volumen, kann die Dichteänderung des Knochenzements während der Polymerisation durch eine volumetrische Dehnung φ beschrieben werden. Aus Gleichung (4.27) folgt somit die Beziehung (4.28). Bei einer Temperatur von $37^{\circ}C$ beträgt die Dichte im flüssigen Zustand $1469.7kg/m^3$ und wird als ρ_0 bezeichnet.

4 Materialmodellierung

$$\varphi = \frac{\Delta V}{V} = \frac{V - V_0}{V} = 1 - \frac{\rho}{\rho_0} \quad (4.27)$$

$$\rho = \rho_0 (1 - \varphi) \quad (4.28)$$

Aufgrund des chemischen Prozesses und des Temperaturanstieges kommt es zu einer Änderung des Volumens. Die Aushärtung hat eine Schrumpfung χ des Materials zur Folge. In Gleichung (4.29) wird dabei eine lineare Abhängigkeit vom Aushärtegrad angenommen. Der Temperatureausdehnungskoeffizient ε_{th} ändert sich ebenfalls linear mit fortschreitender Polymerisation.

$$\varphi(q, T) = (\varepsilon_{th} + \Delta\varepsilon_{th} q) (T - T_0) + \chi q \quad (4.29)$$

Hierin ist ε_{th} der Temperatureausdehnungskoeffizient im flüssigen Zustand und $\Delta\varepsilon_{th}$ die Änderung des Temperatureausdehnungskoeffizienten vom flüssigen in den vollständig ausgehärteten Zustand. Die Werte dieser Größen sind im Anhang aufgelistet. Die Temperatur T bezieht sich auf eine Referenztemperatur T_0 von 37°C .

Wenn Temperatur und Aushärtegrad bekannt sind, kann somit die Dichte zum Zeitpunkt p bestimmt werden.

$$\rho_p = \rho_0 [1 - (\varepsilon_{th} + \Delta\varepsilon_{th} q_p) (T_p - T_0) + \chi q_p] \quad (4.30)$$

Graphik 4.7 zeigt den Dichteverlauf bei einer isothermen Aushärtung. Je höher die Aushärtetemperatur ist, desto geringer ist die Dichte im flüssigen Zustand und desto kleiner ist das erreichte Maximum nach der Polymerisation. Allerdings wird dieses bereits nach einer kürzeren Zeit erreicht.

Aus Abbildung 4.8 ist zu erkennen, dass der Anstieg der Dichte im direkten Zusammenhang mit dem Anstieg des Aushärtegrades steht. Nachdem der Aushärtegrad seinen Endwert erreicht, nimmt auch die Dichte des Knochenzements einen festen Wert an.

4 Materialmodellierung

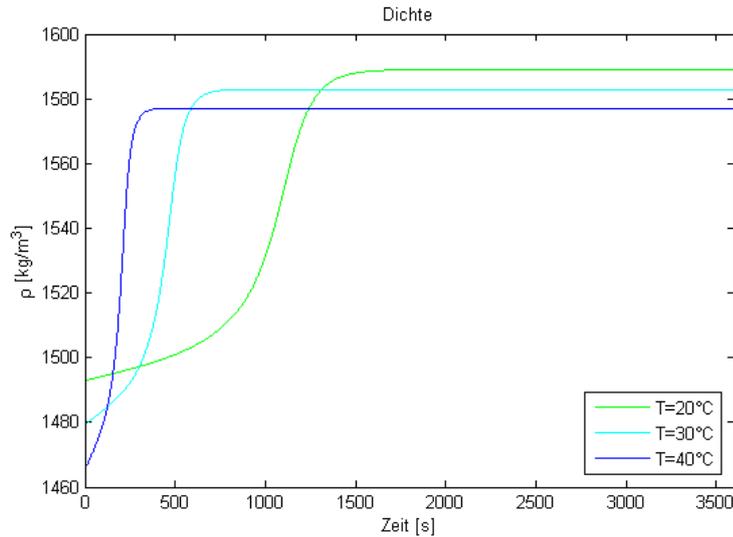


Abbildung 4.7: Dichte bei verschiedenen Temperaturen

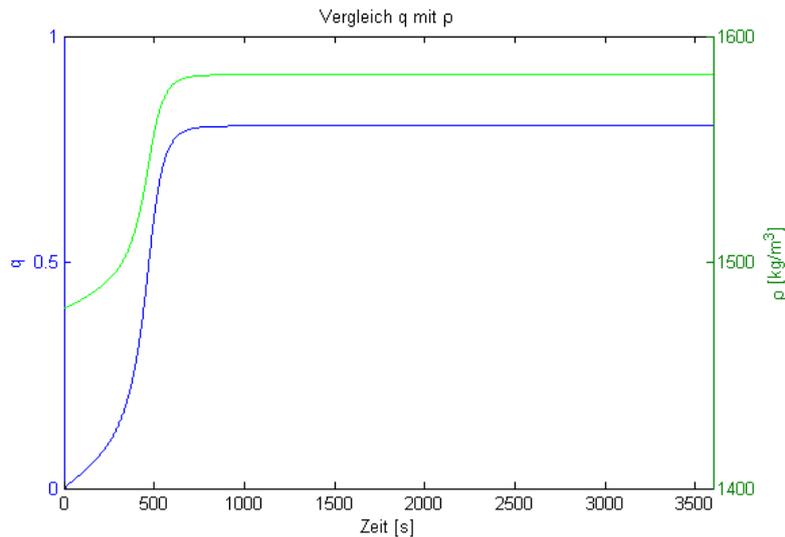


Abbildung 4.8: Vergleich des Aushärtgrades mit der Dichte ($T = 30^\circ\text{C}$)

4.5 Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit k eines Körpers charakterisiert dessen Fähigkeit, thermische Energie in Form von Wärme zu transportieren. Die Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit von Knochenzement ist das eigentliche Ziel dieser Arbeit. Damit die Simulation allerdings einen Temperaturverlauf berechnen kann, muss für sie ein Wert vorgegeben werden. Wie bereits in Kapitel 2 beschrieben, berechnet sich dieser Wert aus

$$k = [a_1 + b_1 (T - T_0)] (1 - q) + [a_2 + b_2 (T - T_0)] q \quad (4.31)$$

4 Materialmodellierung

Zu einem Zeitpunkt p folgt daraus die aktuelle Wärmeleitfähigkeit k_p mit

$$k_p = [a_1 + b_1 (T_p - T_0)] (1 - q_p) + [a_2 + b_2 (T_p - T_0)] q_p \quad (4.32)$$

Als Startwert für die Simulation werden die Parameter a_1 und b_1 wie folgt gewählt.

$$a_1 = a_2 \quad (4.33)$$

$$b_1 = b_2 \quad (4.34)$$

Somit ergibt sich

$$k = a_2 + b_2 (T - T_0) \quad (4.35)$$

Nach Gleichung (4.35) ist die Wärmeleitfähigkeit nur noch von der Temperatur abhängig. Der Einfluss der Polymerisation ist unbekannt. Für die Optimierungsaufgabe stellt der so errechnete Temperaturverlauf den Startwert für die Fehlerminimierung dar. Die Parameter a_1 und b_1 müssen während der Optimierung unabhängig voneinander verändert werden, mit dem Ziel den berechneten Verlauf an den gemessenen Temperaturverlauf anzupassen.

5 Simulation des Aushärtevorgangs

In diesem Kapitel wird die numerische Simulation des Aushärtevorgangs erläutert. Dabei wird die Methode der finiten Volumen und die Randbedingungen des Modells beschrieben. Es werden die Besonderheiten aufgrund veränderlicher Stoffparameter behandelt und unterschiedliche Berechnungsweisen dargestellt. Darüber hinaus enthält das Kapitel Verfahren zur Laufzeitoptimierung.

5.1 Finite Volumen Methode

Für die Berechnung von instationärer Wärmeübertragung gibt es unterschiedliche numerische Methoden. Bei veränderlichen Stoffgrößen und einem vorhandenen Quellterm eignet sich am besten die finite Volumen Methode [5]. Mit diesem Verfahren können auch Übergänge von unterschiedlichen Materialien, wie vom Knochenzement zum Styrodur, berücksichtigt werden. Bei der finiten Volumen Methode wird das zu berechnende Gebiet V in endlich kleine Teilvolumen dV aufgeteilt (siehe Abb. 5.1). Innerhalb dieses Kontrollvolumens sind alle Größen konstant. Das betrifft sowohl die Stoffparameter, als auch die Temperatur.

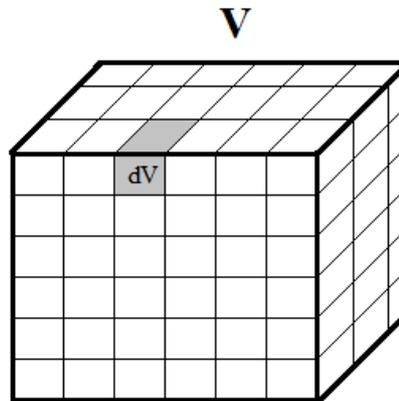


Abbildung 5.1: Veranschaulichung der Zerlegung eines Volumens in endlich kleine Teilvolumen

$$\text{in } dV \text{ gilt } q, \Delta h, c_v, \rho, k, T = \text{konstant} \quad (5.1)$$

Für hinreichend kleine finite Volumen können so die Temperaturverteilung und die veränderlichen Stoffparameter im Material numerisch berechnet werden. Der Fehler

ist dabei umso geringer, je kleiner die Teilvolumen gewählt werden. Für jedes finite Volumen wird der Energieerhaltungssatz (5.2) angewendet. Dies geht allerdings nur, weil innerhalb dieses Volumens alle Größen als konstant betrachtet werden.

$$\frac{dU}{dt} = \sum \dot{Q} + \sum \dot{W} + \sum \dot{m} h_{tot} \quad (5.2)$$

Nachdem kein Massenfluss \dot{m} vorliegt und keine Arbeit W in das Material eingebracht wird, vereinfacht sich die Gleichung zu

$$\frac{dU}{dt} = \sum \dot{Q} \quad (5.3)$$

Die zeitliche Änderung der inneren Energie ist dabei die Summe aller Wärmeströme in oder aus dem Kontrollvolumen. Diese können unterschiedliche Ursachen haben. Ein Wärmestrom kann aufgrund von Konduktion, Konvektion oder Strahlung auftreten. Darüber hinaus kommt es zu einer Energiefreisetzung innerhalb einer Volumenzelle aufgrund der Polymirisation.

$$\sum \dot{Q} = \sum \dot{Q}_{Konduktion} + \sum \dot{Q}_{Konvektion} + \sum \dot{Q}_{Strahlung} + \sum \dot{Q}_{Quelle} \quad (5.4)$$

In der Simulation für den Aushärtevorgang wird der Strahlungseinfluss $\sum \dot{Q}_{Strahlung}$ nicht berücksichtigt.

Die einzelnen Wärmeströme lassen sich folgendermaßen formulieren.

$$\dot{Q}_{Konduktion} = k A \frac{\partial T}{\partial x} \quad (5.5)$$

$$\dot{Q}_{Konvektion} = \dot{h} A (T_{\infty} - T) \quad (5.6)$$

$$\dot{Q}_{Quelle} = \frac{dh}{dt} \rho dV \quad \text{siehe Gl. (4.13)} \quad (5.7)$$

Um die Temperaturverteilung während des Aushärteprozesses berechnen zu können, ist im allgemeinen ein dreidimensionales Modell erforderlich. In diesem Fall treten Wärmeströme in drei Richtungen auf. Da der Versuch so ausgelegt ist, dass die Probengeometrie einen Zylinder darstellt, bietet es sich an, in Zylinderkoordinaten zu rechnen. Wie in der Graphik 5.2 dargestellt, ergeben sich die drei Wärmeströme dann zu \dot{Q}_r , \dot{Q}_y und \dot{Q}_{ϕ} .

In Kapitel 3.3 wurde bereits gezeigt, dass die Temperaturverteilung rotationssymmetrisch ist. Demnach treten keine Wärmeströme \dot{Q}_{ϕ} auf. Für die Berechnung reicht es somit aus, nur die Querschnittsfläche $A_{Querschnitt}$ des Zylinders zu betrachten (siehe Abb. 5.3). Die einzelnen Teilvolumen bleiben aber dreidimensional, es erfolgt nur keine Unterteilung in Umlaufrichtung ϕ des Zylinders.

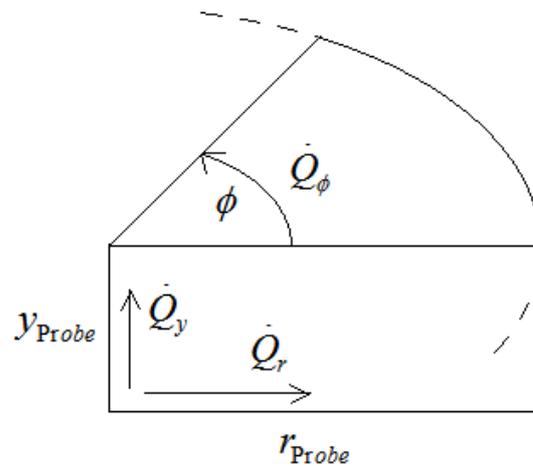


Abbildung 5.2: Wärmeströme im Zylinderkoordinatensystem

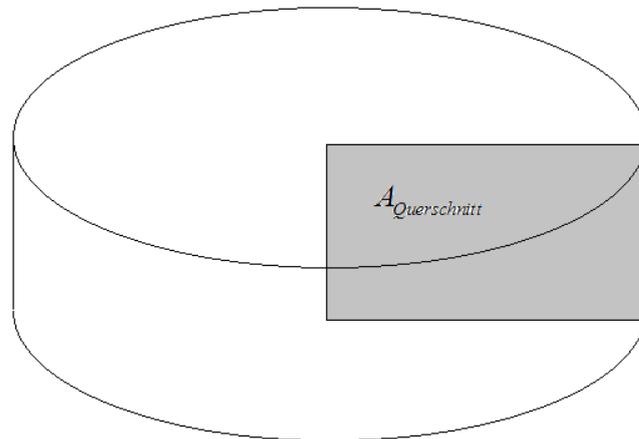


Abbildung 5.3: In der Simulation betrachtete Querschnittsfläche

Abbildung 5.4 stellt ein inneres Teilvolumen und dessen Nachbarvolumen dar. Die Pfeile symbolisieren einen Wärmestrom über die jeweiligen Grenzen. Bei der finiten Volumen Methode werden alle Wärmeströme so behandelt, als würden sie in das betrachtete Kontrollvolumen fließen. In der Realität richtet sich der Wärmestrom allerdings nach dem Temperaturgradienten. Er fließt immer von der höheren zur niedrigeren Temperatur. Dieser Tatsache wird Rechnung getragen, indem die Wärmeströme beim Austreten eines Volumens negativ werden.

5 Simulation des Aushärtevorgangs

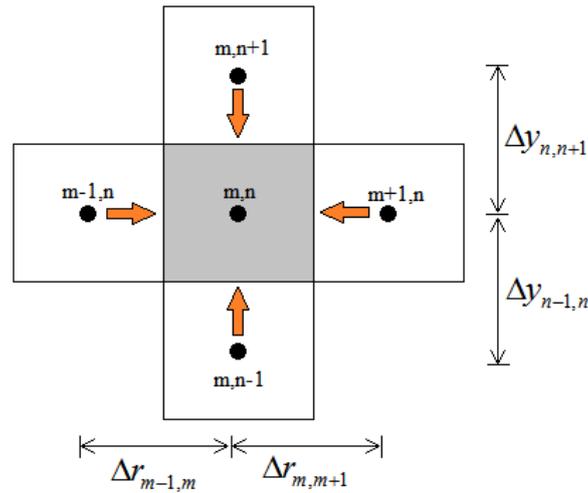


Abbildung 5.4: Konduktion zu einem inneren Kontrollvolumen von den benachbarten Teilvolumen

Die Punkte innerhalb eines Kontrollvolumens werden als Knotenpunkte bezeichnet. Für äquidistante Teilvolumen liegen die Knotenpunkte genau in der Mitte. In dem Modell fließen die Wärmeströme zwischen den einzelnen Knotenpunkten. So ergibt sich für einen inneren Knotenpunkt (m, n) folgende Erhaltungsgleichung.

$$\frac{dU}{dt} = \sum \dot{Q}_{\text{Konduktion}} + \dot{Q}_{\text{Quelle}} \quad (5.8)$$

$$\frac{dU}{dt} \Big|_{m,n} = \dot{Q}_{m-1,n} + \dot{Q}_{m+1,n} + \dot{Q}_{m,n-1} + \dot{Q}_{m,n+1} + \dot{Q}_{m,n,\text{Quelle}} \quad (5.9)$$

Mit der Beziehung (5.5) ergibt sich dies zu

$$\begin{aligned} \frac{dU}{dt} \Big|_{m,n} &= k A_{m-1,n,E} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{m-1,n} + \\ &+ k A_{m+1,n,W} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{m+1,n} + \\ &+ k A_{m,n-1,N} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{m,n-1} + \\ &+ k A_{m,n+1,S} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{m,n+1} + \\ &+ \frac{dh}{dt} \Big|_{m,n} \rho dV \end{aligned} \quad (5.10)$$

Für die numerische Berechnung ist eine örtliche Diskretisierung nötig.

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{dU}{dt} \right|_{m,n} &= k A_{m-1,n,E} \frac{T_{m-1,n} - T_{m,n}}{\Delta r_{m-1,m}} + \\
 &+ k A_{m+1,n,W} \frac{T_{m+1,n} - T_{m,n}}{\Delta r_{m,m+1}} + \\
 &+ k A_{m,n-1,N} \frac{T_{m,n-1} - T_{m,n}}{\Delta y_{n-1,n}} + \\
 &+ k A_{m,n+1,S} \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n}}{\Delta y_{n,n+1}} \\
 &+ \left. \frac{dh}{dt} \right|_{m,n} \rho dV_{m,n}
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

Um die Temperatur am Punkt (m, n) berechnen zu können, muss Gleichung (5.11) zeitlich diskretisiert werden. Hierbei gibt es unterschiedliche Vorgehensweisen, auf welche in Kapitel 5.5 eingegangen wird. Darüber hinaus ist die Wärmeleitfähigkeit k an jedem Knotenpunkt unterschiedlich und kann deshalb nicht als Konstante angesehen werden. Für den Wärmestrom muss somit die Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit der beteiligten Knotenpunkte beschrieben werden.

$$k = f(k_{m,n}, k_{m\pm i, n\pm j}) \quad i, j \in \{0, 1\} \text{ mit } i \neq j \tag{5.12}$$

Dieser Zusammenhang wird in Kapitel 5.2 erläutert. Die Flächen A beziehen sich, wie in Abbildung 5.5 verdeutlicht, auf die Grenzen N (North), E (East), S (South) und W (West) der jeweiligen Teilvolumen. Der Wärmestrom zwischen zwei Knotenpunkten ist senkrecht zu der entsprechenden Grenzfläche der beteiligten finiten Volumen. Die Berechnung dieser Flächen und der Abstände Δr und Δy zwischen zwei benachbarten Knotenpunkten wird in Kapitel 5.4 besprochen. Auch die Bestimmung des Volumens eines Kontrollvolumens dV wird in diesem Abschnitt erläutert.

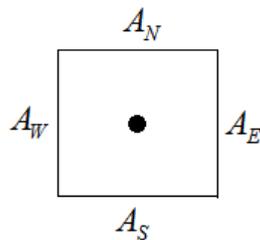


Abbildung 5.5: Grenzflächen eines Teilvolumens

Die Beziehung (5.10) beschreibt die Vorgehensweise der finiten Volumen Methode am Beispiel eines inneren Knotenpunktes. Um diesen Knotenpunkt befindet sich ein Kontrollvolumen, in dem alle Parameter konstant sind. Für dieses Volumen wird eine Energieerhaltungsgleichung aufgestellt. Die Beschreibung der Randpunkte hängt von den

jeweiligen Randbedingungen ab. Es können Bedingungen erster Art (Vorgabe einer Temperatur), zweiter Art (Vorgabe eines Wärmestroms) und dritter Art (Konvektion) auftreten. Das Kapitel 5.3 geht auf diese Randbedingungen ein und stellt die Vorgehensweise für die äußeren Punkte dar.

5.2 Wärmeleitfähigkeit bei veränderlichen Stoffparametern

Das inhomogene Aushärteverhalten von Knochenzement führt zu unterschiedlichen Stoffparametern innerhalb der Probe. Somit unterscheiden sich auch die Stoffgrößen jedes einzelnen Kontrollvolumens. Aus diesem Grund ist die Wärmeleitfähigkeit nicht nur von der Temperatur und dem Polymerisationsgrad, sondern auch vom Ort abhängig. Die Berechnung eines Wärmestroms durch Konduktion, kann auch durch einen Wärmewiderstand HR ausgedrückt werden.

$$\dot{Q}_{\text{Konduktion}} = \frac{\Delta T}{HR} \quad (5.13)$$

Der Wärmewiderstand zwischen zwei verschiedenen Materialien ergibt sich nach [5] zu

$$HR = \frac{\Delta x}{2 A k_1} + \frac{R_{th,K}}{A} + \frac{\Delta x}{2 A k_2} \quad (5.14)$$

Die Größen k_1 und k_2 sind hierin die Wärmeleitfähigkeiten der beteiligten Stoffe und $R_{th,K}$ der Kontaktwiderstand an deren Grenzfläche. Diese Beziehung in (5.13) eingesetzt führt zu

$$\dot{Q}_{\text{Konduktion}} = \frac{A \Delta T}{\frac{1}{2} \Delta x \left(\frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2} \right) + R_{th,K}} \quad (5.15)$$

Nach einem Koeffizientenvergleich mit (5.5) folgt eine Beziehung für eine Ersatzwärmeleitfähigkeit $k_{\text{Ersatz},R}$ zwischen den unterschiedlichen Materialien in Abhängigkeit des Kontaktwiderstands.

$$k_{\text{Ersatz},R} = \frac{1}{\frac{k_1+k_2}{2 k_1 k_2} + \frac{R_{th,K}}{\Delta x}} \quad (5.16)$$

Der Kontaktwiderstand tritt aufgrund von Zwischenräumen an den Grenzflächen der beiden Stoffe auf. Er wird von mehreren Faktoren beeinflusst.

$$R_{th,K} = f(\text{Oberflächenrauigkeit, Anpressdruck, Geometrie, Material}) \quad (5.17)$$

Innerhalb der Probe tritt kein Kontaktwiderstand auf, da die einzelnen Teilvolumen ohne Zwischenräume aneinandergrenzen. Somit erhält man für die Ersatzwärmeleitfähigkeit der Probe

$$k_{\text{Ersatz}} = \frac{2 k_1 k_2}{k_1 + k_2} \quad (5.18)$$

Der Wärmestrom zwischen den Knotenpunkten $(m - 1, n)$ und (m, n) lässt sich damit folgendermaßen berechnen.

$$\dot{Q}_{m-1,n} = \frac{2 k_{m-1,n} k_{m,n}}{k_{m-1,n} + k_{m,n}} A_{m-1,n,E} \frac{T_{m-1,n} - T_{m,n}}{\Delta r_{m-1,m}} \quad (5.19)$$

Abbildung 5.6 verdeutlicht anschaulich die Notwendigkeit einer Ersatzwärmeleitfähigkeit bei benachbarten Teilvolumen mit unterschiedlichen Stoffgrößen.

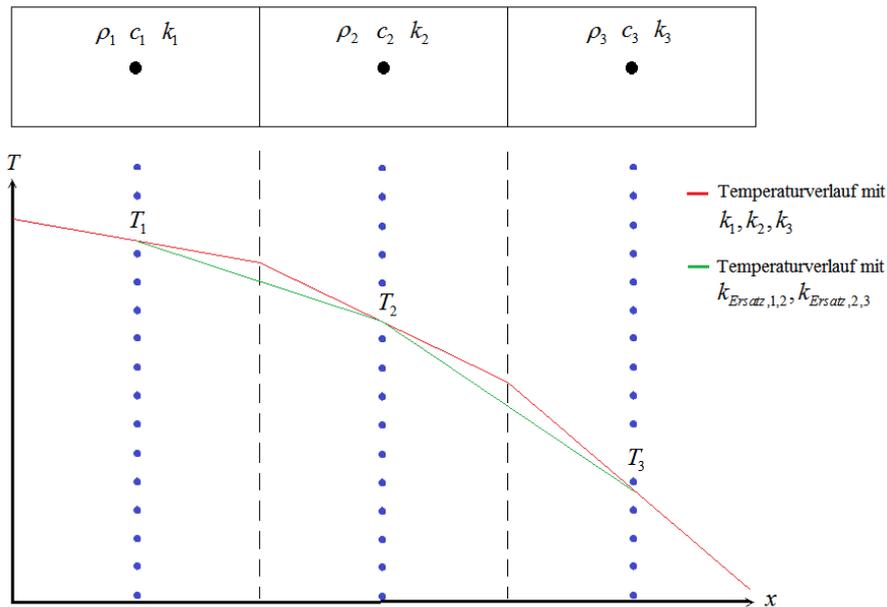


Abbildung 5.6: Auswirkung der Ersatzwärmeleitfähigkeit auf den Temperaturverlauf

Durch die verschiedenen Wärmeleitfähigkeiten k_1 , k_2 , und k_3 der Kontrollvolumen kommt es zu einer Unstetigkeit des Temperaturverlaufs an den Grenzflächen. Diese Unstetigkeit verhindert die Bildung der partiellen Ableitung $\partial T / \partial x$ und der Wärmestrom zwischen den Knotenpunkten kann nicht korrekt berechnet werden. Durch die Verwendung des Ersatzwiderstandes entsteht ein stetiger Verlauf zwischen den beiden Punkten. Die jeweiligen Temperaturen bleiben allerdings unverändert. Nachdem für die Berechnung nur die Temperaturen an den Knotenpunkten von Interesse sind, verursacht die Ersatzwärmeleitfähigkeit keinen Fehler in der Simulation.

5.3 Randbedingungen

Wie bereits in Kapitel 3.3 dargelegt, ist der Aushärtevorgang stark von den Anfangs- und Randbedingungen abhängig. Für die Simulation sind diese Größen notwendige Ein-

gabeparameter, um das Anfangs-Randwert-Problem der Temperaturverteilung lösen zu können. Folgende Abbildung zeigt die in der Simulation implementierten Randbedingungen. Es ist jeweils die rotationssymmetrische Querschnittsfläche dargestellt.

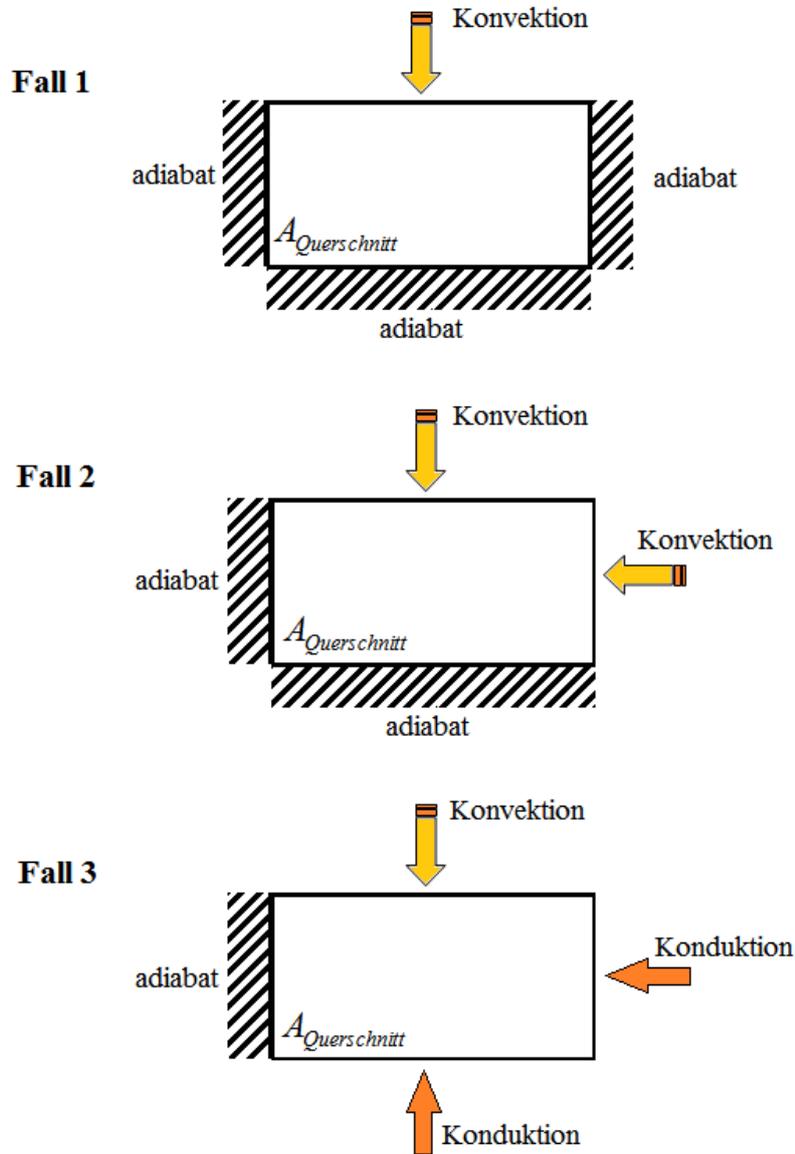


Abbildung 5.7: Implementierte Randbedingungen

Aufgrund der rotationssymmetrischen Temperaturverteilung kommt es zu keinem Wärmestrom über den Mittelpunkt der Probe. Die Rotationsachse kann somit als adiabter Rand betrachtet werden. In Fall 1 sind bis auf die Probenoberfläche alle weiteren Ränder ebenfalls adiabatisch. An der Oberfläche tritt freie Konvektion auf. Der äußere Rand wird in Fall 2 nicht durch Styrodur bedeckt. Daher kommt es auch zu einer freien Konvektion am Rand. In Fall 3 wird sowohl am Rand, als auch an der Unterseite der Probe die Wärmeleitung in das Styrodur berücksichtigt.

Zur Betrachtung der Teilvolumen am Rand und in der Ecke des Zylinders, wird in der Graphik 5.8 exemplarisch die rechte obere Ecke der Querschnittsfläche betrachtet.

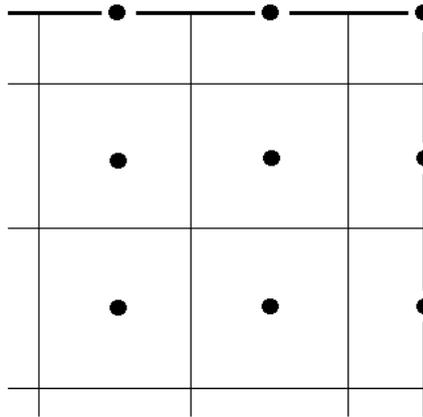


Abbildung 5.8: Teilvolumen der rechten oberen Ecke des Zylinders

Damit die Knotenpunkte der äußeren Kontrollvolumen auch tatsächlich an der Oberfläche, beziehungsweise am Rand liegen, werden dort halbe Teilvolumen verwendet. In den Ecken kommt es somit zu einem viertel des ursprünglichen Kontrollvolumens. Nur so können die Randbedingungen korrekt in das Modell eingearbeitet werden. Auf die prinzipielle Vorgehensweise hat dies allerdings keinen Einfluss.

In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Fälle aus Abbildung 5.7 näher betrachtet. Dabei wird die Erhaltungsgleichung jeweils exemplarisch am rechten oberen Teilvolumen angewendet.

5.3.1 Adiabater Rand

Graphik 5.9 stellt ein Eck-Teilvolumen mit den auftretenden Wärmeströmen bei einem adiabaten Rand, wie in Fall 1, dar.

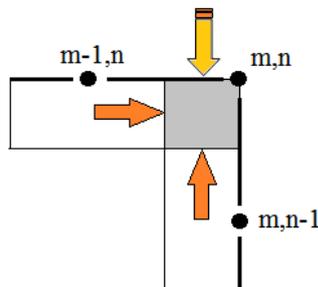


Abbildung 5.9: Wärmeströme am rechten oberen Kontrollvolumen (für Fall 1)

Wendet man den Erhaltungssatz auf dieses Kontrollvolumen an ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{dU}{dt} \right|_{m,n} &= k_{Ersatz,m-1,m} A_{m-1,n,E} \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{m-1,n} + \\
 &+ k_{Ersatz,n-1,n} A_{m,n-1,N} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{m,n-1} + \\
 &+ \bar{h} A_{m,n,N} (T_\infty - T) + \\
 &+ \left. \frac{dh}{dt} \right|_{m,n} \rho dV
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Der Wärmeübergangskoeffizient \bar{h} ist, neben der Temperaturdifferenz ($T_\infty - T$), ausschlaggebend für den Wärmestrom durch Konvektion. Die Umgebungstemperatur T_∞ beträgt dabei konstante $294.15K$. Der Koeffizient für den konvektiven Wärmeübergang ist allerdings keine Konstante und von verschiedenen Faktoren abhängig.

$$\bar{h} = f(\text{Strömungsart, Fluid, Ort, Temperatur}) \tag{5.21}$$

Der über den Radius gemittelte Wärmeübergangskoeffizient \bar{h} lässt sich über die mittlere Nusseltzahl \overline{Nu}_r bestimmen. Diese ist eine längenbezogene, dimensionslose Kennzahl der Wärmeübertragung.

$$\bar{h} = \frac{\overline{Nu}_r k_{Luft}}{r_{Probe}} \tag{5.22}$$

Bei der freien Konvektion ist die Nusseltzahl im Allgemeinen abhängig von der Rayleighzahl Ra_r und der Prandtlzahl Pr . Die Rayleighzahl beschreibt die Strömungsart und dient als Kriterium für laminare, oder turbulente Strömung. Die Prandtlzahl charakterisiert das Fluid, in diesem Fall die Luft.

$$\overline{Nu}_r = f(Ra_r, Pr) \tag{5.23}$$

$$Ra_r = \left| \frac{g \rho_{Luft} c_{p,Luft} (2r_{Probe})^3 (T_\infty - T)}{\nu_{Luft} k_{Luft} T_\infty} \right| \tag{5.24}$$

$$Pr = \frac{\nu_{Luft} \rho_{Luft} c_{p,Luft}}{k_{Luft}} \tag{5.25}$$

Um die freie Konvektion in der Simulation berücksichtigen zu können, ist somit nötig, die mittlere Nusseltzahl zu ermitteln. Für eine ebene Platte existieren empirische Formeln zur Berechnung dieser Kenngröße. Diese können näherungsweise auf die Oberfläche des Zylinders übertragen werden. Für die Oberseite einer horizontalen Platte gilt näherungsweise

$$\text{Für } T < T_\infty \quad \overline{Nu}_r = 0.27 Ra_r^{0.25} \quad (10^5 \lesssim Ra_r \lesssim 10^{10}) \tag{5.26}$$

$$\text{Für } T > T_\infty \quad \overline{Nu}_r = 0.54 Ra_r^{0.25} \quad (10^4 \lesssim Ra_r \lesssim 10^7) \tag{5.27}$$

$$\overline{Nu}_r = 0.15 Ra_r^{0.33} \quad (10^7 \lesssim Ra_r \lesssim 10^{11}) \tag{5.28}$$

Bei einer vertikalen Platte gilt unabhängig von der Temperatur und für alle Rayleighzahlen die empirische Beziehung

$$\overline{Nu}_r = \left\{ 0.825 + \frac{0.378 Ra_r^{0.167}}{[1 + (0.492/Pr)^{0.563}]^{0.296}} \right\}^2 \quad (5.29)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient an der Oberfläche der Probe lässt sich aus den Gleichungen (5.22) und (5.26) allgemein darstellen als

$$\bar{h}_{horz} = \frac{k_{Luft} C Ra_r^n(T)}{r_{Probe}} \quad (5.30)$$

Die Konstanten C und n müssen durch eine Fallunterscheidung an die jeweilige Situation angepasst werden. Setzt man die Beziehungen aus (5.30) und (5.18) in die Erhaltungsgleichung (5.20) ein und führt eine örtliche Diskretisierung durch erhält man

$$\begin{aligned} \left. \frac{dU}{dt} \right|_{m,n} &= \frac{2 k_{m-1,n} k_{m,n}}{k_{m-1,n} + k_{m,n}} A_{m-1,n,E} \frac{T_{m-1,n} - T_{m,n}}{\Delta r_{m-1,m}} + \\ &+ \frac{2 k_{m,n-1} k_{m,n}}{k_{m,n-1} + k_{m,n}} A_{m,n-1,N} \frac{T_{m,n-1} - T_{m,n}}{\Delta y_{n-1,n}} + \\ &+ \frac{k_{Luft} C Ra_r^n(T_{m,n})}{r_{Probe}} A_{m,n,N} (T_\infty - T_{m,n}) + \\ &+ \left. \frac{dh}{dt} \right|_{m,n} \rho dV_{m,n} \end{aligned} \quad (5.31)$$

Mit Hilfe dieser Beziehung lässt sich, nach einer zeitlichen Diskretisierung, die Temperatur des oberen rechten Eckpunktes numerisch berechnen.

5.3.2 Rand mit freier Konvektion

Abbildung 5.10 zeigt die Wärmeströme in das obere rechte Kontrollvolumen, mit einer Randbedingung dritter Art an der Mantelfläche des Zylinders.

Für Fall 2 ergibt sich somit folgender Ansatz für die Energieerhaltungsgleichung.

$$\begin{aligned} \left. \frac{dU}{dt} \right|_{m,n} &= k_{Ersatz,m-1,m} A_{m-1,n,E} \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{m-1,n} + \\ &+ k_{Ersatz,n-1,n} A_{m,n-1,N} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{m,n-1} + \\ &+ \bar{h}_{horz} A_{m,n,N} (T_\infty - T) + \\ &+ \bar{h}_{vert} A_{m,n,E} (T_\infty - T) + \\ &+ \left. \frac{dh}{dt} \right|_{m,n} \rho dV \end{aligned} \quad (5.32)$$

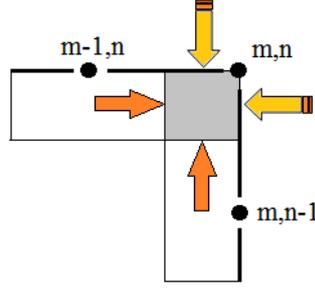


Abbildung 5.10: Wärmeströme am rechten oberen Kontrollvolumen (für Fall 2)

Der Wärmeübergangskoeffizient \bar{h}_{vert} an der Mantelfläche wird mit Hilfe der Beziehung (5.29) bestimmt.

$$\bar{h}_{\text{vert}} = \frac{k_{\text{Luft}} f(Ra_r(T), Pr)}{r_{\text{Probe}}} \quad (5.33)$$

Setzt man alle bekannten Beziehungen in (5.32) ein und führt eine örtliche Diskretisierung durch, so entsteht Gleichung (5.34)

$$\begin{aligned} \left. \frac{dU}{dt} \right|_{m,n} &= \frac{2 k_{m-1,n} k_{m,n}}{k_{m-1,n} + k_{m,n}} A_{m-1,n,E} \frac{T_{m-1,n} - T_{m,n}}{\Delta r_{m-1,m}} + \\ &+ \frac{2 k_{m,n-1} k_{m,n}}{k_{m,n-1} + k_{m,n}} A_{m,n-1,N} \frac{T_{m,n-1} - T_{m,n}}{\Delta y_{n-1,n}} + \\ &+ \frac{k_{\text{Luft}} C Ra_r^n(T_{m,n})}{r_{\text{Probe}}} A_{m,n,N} (T_{\infty} - T_{m,n}) + \\ &+ \frac{k_{\text{Luft}} f(Ra_r(T_{m,n}), Pr)}{r_{\text{Probe}}} A_{m,n,E} (T_{\infty} - T_{m,n}) + \\ &+ \left. \frac{dh}{dt} \right|_{m,n} \rho dV_{m,n} \end{aligned} \quad (5.34)$$

5.3.3 Rand mit Konduktion

In Fall drei liegt eine Randbedingung dritter Art vor. Es kommt zu einem Wärmestrom \dot{Q}_{Sty} zwischen Knochenzement und Styrodur. Für die Berechnung dieses Wärmestroms wird ebenfalls eine Ersatzwärmeleitfähigkeit benötigt. Da allerdings nicht davon auszugehen ist, dass es keine Hohlräume zwischen dem Knochenzement und dem Styrodur gibt, muss der Kontaktwiderstand berücksichtigt werden. Nach Gleichung (5.16) erhält man für die obere rechte Ecke eine Ersatzwärmeleitfähigkeit der Form

$$k_{\text{Ersatz},R} = 1 / \left(\frac{k_{m,n} + k_{\text{Sty}}}{2 k_{m,n} k_{\text{Sty}}} + \frac{R_{th,K}}{\Delta x_{m,Sty}} \right) \quad (5.35)$$

Somit lässt sich der vorgegebene Wärmestrom darstellen als

$$\dot{Q}_{Sty} = 1 / \left(\frac{k_{m,n} + k_{Sty}}{2 k_{m,n} k_{Sty}} + \frac{R_{th,K}}{\Delta x_{m,Sty}} \right) A_{m,n,E} \frac{T_{Sty} - T_{m,n}}{\Delta r_{m,Sty}} \quad (5.36)$$

Auf die Temperatur des Styrodurs T_{Sty} , den Abstand $\Delta r_{m,Sty}$ und den Kontaktwiderstand wird in Kapitel 5.6 näher eingegangen.

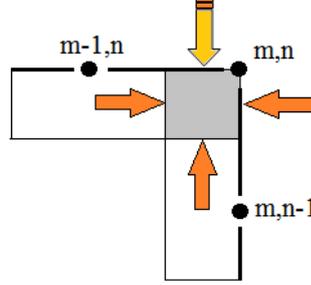


Abbildung 5.11: Wärmeströme am rechten oberen Kontrollvolumen (für Fall 3)

Der Erhaltungssatz angewendet auf das in Abbildung 5.11 dargestellte Kontrollvolumen ergibt

$$\begin{aligned} \frac{dU}{dt} \Big|_{m,n} &= k_{Ersatz,m-1,m} A_{m-1,n,E} \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{m-1,n} + \\ &+ k_{Ersatz,n-1,n} A_{m,n-1,N} \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{m,n-1} + \\ &+ \dot{h}_{horz} A_{m,n,N} (T_\infty - T) + \\ &+ \frac{dh}{dt} \Big|_{m,n} \rho dV \\ &+ \dot{Q}_{Sty,m,n} \end{aligned} \quad (5.37)$$

Ein örtliche Diskretisierung führt zu

$$\begin{aligned} \frac{dU}{dt} \Big|_{m,n} &= \frac{2 k_{m-1,n} k_{m,n}}{k_{m-1,n} + k_{m,n}} A_{m-1,n,E} \frac{T_{m-1,n} - T_{m,n}}{\Delta r_{m-1,m}} + \\ &+ \frac{2 k_{m,n-1} k_{m,n}}{k_{m,n-1} + k_{m,n}} A_{m,n-1,S} \frac{T_{m,n-1} - T_{m,n}}{\Delta y_{n-1,n}} + \\ &+ \frac{k_{Luft} C Ra_r^n(T_{m,n})}{r_{Probe}} A_{m,n,N} (T_\infty - T_{m,n}) + \\ &+ \frac{dh}{dt} \Big|_{m,n} \rho dV_{m,n} \\ &+ 1 / \left(\frac{k_{m,n} + k_{Sty}}{2 k_{m,n} k_{Sty}} + \frac{R_{th,K}}{\Delta x_{m,Sty}} \right) A_{m,n,E} \frac{T_{Sty} - T_{m,n}}{\Delta r_{m,Sty}} \end{aligned} \quad (5.38)$$

5.4 Gitter

Um ein Volumen in Teilvolumen zu zerlegen, wird ein Netz aus Knotenpunkten erzeugt. Dieses Netz heißt auch Gitter. Um die so entstehenden Punkte werden anschließend jeweils finite Volumenzellen gelegt, welche den einzelnen Kontrollvolumen entsprechen. Folgende Abbildung veranschaulicht den Zusammenhang zwischen dem Gitter und den Teilvolumen.

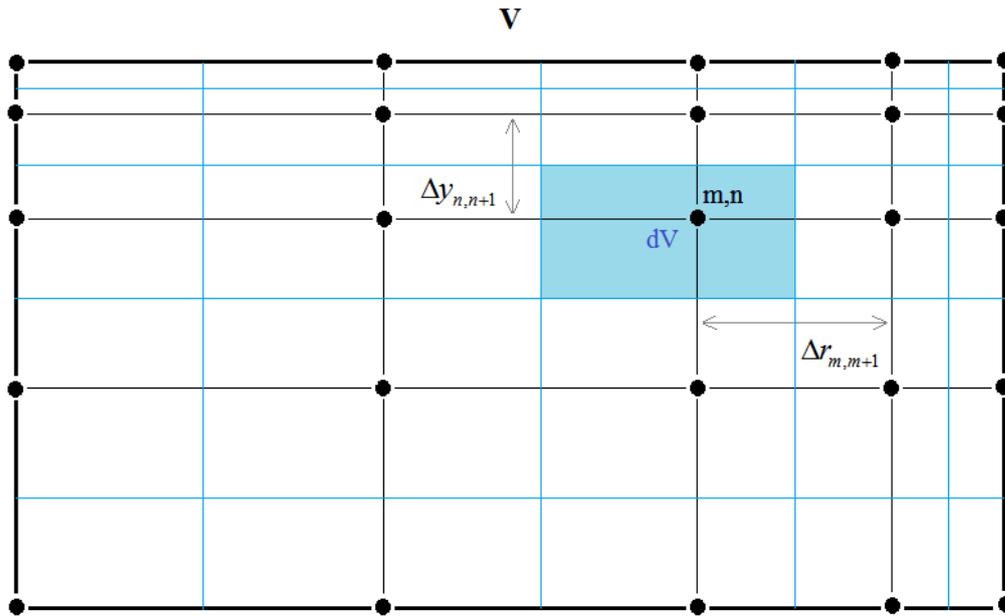


Abbildung 5.12: Entstehung der finiten Volumen mit Hilfe eines Gitters

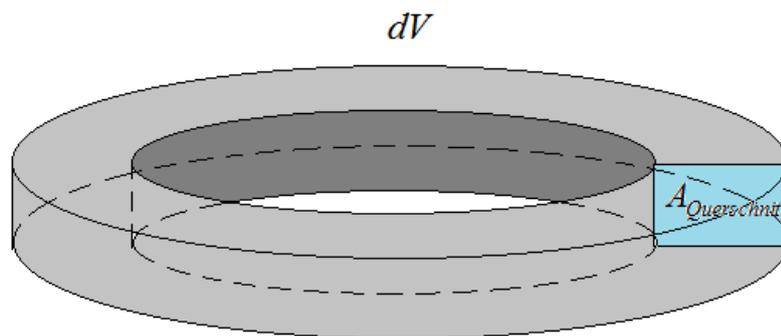


Abbildung 5.13: Finites Volumen

Die Graphik 5.12 stellt ein nicht-äquidistantes Gitter dar. Der Vorteil eines solchen Netzes ist, dass ein guter Kompromiss zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit erreicht werden kann. An den Stellen, die mit einer hohen Genauigkeit berechnet werden sollen,

5 Simulation des Aushärtvorgangs

wird das Gitter verfeinert. Somit ergeben sich kleinere Kontrollvolumen und kleinere Fehler. Da es sich dabei nur um einen lokalen Anstieg der Teilvolumen handelt, steigt der Rechenaufwand nur geringfügig. Die Anzahl der Knotenpunkte ist dabei ausschlaggebend für die benötigte Rechenzeit der Simulation. Eine Optimierung des Gitter führt daher zur Laufzeitverbesserung.

Die Schnittpunkte des erzeugten Netzes ergeben die Knotenpunkte. Somit sind auch die Abstände zwischen den Knotenpunkten Δr und Δy unterschiedlich. Die Teilvolumen ergeben sich aus den Mittelsenkrechten zwischen den einzelnen Punkten. Im Unterschied zu einem äquidistanten Gitter liegen die Knotenpunkte dabei nicht mehr in der Mitte des Kontrollvolumens. Dies hat aber keinen Einfluss auf die Vorgehensweise der finiten Volumen Methode. Abbildung 5.13 zeigt ein Teilvolumen des Zylinders. Nachdem keine Unterteilung in Umlaufrichtung geschieht, erstreckt sich das Volumen über den gesamten Zylinder. In der zweidimensionalen Betrachtung wird nur die entsprechende Querschnittsfläche dieses Hohlzylinders dargestellt.

Für die einzelnen Abstände muss gelten

$$\sum_{m=1}^{M-1} \Delta r_{m,m+1} = r_{\text{Probe}} \quad (5.39)$$

$$\sum_{n=1}^{N-1} \Delta y_{n,n+1} = y_{\text{Probe}} \quad (5.40)$$

wobei M die Anzahl der Knotenpunkte in radialer Richtung und N die Anzahl der Knotenpunkte in vertikaler Richtung ist. Durch das Gitter ist der Radius r und die Höhe y jedes Knotenpunktes gegeben und die Abstände ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \Delta r_{m,m+1} &= r_{m+1,n} - r_{m,n} & m &= [1, \dots, M] \\ \Delta r_{m-1,m} &= r_{m,n} - r_{m-1,n} & n &= [1, \dots, N] \\ \Delta y_{n,n+1} &= y_{m,n+1} - y_{m,n} \\ \Delta y_{n-1,n} &= y_{m,n} - y_{m,n-1} \end{aligned} \quad (5.41)$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad r_{1,n} &= y_{m,1} = 0 \\ r_{M,n} &= r_{\text{Probe}} \\ y_{m,N} &= y_{\text{Probe}} \end{aligned} \quad (5.42)$$

$$\text{und} \quad \nexists f(i, j) \quad \forall [i \in \{0, N + 1\} \cup j \in \{0, M + 1\}] \quad (5.43)$$

Aussage (5.43) stellt eine Beschränkung der Indexmenge von m und n dar. Für den Fall, dass der Laufindex außerhalb des zulässigen Bereiches liegt, existiert die bezeichnete Größe nicht.

Die Grenzflächen eines Kontrollvolumens lassen sich ebenfalls anhand des Gitters ermitteln. Dabei ist die besondere Form des Teilvolumens zu beachten. Basierend auf den, durch das Netz gegebenen Größen und den Abständen zwischen den Knotenpunkten, ergeben sich folgende Beziehungen für $A_{m,n,N}$ und $A_{m,n,S}$.

$$A_{m,n,N} = A_{m,n,S} \quad (5.44)$$

$$\begin{aligned} A_{m,n,N} &= \pi \left[(r_{m,n} + \frac{1}{2} \Delta r_{m,m+1})^2 - (r_{m,n} - \frac{1}{2} \Delta r_{m-1,m})^2 \right] \\ &= \pi \left[r_{m,n}(\Delta r_{m,m+1} + \Delta r_{m-1,m}) + \frac{1}{4}(\Delta r_{m,m+1}^2 - \Delta r_{m-1,m}^2) \right] \\ &= \pi (\Delta r_{m,m+1} + \Delta r_{m-1,m}) \left[r_{m,n} + \frac{1}{4}(\Delta r_{m,m+1} - \Delta r_{m-1,m}) \right] \end{aligned} \quad (5.45)$$

Unter Berücksichtigung der Definition nach (5.43) kommt es zu zwei Spezialfällen an den Rändern der betrachteten Querschnittsfläche.

$$A_{1,n,N} = A_{1,n,S} = \frac{1}{4} \pi \Delta r_{1,2}^2 \quad (5.46)$$

$$A_{M,n,N} = A_{M,n,S} = \pi \Delta r_{M-1,M} (r_{Probe} - \frac{1}{4} \Delta r_{M-1,M}) \quad (5.47)$$

Die Querschnittsflächen $A_{m,n,E}$ und $A_{m,n,W}$ lassen sich berechnen aus

$$A_{m,n,E} = \pi (r_{m,n} + \frac{1}{2} \Delta r_{m,m+1})(\Delta y_{n-1,n} + \Delta y_{n,n+1}) \quad (5.48)$$

$$A_{m,n,W} = \pi (r_{m,n} - \frac{1}{2} \Delta r_{m-1,m})(\Delta y_{n-1,n} + \Delta y_{n,n+1}) \quad (5.49)$$

An den Rändern muss wieder die Beschränkung (5.43) und die Definition (5.42) berücksichtigt werden.

Mit Hilfe der Grenzflächen und der vertikalen Abstände Δy , lässt sich der Volumeninhalt eines Teilvolumens dV bestimmen.

$$dV_{m,n} = A_{m,n,N} \frac{1}{2} (\Delta y_{n-1,n} + \Delta y_{n,n+1}) \quad (5.50)$$

Somit sind alle benötigten geometrischen Größen bekannt und können in die Energieerhaltungsgleichung eingesetzt werden.

5.5 Zeitliche Diskretisierung

Um das Temperaturfeld innerhalb der Probe aus dem Energieerhaltungssatz numerisch zu berechnen, ist eine zeitliche Diskretisierung nötig. In den folgenden Abschnitten wird auf das explizite und das implizite Verfahren eingegangen. Die Entscheidung für eine der beiden Methoden hat einen grundlegenden Einfluss auf die numerische Berechnung.

5.5.1 Explizites Verfahren

Das explizite Verfahren bezieht sich bei der zeitlichen Diskretisierung auf die Werte zum aktuellen Zeitpunkt p . Betrachtet man eine allgemeine Differentialgleichung der Form

$$\frac{dT}{dt} = f(T) + K(t) \quad (5.51)$$

so ergibt sich mit der expliziten Methode

$$\frac{T_{p+1} - T_p}{\Delta t} = f(T_p) + K_p \quad (5.52)$$

Unter der Voraussetzung, dass die Starttemperatur T_p bekannt ist, lässt sich die Temperatur zum nächsten Zeitschritt $p + 1$ leicht bestimmen. Durch umformen der Gleichung (5.52) erhält man

$$T_{p+1} = \Delta t (f(T_p) + K_p) + T_p \quad (5.53)$$

Die Änderung der Temperatur über die Zeit kann somit allein mit Hilfe der vorliegenden Werte $f(T_p) + K_p$ ermittelt werden. Diese Vorgehensweise auf den oberen rechten Knotenpunkt aus Fall 3 angewendet, führt unter Verwendung der Beziehung (5.38) beispielsweise auf

$$\begin{aligned} T_{m,n}^{p+1} = & \frac{\Delta t}{\rho_{m,n}^p c_{v,m,n}^p dV_{m,n}} \left[k_{Ersatz,m-1,m}^p A_{m-1,n,E} \frac{T_{m-1,n}^p - T_{m,n}^p}{\Delta r_{m-1,m}} + \right. \\ & + k_{Ersatz,n-1,n}^p A_{m,n-1,S} \frac{T_{m,n-1}^p - T_{m,n}^p}{\Delta y_{n-1,n}} + \\ & \left. + \hbar_{horz}^p A_{m,n,N} (T_\infty - T_{m,n}^p) \right] + \\ & + \frac{\Delta h^p}{c_{v,m,n}^p} + \frac{\Delta t}{\rho_{m,n}^p c_{v,m,n}^p dV_{m,n}} \dot{Q}_{Sty}^p + T_{m,n}^p \end{aligned} \quad (5.54)$$

Bei der Berechnung des gesamten Temperaturfeldes entspricht die Anzahl der zu berechnenden Gleichungen, der Anzahl an Knotenpunkten. Obwohl diese Vorgehensweise aufgrund der einfachen Implementierung in der Simulation Vorteile bietet, ist sie dennoch auch mit Nachteilen verbunden. Das explizite Verfahren neigt mit größer werdenden Zeitschritten zu Instabilität. Je kleiner die Teilvolumen sind, desto kleiner müssen auch die Zeitschritte gewählt werden, damit eine stabile Berechnung gewährleistet ist. Um möglichst genaue Ergebnisse zu erzielen, ist es somit nötig, die Zeitschrittweite sehr niedrig zu halten. Um ein Gitter mit $\Delta r, \Delta y = 0.5mm$ stabil berechnen zu können, benötigt die Simulation beispielsweise eine Zeitschrittweite von etwa $0.02s$. Da sich Messungen allerdings über eine Stunde erstrecken, bedeutet das für die Simulation einen großen Rechenaufwand und eine sehr hohe Rechenzeit. Das Temperaturfeld müsste 180000 mal berechnet werden um eine Stunde simulieren zu können. Abhilfe bietet das implizite Verfahren.

5.5.2 Implizites Verfahren

Das implizite Verfahren bezieht sich, im Gegensatz zum Expliziten, bei einer zeitlichen Diskretisierung, auf den neuen Zeitpunkt $p + 1$. Somit ergibt sich aus (5.51)

$$T_{p+1} = \Delta t (f(T_{p+1}) + K_p) + T_p \quad (5.55)$$

Im Allgemeinen lässt sich aus dieser Beziehung die Temperatur T_{p+1} nicht ermitteln. Für den Eckpunkt aus Fall 3 kommt es nach einer zeitlichen Diskretisierung zu folgender Beziehung.

$$\begin{aligned} T_{m,n}^{p+1} = \frac{\Delta t}{\rho_{m,n}^p c_{v,m,n}^p dV_{m,n}} & \left[k_{Ersatz,m-1,m}^p A_{m-1,n,E} \frac{T_{m-1,n}^{p+1} - T_{m,n}^{p+1}}{\Delta r_{m-1,m}} + \right. \\ & + k_{Ersatz,n-1,n}^p A_{m,n-1,S} \frac{T_{m,n-1}^{p+1} - T_{m,n}^{p+1}}{\Delta y_{n-1,n}} + \\ & \left. + \bar{h}_{horz}^p A_{m,n,N} (T_\infty - T_{m,n}^{p+1}) \right] + \\ & + \frac{\Delta h^p}{c_{v,m,n}^p} + \frac{\Delta t}{\rho_{m,n}^p c_{v,m,n}^p dV_{m,n}} \dot{Q}_{Sty}^p + T_{m,n}^p \end{aligned} \quad (5.56)$$

Umgestellt nach den unbekanntem Temperaturen erhält man

$$\begin{aligned} T_{m,n}^{p+1} \left[1 + \frac{F a_{m,n}^p}{dV_{m,n}} (A_{m,n}^p + B_{m,n}^p + C_{m,n}^p) \right] - \frac{F a_{m,n}^p}{dV_{m,n}} \left(A_{m,n}^p T_{m-1,n}^{p+1} + B_{m,n}^p T_{m,n-1}^{p+1} \right) = \\ = \frac{F a_{m,n}^p}{dV_{m,n}} C_{m,n}^p T_\infty + \frac{\Delta h_{m,n}^p}{c_{c,m,n}^p} + \frac{F a_{m,n}^p}{dV_{m,n}} \dot{Q}_{Sty}^p + T_{m,n}^p \end{aligned} \quad (5.57)$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad F a_{m,n}^p &= \frac{\Delta t}{\rho_{m,n}^p c_{v,m,n}^p} \\ A_{m,n}^p &= \frac{k_{Ersatz,m-1,m}^p A_{m-1,n,E}}{\Delta r_{m-1,m}} \\ B_{m,n}^p &= \frac{k_{Ersatz,n-1,n}^p A_{m,n-1,S}}{\Delta y_{n-1,n}} \\ C_{m,n}^p &= \bar{h}_{horz}^p A_{m,n,N} \end{aligned} \quad (5.58)$$

Die Gleichung (5.57) enthält mehrere Unbekannte und ist daher nicht lösbar. Jede so aufgestellte Beziehung für einen Punkt, enthält genau soviel unbekanntem Temperaturen, wie die Anzahl an beteiligten Knotenpunkten. Wenn für alle Teilvolumen eine implizite Gleichung aufgestellt wird, ergibt sich ein Gleichungssystem der Form

$$[M] (\underline{T}^{p+1}) = (\underline{K}^p) \quad (5.59)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } M &\in \mathbb{R}^{M \cdot N \times M \cdot N} \\ \underline{T}^{p+1} &\in \mathbb{R}^{M \cdot N} \\ \underline{K}^p &\in \mathbb{R}^{M \cdot N} \end{aligned}$$

Die Einträge der Matrix M stellen die Koeffizienten der unbekanntenen Temperaturen T^{p+1} dar. In Beziehung (5.57) setzten sich diese aus A, B, C, Fa und dV zusammen. Die Komponenten des Vektors K beschreiben die rechte Seite der Gleichung (5.57). Durch Lösen des Gleichungssystems berechnen ergeben sich alle Temperaturen im Zeitpunkt $p + 1$ zu

$$(\underline{T}^{p+1}) = [M]^{-1} (\underline{K}^p) \quad (5.60)$$

Für die Implementierung in die Simulation, wird ein von Matlab vorgegebenes, direktes Verfahren, gewählt.

Im Vergleich zum expliziten Verfahren ist der Rechenaufwand für einen einzelnen Zeitschritt höher. Die implizite Vorgehensweise hat allerdings den Vorteil, dass sie auch bei großen Zeitschritten stabil bleibt. Somit ist es möglich die Zeitschrittweite zu erhöhen. Das hat zur Folge, dass der Gesamtrechenaufwand geringer wird und sich die benötigte Rechenzeit verkürzt. Da es allerdings noch einen Faktor K^p gibt, die sich auf den momentanen Zeitpunkt p beziehen, lässt sich die Schrittweite nicht beliebig erhöhen, da dies sonst ebenfalls zur Instabilität führt. Diese Faktoren sind beispielsweise die Enthalpiedifferenz Δh^p und \dot{Q}_{Sty}^p . Die maximal Mögliche Zeitschrittweite ist abhängig von den Probenabmessungen und der Anzahl der Knotenpunkte. Für die berechneten Beispiele liegt sie zwischen 0.5 und 1 Sekunden.

5.6 Berücksichtigung des Styrodurs

Um das Styrodur in der Simulation berücksichtigen zu können, ist es nötig, den Wärmestrom zwischen Knochenzement und Styrodur zu kennen. Dieser Wärmestrom lässt sich wie bereits gezeigt darstellen als

$$\dot{Q}_{Sty} = 1 / \left(\frac{k_{m,n} + k_{Sty}}{2 k_{m,n} k_{Sty}} + \frac{R_{th,K}}{\Delta x_{m,Sty}} \right) A_{m,n,E} \frac{T_{Sty} - T_{m,n}}{\Delta r_{m,Sty}} \quad (5.61)$$

Der Kontaktwiderstand $R_{th,K}$ ist allerdings nicht bekannt und muss daher in erster Näherung vernachlässigt werden ($R_{th,K} = 0$). Der daraus resultierende Fehler ist vorerst nicht abschätzbar.

Die Temperatur des Styrodurs T_{Sty} ist nicht konstant. Genau wie das Temperaturfeld

der Probe, ist auch die Temperaturverteilung innerhalb des Styrodurs von Ort und Zeit abhängig. Somit muss das Rechenetz auf das gesamte Gebiet erweitert werden. Die naheliegendste Lösung wäre, alle Knotenpunkte vom Knochenzement und Styrodur in die implizite Berechnung mit einzubeziehen. Da es sich allerdings um ein sehr großes Gebiet handelt, wird der Rechenaufwand dadurch drastisch erhöht. Im Sinne der Laufzeitoptimierung wird eine andere Lösung gewählt. Das Rechengebiet wird wie in Abbildung 5.14 in vier Quadranten unterteilt. Die Sektoren sind über den Wärmestrom zwischen ihnen verbunden. Dieser ist jeweils ein Teil der Randbedingung.

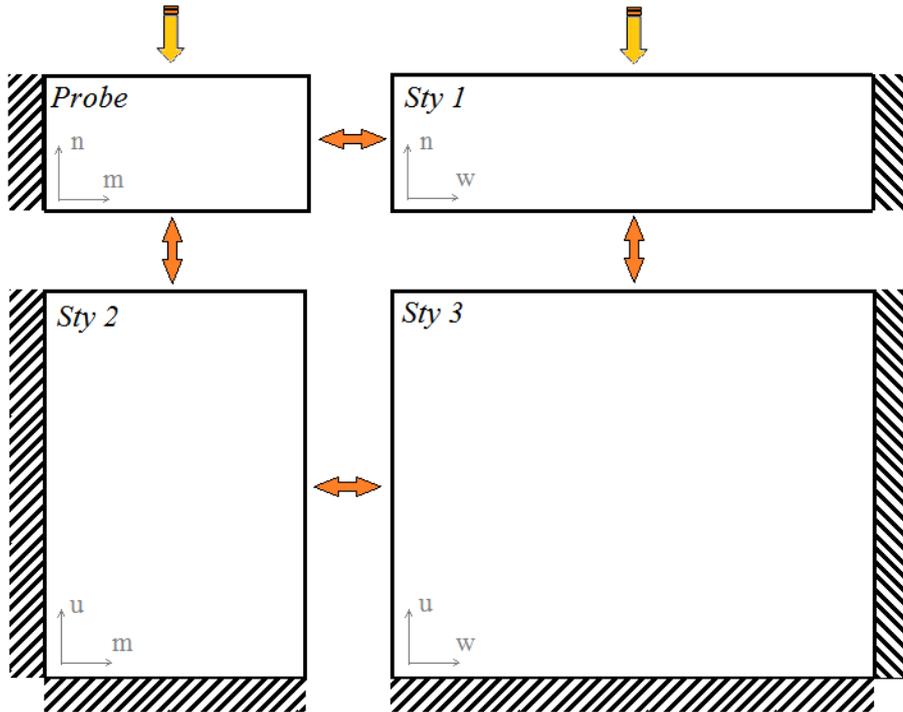


Abbildung 5.14: Zerlegung des Rechengebietes in vier Quadranten

Die einzelnen Sektoren haben eine unterschiedliche Größe und daher verschiedene Gitter. Es ist die Einführung zusätzlicher Laufindizes u und w nötig.

$$u = [1, \dots, U] \quad (5.62)$$

$$w = [1, \dots, W]$$

$$\text{mit } r_{M,n} + r_{W,n} = r_{M,u} + r_{W,u} = R_{Sty}$$

$$y_{m,N} + y_{m,U} = y_{w,N} + y_{w,U} = Y_{Sty}$$

Die Wärmeströme zwischen den Quadranten müssen für jeden Knotenpunkt einzeln ausgewertet werden. Dabei wird der Strom immer so betrachtet, als ob er in den betrachteten Sektor fließen würde. Für den Quadranten, der die Probe beschreibt, ergeben sich diese Wärmeströme zu

5 Simulation des Aushärtevorgangs

$$\dot{Q}_{Sty1,Probe} = k_{Ersatz,R,Sty1} A_{M,n,E} \frac{T_{Sty1,w=1,n} - T_{M,n}}{\Delta r_{M,Sty1}} \quad (5.63)$$

$$\dot{Q}_{Sty2,Probe} = k_{Ersatz,R,Sty2} A_{m,n=1,S} \frac{T_{Sty2,m,U} - T_{m,n=1}}{\Delta y_{n=1,Sty2}} \quad (5.64)$$

Zwischen den Sektoren *Sty 1*, *Sty 2* und *Sty 3* muss keine Ersatzwärmeleitfähigkeit berücksichtigt werden, da es sich in der Realität um eine vollständige Struktur handelt. Somit lässt sich der Wärmestrom in dem Gebiet *Sty 1* darstellen als

$$\dot{Q}_{Probe,Sty1} = k_{Ersatz,R,Sty1} A_{w=1,n,W} \frac{T_{M,n} - T_{Sty1,w=1,n}}{\Delta r_{w=1,Probe}} \quad (5.65)$$

$$\dot{Q}_{Sty3,Sty1} = k_{Sty} A_{w,n=1,S} \frac{T_{Sty3,w,U} - T_{Sty1w,n=1}}{\Delta y_{n=1,Sty3}} \quad (5.66)$$

Die Wärmeströme der restlichen Quadranten lassen sich analog herleiten. Um die Temperaturen innerhalb der Sektoren berechnen zu können werden insgesamt vier Gleichungssysteme aufgestellt

$$\underline{(T^{p+1})} = [M]^{-1} (\underline{K^p}) \quad (5.67)$$

$$\underline{(T_{Sty1}^{p+1})} = [M_{Sty1}]^{-1} (\underline{K_{Sty1}^p})$$

$$\underline{(T_{Sty2}^{p+1})} = [M_{Sty2}]^{-1} (\underline{K_{Sty2}^p})$$

$$\underline{(T_{Sty3}^{p+1})} = [M_{Sty3}]^{-1} (\underline{K_{Sty3}^p})$$

Nachdem von einer adiabaten Mantelfläche des Styrodurs ausgegangen wird, tritt dort keine Konvektion auf. Die Bereiche *Sty 2* und *Sty 3* weisen somit nur Randbedingungen zweiter Art auf. Darüber hinaus sind alle Stoffgrößen des Styrodurs konstant. Das hat zur Folge, dass die Matrix M für diese Sektoren nicht von Zeit abhängig ist.

$$[M_{Sty2}] = [M_{Sty3}] = \text{konstant} \quad (5.68)$$

Es genügt somit die Matrix einmal aufzustellen und sie für jeden Zeitschritt wieder zu verwenden. Diese Tatsache bringt eine große Ersparnis an Rechenaufwand und Rechenzeit. Aus diesem Grund ist die gewählte Lösung besser als das gesamte Gebiet mit nur einem Gleichungssystem zu berechnen. Für die Quadranten *Sty 1* und *Probe* muss die Matrix weiterhin für jeden Zeitpunkt neu bestimmt werden. Dies liegt zum einen an der auftretenden Konvektion (Randbedingung dritter Art) und dem zeitlich veränderlichen Wärmeübergangskoeffizienten. Zum anderen führen die veränderlichen Stoffparameter des Knochenzements zu einer für jeden Zeitschritt unterschiedlichen Matrix M .

Die Berechnung kann noch weiter verbessert werden, indem eine einmalige LR-Zerlegung der Matrizen M_{Sty2} und M_{Sty3} vorgenommen wird.

$$\begin{aligned} [M_{Sty2}] &= [L_{Sty2}] [R_{Sty2}] \\ [M_{Sty3}] &= [L_{Sty3}] [R_{Sty3}] \end{aligned} \quad (5.69)$$

Die Matrizen werden dabei in eine rechts untere und eine links obere Dreiecksmatrix zerlegt. Somit ergibt sich unter Verwendung von (5.67)

$$\begin{aligned} (\underline{T}_{Sty2}^{p+1}) &= [L_{Sty2}]^{-1} ([R_{Sty2}]^{-1} (\underline{K}_{Sty2}^p)) \\ (\underline{T}_{Sty3}^{p+1}) &= [L_{Sty3}]^{-1} ([R_{Sty3}]^{-1} (\underline{K}_{Sty3}^p)) \end{aligned}$$

Durch die Besonderheiten der Matrizen [R] und [L] kann das so gewonnene Gleichungssystem durch Rückwärts-Einsetzen und Vorwärts-Einsetzen, wie im Gauß Verfahren verwendet, gelöst werden. Diese Vorgehensweise bringt eine weitere Verbesserung der Rechenzeit.

Da das zu berechnende Gebiet relativ groß und die Anzahl der Knotenpunkte dementsprechend hoch ist, kann ein optimiertes Gitter ebenfalls zur Laufzeitverbesserung führen. Das eigentliche Interesse der Simulation beschränkt sich auf die Probe. Die Berechnung des Temperaturfeldes innerhalb des Styrodurs ist zwar für die Randbedingung an der Probenmantelfläche wichtig, spielt aber für den Optimierungsvorgang der Wärmeleitfähigkeit keine Rolle. Das Gitter kann also in Richtung des Styrodurs mit zunehmender Entfernung zum Knochenzement ausgedünnt werden. Folgende Abbildung 5.15 stellt exemplarisch ein verwendetes Gitter dar. Dabei wurden die einzelnen Gitter der Sektoren zu einem gesamten Netz zusammengefügt. Es ist im Allgemeinen abhängig von der gewünschten Anzahl an Knotenpunkten innerhalb der Probe und den geometrischen Abmessungen. Der grün umrandete Bereich stellt das Gebiet des Knochenzements dar.

Abbildung 5.16 zeigt die Knotenpunkte an den Übergängen vom Knochenzement zu den Sektoren des Styrodurs. Der blaue Bereich symbolisiert den Quadranten der Probe. Die ursprünglichen Teilvolumen am Rand der Probe waren halbiert, beziehungsweise geviertelt. Um das Styrodur berücksichtigen zu können, wird der gesamte Teil des äußeren Kontrollvolumens dem Knochenzement zugesprochen. Der vorherige Rand der Probe (grau) verschiebt sich dadurch nach außen auf die blaue Linie. Die einzelnen Gitter werden so aufeinander abgestimmt, dass gilt

$$\begin{aligned} \Delta r_{M,Sty1} &= \Delta r_{m=M,w=1} = \Delta r_{M-1,M} \\ \Delta y_{n=1,Sty2} &= \Delta y_{n=1,u=U} = \Delta y_{n=1,n=2} \end{aligned} \quad (5.70)$$

5 Simulation des Aushärtvorgangs

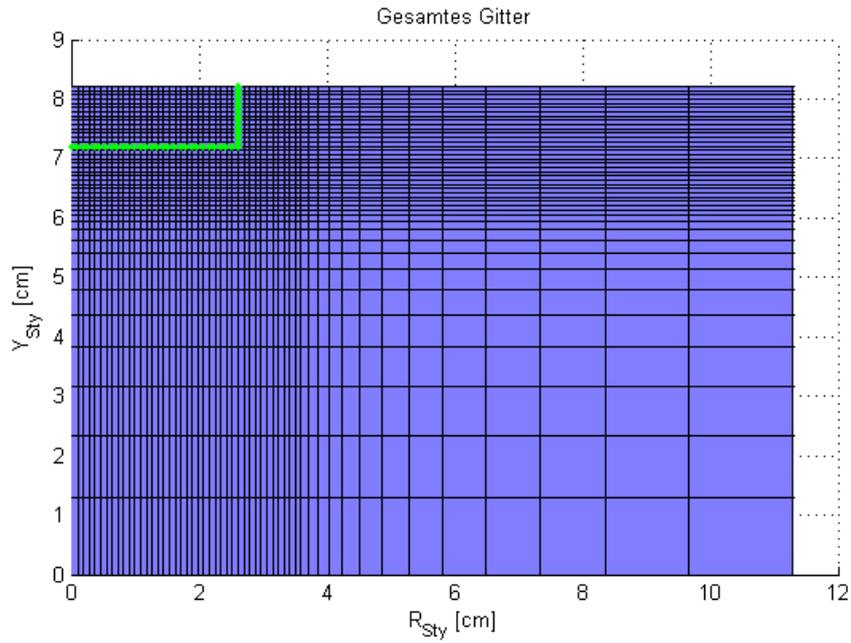


Abbildung 5.15: Darstellung des gesamten Gitters aller vier Quadranten

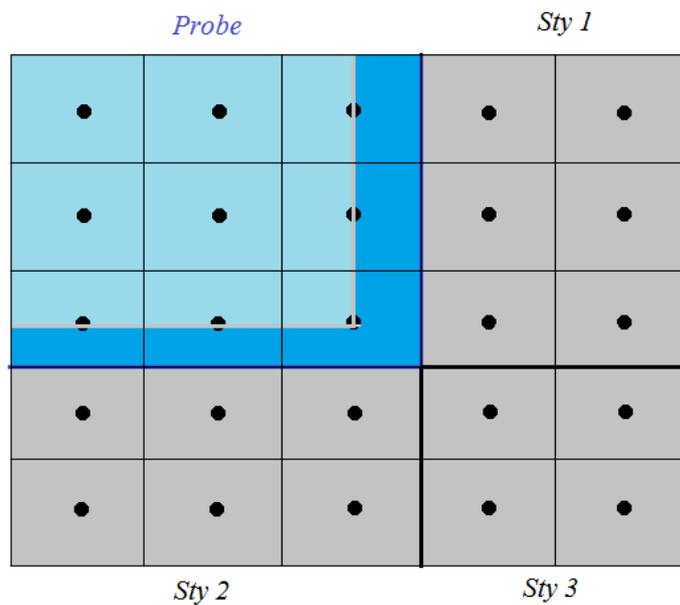


Abbildung 5.16: Knotenpunkte an den Übergängen der Quadranten

5.7 Validierung der Simulation

Um die richtige Implementierung der Berechnung in die Simulation beurteilen zu können, muss eine Validierung stattfinden. Durch sie wird belegt, dass die berechneten Ergebnisse unter den angenommenen Anfangs- und Randbedingungen realistisch sind.

Dazu soll ein Vergleich mit einer analytischen Lösung erfolgen und das gesamte Temperaturfeld auf Konsistenz geprüft werden.

Für einen halbseitig unendlich ausgedehnten Körper kann der instationäre Temperaturverlauf im eindimensionalen Fall analytisch berechnet werden. Bei einer Randbedingung dritter Art ergibt sich dieser nach [6] zu

$$T(x, t) = T_{\infty} + (T_{start} - T_{\infty}) [\operatorname{erf}(\mu) + e^{\gamma+2\sqrt{\gamma}\mu} \operatorname{erfc}(\sqrt{\gamma} + \mu)] \quad (5.71)$$

mit dem Gaußschen Fehlerintegral,

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}(\mu) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\mu} e^{-\zeta^2} d\zeta \\ \operatorname{erfc}(\mu) &= 1 - \operatorname{erf}(\mu) \end{aligned} \quad (5.72)$$

der dimensionslosen Orts-Zeit-Koordinate

$$\mu = \frac{x}{2 \sqrt{(t k) / (\rho c_p)}} \quad (5.73)$$

und der dimensionslosen Kenngröße

$$\gamma = \frac{t k}{\rho c_p} \left(\frac{\dot{h}_{horz}}{k} \right)^2 \quad (5.74)$$

Betrachtet man nur die Wandtemperatur über die Zeit, folgt aus (5.71)

$$T(x = 0, t) = T_{\infty} + (T_{start} - T_{\infty}) e^{\gamma} \operatorname{erfc}(\sqrt{\gamma}) \quad (5.75)$$

Das Modell des halbusendlichen Körpers ist für endlich ausgedehnte Körper als Näherungslösung für sehr kurze Zeiten anwendbar [6]. Das ausschlaggebende Kriterium ist dabei die Fourierzahl.

$$Fo = \frac{t k}{\rho c_p x^2} \ll 0.3 \quad (5.76)$$

Um die numerische Berechnung mit der analytischen Lösung vergleichen zu können, müssen allerdings die Stoffparameter konstant gehalten werden und es darf keine Energie durch die chemische Reaktion frei werden. Des Weiteren wird von adiabaten Rändern des Zylinders ausgegangen, um eine eindimensionale Wärmeleitung zu erhalten. Tabelle 5.1 zeigt die für den Vergleich verwendeten Stoffgrößen.

Bei einer Zeitspanne von $t = 600s$ und einem zylindrischen Stab mit einer Länge von $x = 10cm$, ergibt sich die Fourierzahl zu $Fo = 0.0096$. Die Bedingung für die Anwendbarkeit des analytischen Modells ist somit gegeben. Folgende Abbildungen stellen

5 Simulation des Aushärtevorgangs

konstante Stoffwerte	Wert
c_p	1180 J/(kgK)
ρ	1490 kg/m ³
k	0.28 W/(mK)
\bar{h}_{horz}	10 W/(m ² K)
dh	0 J/kg
q	0

Tabelle 5.1: Stoffparameter für analytische Berechnung der Oberflächentemperatur

den analytisch und numerisch ermittelten Temperaturverlauf an der Oberfläche dar. Darüber hinaus wird der Fehler der numerischen Berechnung veranschaulicht. Bei der Auftragung des Fehlers wurde das numerische Ergebnis von dem Analytischen abgezogen.

Sowohl beim Aufheizen, als auch beim Abkühlen des Knochenzements durch Konvektion, stimmt das numerische Ergebnis sehr gut mit den analytisch bestimmten Werten überein. In den Abbildungen 5.18 und 5.20 ist zu erkennen, dass der maximale Fehler zu Beginn der Berechnung auftritt und mit zunehmender Zeit geringer wird. Dieser ist abhängig von der Temperaturdifferenz $|T_{start} - T_{\infty}|$ und beträgt in dem betrachteten Beispiel ($T_{start} = 30^{\circ}C$, $T_{\infty} = 21^{\circ}C$), 0.2K. Die Ursache hierfür liegt in dem schlagartig einsetzenden Wärmestrom bei $t=0$. Die Eingangsfunktion entspricht daher einer Art Sprungfunktion. Die Sprungantwort kann erfahrungsgemäß nur schlecht modelliert werden. Der Fehler zu Beginn der Simulation wird sich somit bei einem langsam einsetzenden Wärmestrom verringern.

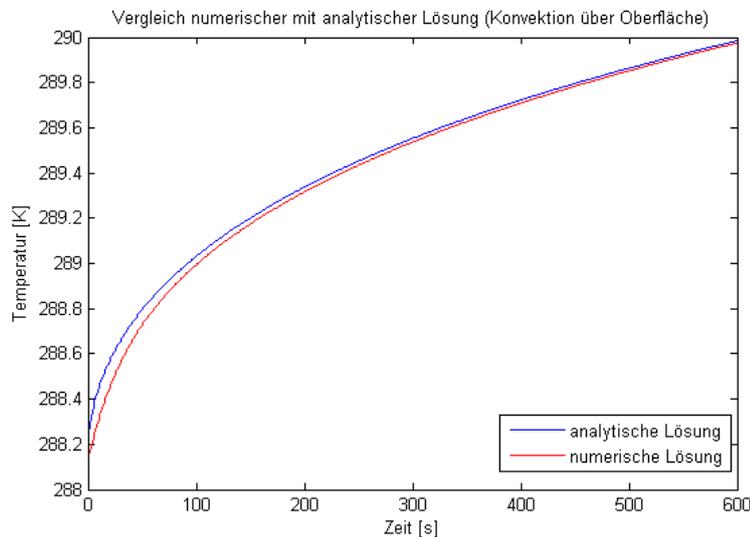


Abbildung 5.17: Vergleich der analytisch ermittelten mit der numerisch berechneten Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 15^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$

5 Simulation des Aushärtevorgangs

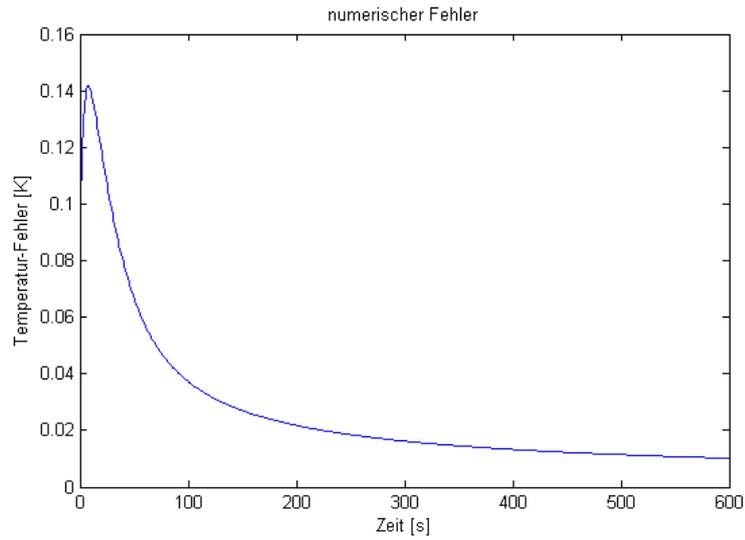


Abbildung 5.18: Fehler der numerischen Berechnung der Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 15^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$

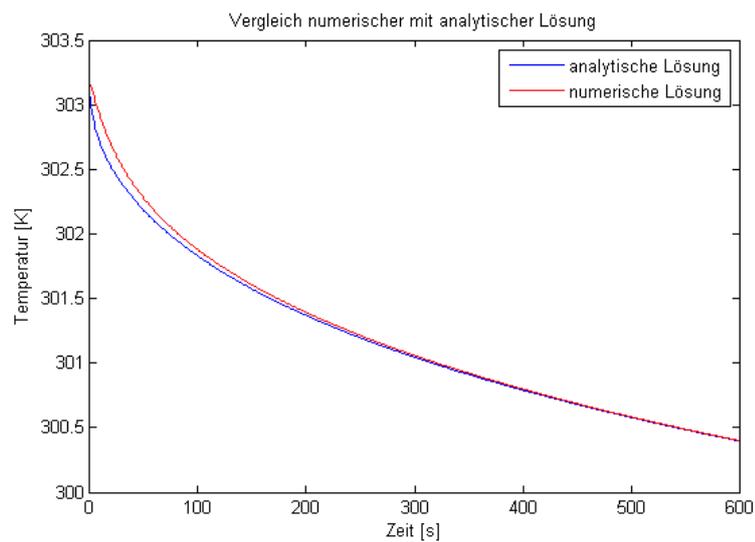


Abbildung 5.19: Vergleich der analytisch ermittelten mit der numerisch berechneten Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 30^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$

5 Simulation des Aushärtevorgangs

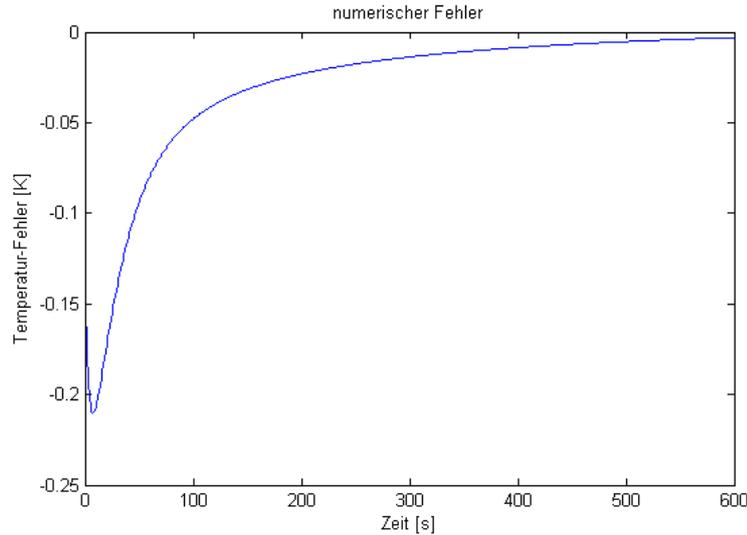


Abbildung 5.20: Fehler der numerischen Berechnung der Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 30^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$

Für die Validierung der Randbedingungen wird die Temperaturverteilung innerhalb des Materials betrachtet. Dabei wird die Polymerisation wieder zugelassen und sämtliche Stoffgrößen sind variabel. Die Isothermen müssen innerhalb eines Stoffes stetig sein und sollen konsistent zu den physikalischen Grundlagen der Wärmeübertragung verlaufen. In Fall 1 (adiabate Mantelfläche) ist zu erwarten, dass die Isothermen parallel zur Oberfläche verlaufen, da keine Temperaturdifferenzen in radialer Richtung auftreten. Fall 2 beschreibt eine Mantelfläche mit auftretender Konvektion. Die Temperatur des Materials muss sich daher auch vom Rand aus ändern und die Isothermen dürfen in der rechten oberen Ecke keinen Knick ergeben. Falls die Oberfläche identisch mit der Mantelfläche ist, ist davon auszugehen, dass die Abkühlung, beziehungsweise die Erwärmung der Probe, zu einem größeren Teil über die Mantelfläche geschieht. Bei der freien Konvektion ist der Wärmeübergang an einer vertikalen Oberfläche effektiver. In Fall 3 (Wärmestrom zwischen Probe und Styrodur) muss es aufgrund der unterschiedlichen Wärmeleitfähigkeiten von Knochenzement und Styrodur zu einem Knick der Isothermen an der Probenwand kommen. Des Weiteren müssen die Verläufe der Isothermen ohne Knick über den Rand der einzelnen Styrodurgebiete verlaufen.

Folgende Graphiken 5.21, 5.22, 5.23 und 5.24 stellen das Temperaturfeld jedes einzelnen Falls zum Zeitpunkt $t = 25min$ (1500s) dar. Die Probe befindet sich zu dieser Zeit bereits in der Abkühlphase. Die geometrischen Abmessungen und Anfangstemperaturen sind in Tabelle 5.2 ersichtlich.

5 Simulation des Aushärtvorgangs

Größe	Wert
r_{Probe}	2cm
R_{Sty}	8cm
y_{Probe}	2cm
Y_{Sty}	8cm
T_{Start}	21°C
T_{∞}	21°C

Tabelle 5.2: Abmessungen und Anfangstemperaturen für Validierungsbeispiel

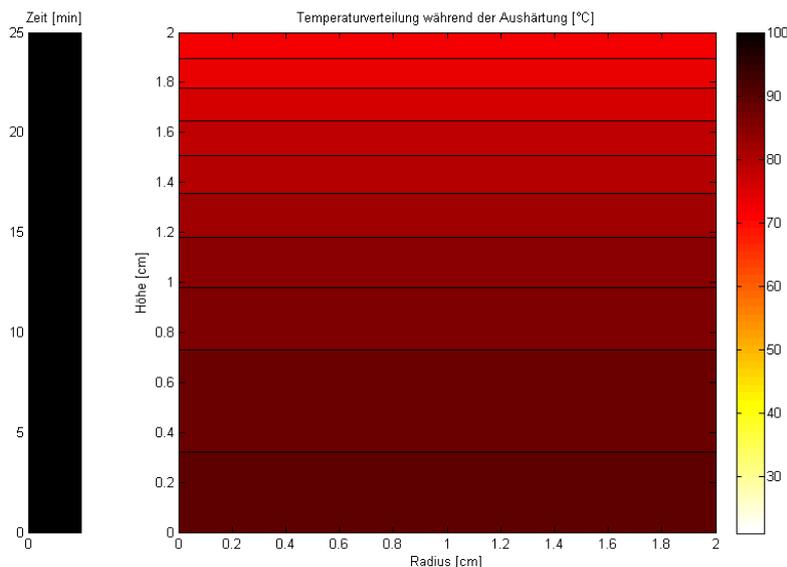


Abbildung 5.21: Temperaturverteilung [°C] zum Zeitpunkt $t = 25\text{min}$ in Fall 1

Für einen adiabaten Boden und eine adiabate Mantelfläche nach Fall 1 verlaufen alle Isothermen qualitativ korrekt. Nachdem sich die Probe in der Abkühlphase befindet, liegen am Probenboden höhere Temperaturen vor, als an der Oberfläche.

Für den Fall einer freien Konvektion an der Mantelfläche (Fall 2) ist in Abbildung 5.22 ein glatter und stetiger Verlauf der Isothermen zu erkennen. Es kommt zu keinem Knick in der rechten oberen Ecke und die Probe kühlt erwartungsgemäß über beide Flächen aus. Das Beispiel wurde so gewählt, dass die Oberfläche der Mantelfläche entspricht. Somit lässt sich eine stärkere Abkühlung des Materials über die Mantelfläche erkennen.

Graphik 5.23 veranschaulicht das Temperaturfeld von Probe und Styrodur. Die blauen Punkte sind die äußersten Knotenpunkte des Knochenzements und markieren daher den Übergang zwischen der Probe und dem Styrodur. Der Knick der Isothermen am Übergang der beiden Stoffe ist gut zu erkennen und ist ein Indiz dafür, dass die Ersatzwärmeleitfähigkeit zwischen den unterschiedlichen Materialien richtig modelliert wurde. Darüber hinaus kommt es zu einem glatten Verlauf der Isothermen zwischen den

5 Simulation des Aushärtvorgangs

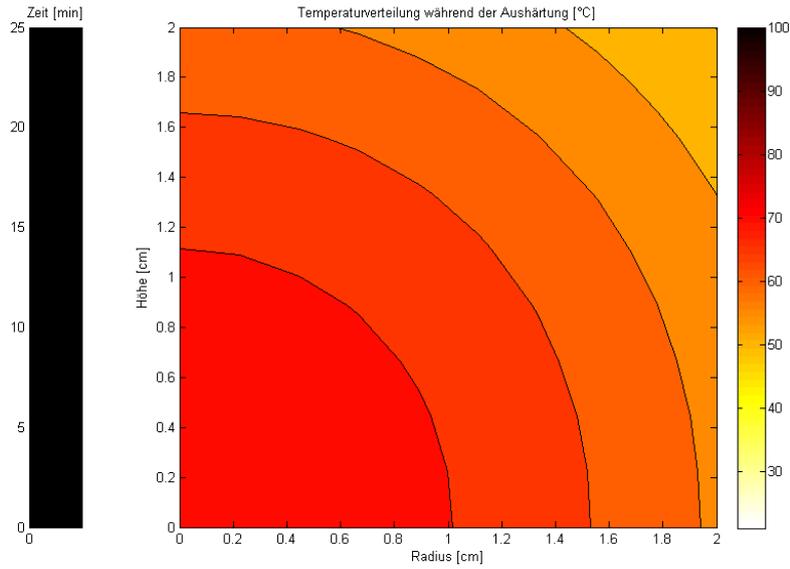


Abbildung 5.22: Temperaturverteilung [°C] zum Zeitpunkt $t = 25\text{min}$ in Fall 2

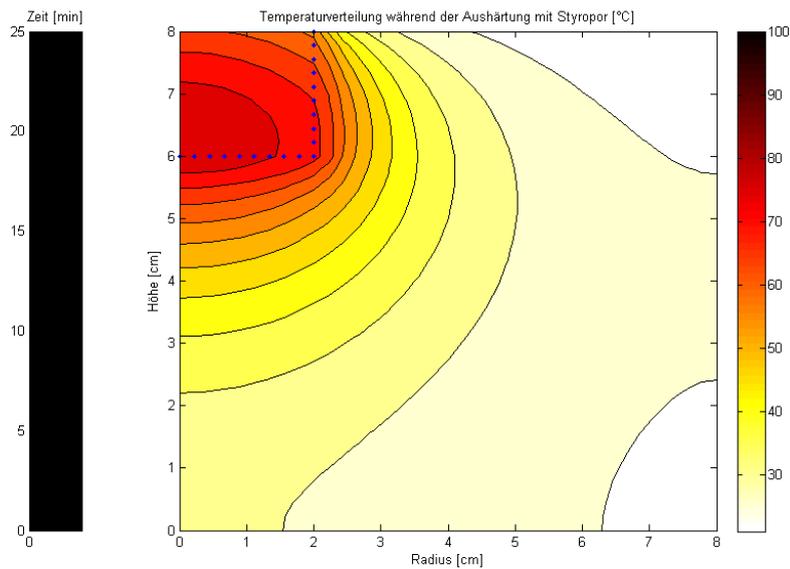


Abbildung 5.23: Temperaturverteilung [°C] zum Zeitpunkt $t = 25\text{min}$ in Fall 3 mit dem Kontaktwiderstand $R_{th,K} = 0\text{ K m}^2/\text{W}$

einzelnen Bereichen. Somit sind alle Gebiete richtig über den Wärmestrom als Randbedingung verknüpft. Durch den adiabaten Rand des Styrodurs kommt es zu veränderten Verläufen der äußeren Isothermen. Auch diese erscheinen korrekt. Auffallend ist aber die starke Erwärmung des Styrodurs, die so im Versuch nicht beobachtet wurde. Da dieser allerdings eine höhere Temperaturleitfähigkeit (nicht Wärmeleitfähigkeit!) als der Knochenzement aufweist und darüber hinaus der Kontaktwiderstand vernachlässigt

5 Simulation des Aushärtvorgangs

wurde, ist die große Eindringtiefe der Temperatur durchaus realistisch. Aufgrund dieses Ergebnisses lässt sich feststellen, dass der Kontaktwiderstand nicht vernachlässigt werden kann. In folgender Darstellung 5.24 wurde dieser auf $R_{th,K} = 0.1 \text{ K m}^2/\text{W}$ erhöht.

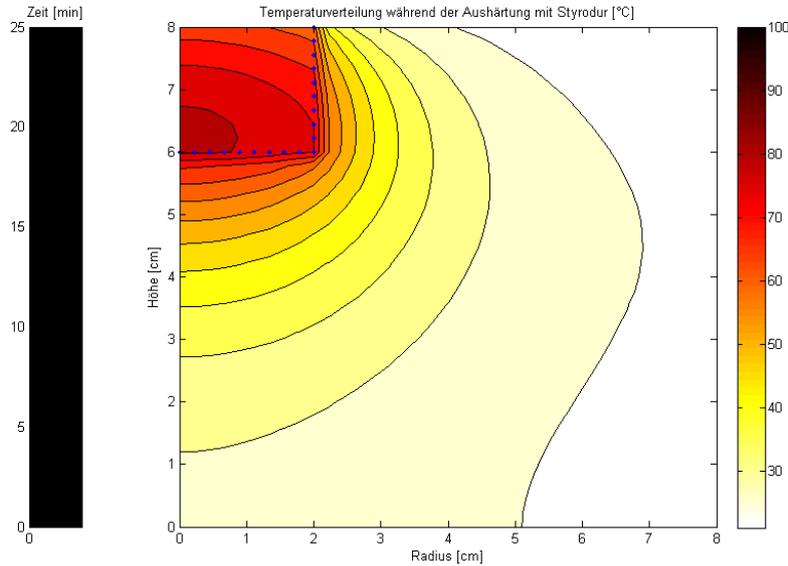


Abbildung 5.24: Temperaturverteilung [°C] zum Zeitpunkt $t = 25 \text{ min}$ in Fall 3 mit dem Kontaktwiderstand $R_{th,K} = 0.1 \text{ K m}^2/\text{W}$

Abbildung 5.24 zeigt, dass bereits eine kleine Erhöhung des Kontaktwiderstands zu einer deutlichen Verringerung der Eindringtiefe führt. Dieser Effekt spricht auch für eine richtige Implementierung des Übergangs zwischen dem Knochenzement und dem Styrodur.

Für die Validierung der reaktionskinetischen Größen sollen die dargestellten Verläufe in Kapitel 4 genügen. Diese entsprechen den physikalischen und chemischen Vorgaben. In Verbindung mit der analytischen Vergleichsrechnung und den plausiblen Temperaturfeldern, kann die Simulation als korrekt angesehen werden.

5.8 Ergebnisse der Simulation

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Simulation mit einer Wärmeleitfähigkeit nach (4.35) präsentiert. Die berechneten Temperaturverläufe über dem Radius ähneln dabei qualitativ den Gemessenen. Für eine weitere Auswertung wird exemplarisch ein Punkt an der Probenoberfläche $X = 0.5 r_{Probe}$ betrachtet. Die Anfangstemperatur und die geometrischen Größen beziehen sich bei der Berechnung auf die Daten aus Messung 3 (Tabelle 3.1 und 3.2).

Abbildung 5.25 zeigt den Temperaturverlauf am Punkt X bei unterschiedlichen Anfangstemperaturen. Bereits eine kleine Abweichung der Starttemperatur führt zu einer

5 Simulation des Aushärtevorgangs

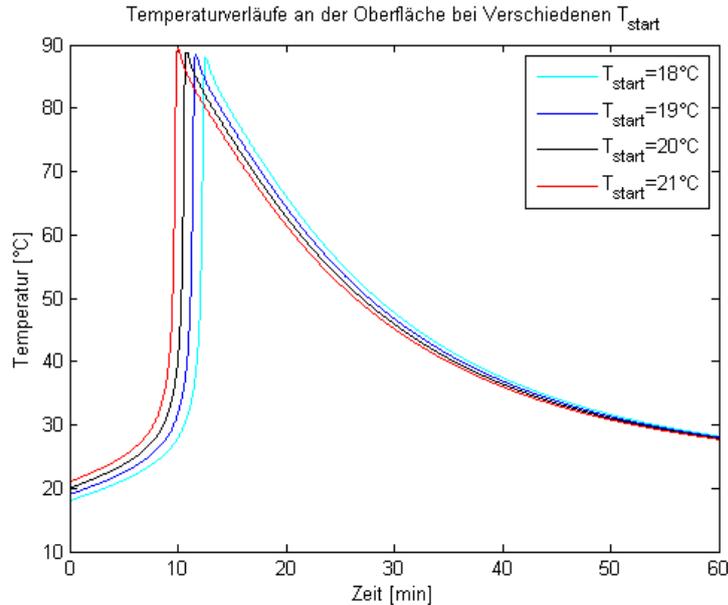


Abbildung 5.25: Abhängigkeit des Temperaturverlaufs von der Starttemperatur ($R_{th,K} = 0 \text{ Wm}^2/\text{K}$)

Veränderung des gesamten Temperaturverlaufs. Die Vergrößerung der Anfangstemperatur um 1°C führt zu einer zeitlichen Verschiebung des Aushärtevorgangs von etwa 1 min und zu einem geringfügigen Anstieg der Maximaltemperatur. Während des Abkühlvorgangs konvergieren die Verläufe allerdings wieder gegen den selben Wert.

In Graphik 5.26 ist die Abhängigkeit des Temperaturverlaufs vom Kontaktwiderstand dargestellt. Mit Hilfe der Simulation wurde ein maximaler Kontaktwiderstand von $R_{th,K,Max} = 5 \text{ Wm}^2/\text{K}$ ermittelt. Ab diesem Widerstand findet keine nennenswerte Wärmeübertragung in das Styrodur mehr statt. Die Versuche haben gezeigt, dass sich das Styrodur allerdings aufheizt. Unterhalb der Probe erreicht es sogar Temperaturen oberhalb dessen Temperaturbeständigkeit von etwa 85°C [7]. Durch die starke Erwärmung löst sich die Struktur des Styrodurs teilweise auf. Somit muss ein großer Teil der entstehenden Wärme in das Styrodur eindringen. Der Kontaktwiderstand liegt daher unterhalb $R_{th,K,Max}$.

$$0 \frac{\text{Wm}^2}{\text{K}} < R_{th,K} < 5 \frac{\text{Wm}^2}{\text{K}} \quad (5.77)$$

Auf den Temperaturverlauf während der Aushärtung, hat der Kontaktwiderstand einen zu vernachlässigenden Einfluss. Erst in der Abkühlphase des Knochenzements machen sich Unterschiede im Widerstand bemerkbar. Der maximale Temperaturunterschied im definierten Bereich des Kontaktwiderstands beträgt etwa 10°C .

Während der Polymerisation kommt es zu einer chemischen Schrumpfung des Materials. Dies hat zur Folge, dass die Probe in der Abkühlphase keinen Kontakt mehr zum

5 Simulation des Aushärtvorgangs

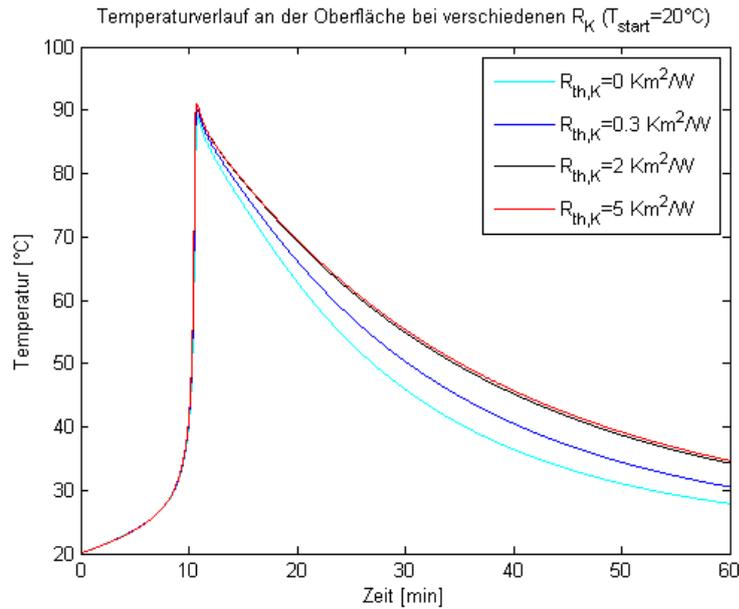


Abbildung 5.26: Abhängigkeit des Temperaturverlaufs vom Kontaktwiderstand ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$)

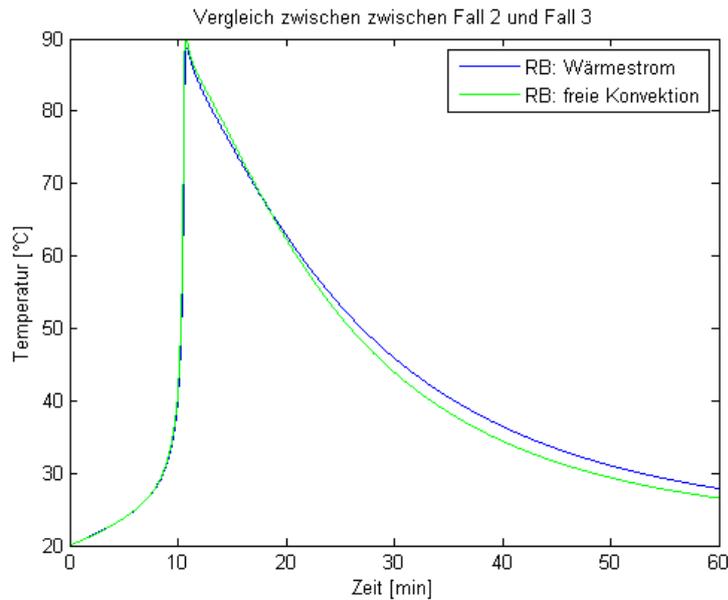


Abbildung 5.27: Abhängigkeit des Temperaturverlaufs von der Randbedingung an der Mantelfläche ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$)

Styrodur hat und sich ein deutlich erkennbarer Zwischenraum ausbildet. Vernachlässigt man die Schutzfolie, kann in diesem Fall von einer freien Randkonvektion ausgegangen werden. Die Simulation berücksichtigt diese Veränderung der Randbedingung allerdings nicht. Um den so entstehenden Fehler beurteilen zu können, werden die Temperaturverläufe der unterschiedlichen Randbedingungen miteinander verglichen (Fall 2 und

Fall 3). Abbildung 5.27 veranschaulicht diesen Vergleich. Auf den Aushärtevorgang hat die veränderte Randbedingung nahezu keinen Einfluss. Der entstehende Fehler beschränkt sich auf den Abkühlvorgang der Probe. Im Fall der freien Konvektion wird mehr Wärme an die Umgebung abgegeben und das Material kühlt schneller aus. Die so entstehende Temperaturabweichung beträgt allerdings nur 2°C .

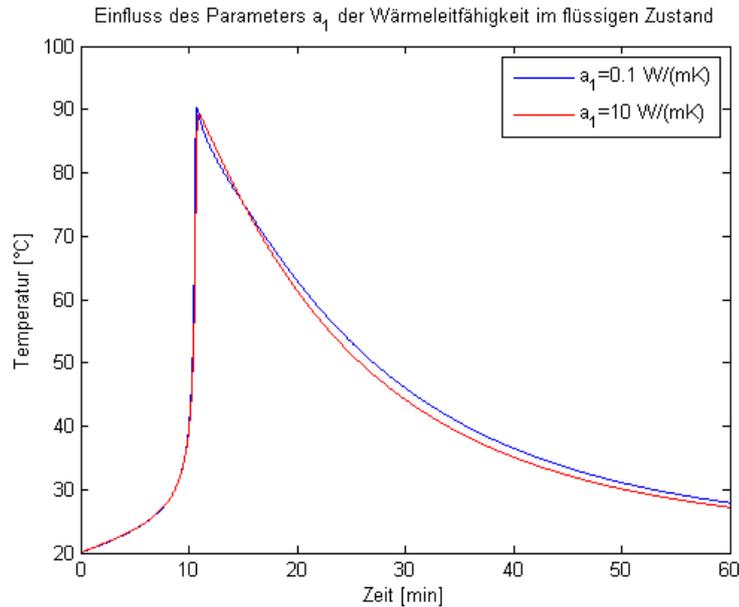


Abbildung 5.28: Einfluss des Parameters a_1 der Wärmeleitfähigkeit auf den Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^{\circ}\text{C}$, $R_{th,K} = 0 \text{ W m}^2/\text{K}$)

In Abbildung 5.28 ist der Einfluss des Parameters a_1 der Wärmeleitfähigkeit veranschaulicht. Dieser wurde dabei zwischen $0.1 \text{ W}/(\text{mK})$ und $10 \text{ W}/(\text{mK})$ variiert. Trotz der starken Änderung kommt es nur zu einem geringen Unterschied der Oberflächentemperatur. Während der Aushärtung kommt es durch den chemischen Prozess zu einer hohen Energiefreisetzung innerhalb kurzer Zeit. Für den Fall, dass keine Wärme aus dem Knochenzement abfließen kann, würde die Probe homogen aushärten und es würden keine Temperaturdifferenzen innerhalb der Probe existieren. Die inhomogene Temperaturverteilung, und damit die Wärmeleitung innerhalb des Materials, entsteht somit nur durch Konvektion und Konduktion an den Rändern. Der so zu stande kommende Wärmestrom bewirkt aufgrund der geringen Temperaturdifferenzen und der niedrigen Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements allerdings nur verhältnismäßig kleine Temperaturänderung innerhalb der Probe. Die Änderung der Temperatur durch die Polymerisation des Materials ist aber wesentlich größer und erfolgt um ein Vielfaches schneller. Aus diesem Grund ist der Einfluss der Wärmeleitfähigkeit während der Aushärtung sehr gering. Erst in der Abkühlphase, wenn der chemische Prozess beendet ist, ist die Wärmeleitung innerhalb der Probe ausschlaggebend. Da zu diesem Zeitpunkt der Polymerisationsgrad seinen Endwert bereits erreicht hat ($q_{end} = 0.94$), verliert der Parameter a_1 stark an Bedeutung. Daher haben auch große Änderungen

5 Simulation des Aushärtvorgangs

diese Parameters nur einen kleinen Einfluss auf den Abkühlvorgang.

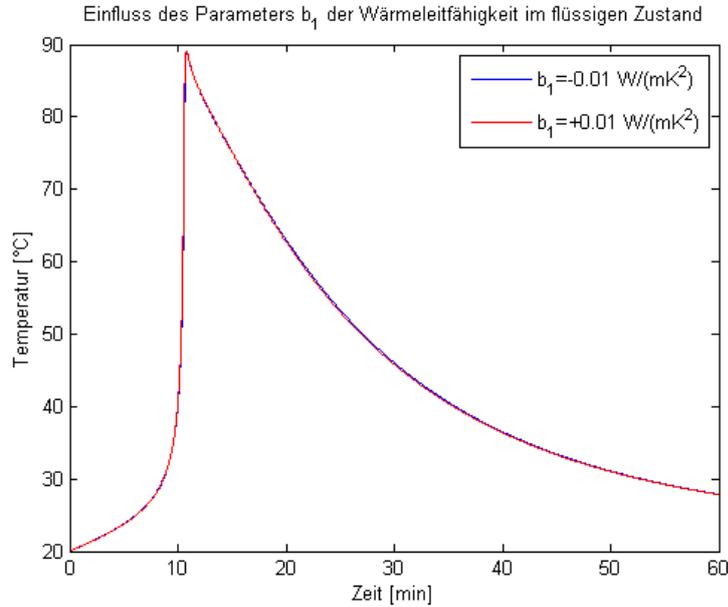


Abbildung 5.29: Einfluss des Parameters b_1 der Wärmeleitfähigkeit auf den Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^\circ\text{C}$, $R_{th,K} = 0 \text{ Wm}^2/\text{K}$)

Der Parameter b_1 weist, wie in Graphik 5.29 dargestellt, einen noch geringeren Einfluss auf den Temperaturverlauf auf. Hier wurde der Wert zwischen $-0.01 \text{ Wm}^2/\text{K}$ und $+0.01 \text{ Wm}^2/\text{K}$ variiert. Aufgrund der bereits genannten Effekte und der äußerst geringen Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Temperatur, ist keine Auswirkung dieses Parameters auf die Oberflächentemperatur zu erkennen.

Folgende Abbildungen 5.30 und 5.31 stellen die Temperaturverteilung innerhalb der Probe während der Polymerisation exemplarisch dar. Zum Zeitpunkt $t = 10 \text{ min}$ beginnt der starke Temperaturanstieg im Knochenzement durch den chemischen Prozess. Dieser erreicht etwa zur Zeit $t = 11 \text{ min}$ seinen Höhepunkt. In beiden Graphiken ist zu sehen, dass zwar eine inhomogene Temperaturverteilung vorliegt, die auftretenden Temperaturdifferenzen aber relativ klein sind. Auch bei einer sehr hohen Wärmeleitfähigkeit würde es somit innerhalb des kurzen Zeitraums der Aushärtung nur zu einem geringen, durch Wärmeleitung induzierten, Wärmestrom kommen.

5 Simulation des Aushärtevorgangs

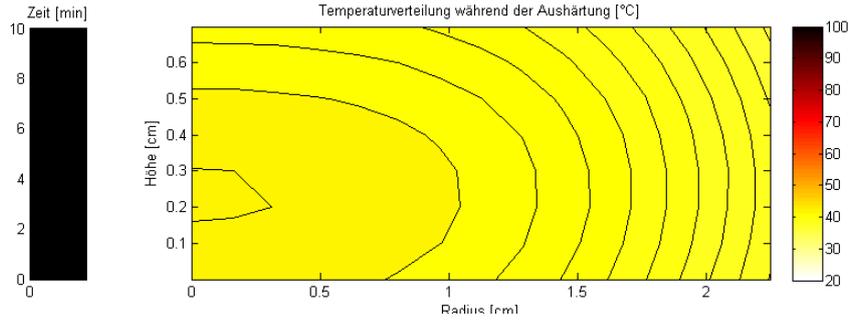


Abbildung 5.30: Temperaturverteilung innerhalb der Probe zum Zeitpunkt $t = 10\text{min}$
 $(T_{\text{start}} = 21.5^\circ\text{C}, R_{\text{th},K} = 0\text{ Wm}^2/\text{K})$

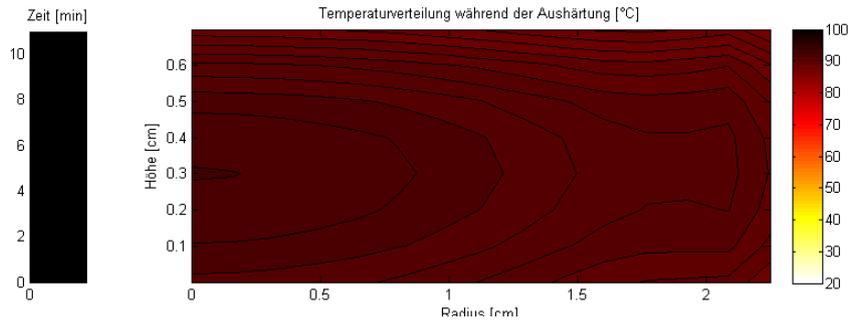


Abbildung 5.31: Temperaturverteilung innerhalb der Probe zum Zeitpunkt $t = 11\text{min}$
 $(T_{\text{start}} = 21.5^\circ\text{C}, R_{\text{th},K} = 0\text{ Wm}^2/\text{K})$

Mit Hilfe der errechneten Temperaturverteilung ist es nun möglich die einzelnen Stoffgrößen des Klebers in Abhängigkeit von Polymerisationsgrad und Temperatur darzustellen. In Kapitel 4 wurden diese Größen nur unter isothermen Bedingungen betrachtet. Um den tatsächlichen Verlauf vom Aushärtegrad, Dichte und spezifischer Wärmekapazität zu verdeutlichen, werden diese Parameter während des Aushärtevorgangs in den folgenden Abbildungen veranschaulicht. Dabei wird wieder der exemplarische Punkt $X = 0.5 r_{\text{Probe}}$ an der Probenoberfläche betrachtet. Die geometrischen Größen beziehen sich auf Messung 3.

Im Vergleich zum isothermen Prozess, wird in der Realität ein höherer Aushärtegrad erreicht. Aufgrund des starken Temperaturanstieges innerhalb der Probe, kommt es auch zu einem größeren maximalen Polymerisationsgrad. Der Unterschied zur isothermen Aushärtung beträgt $\Delta q = 0.16$. Der Beginn der Polymerisation findet davon unbeeinträchtigt zur selben Zeit statt.

Der Verlauf der spezifischen Wärmekapazität bei variabler Temperatur (Abb. 5.33) unterscheidet sich stark von dem einer isothermen Prozessführung. Es bildet sich während der Aushärtung ein Maximum aus. Der Zeitpunkt dieses Peaks fällt mit dem Zeitpunkt der maximalen Temperatur zusammen. Obwohl der steigende Polymerisationsgrad eine Verkleinerung der spezifischen Wärmekapazität hervorruft, überwiegt kurzzeitig die Vergrößerung durch die hohe Temperatur. Nachdem die Probe abgekühlt ist, fällt die spezifische Wärmekapazität auf einen niedrigeren Wert, als vor der Polymerisation. Global betrachtet, führt der Aushärtevorgang, ebenso wie der isotherme Prozess, zu

5 Simulation des Aushärtevorgangs

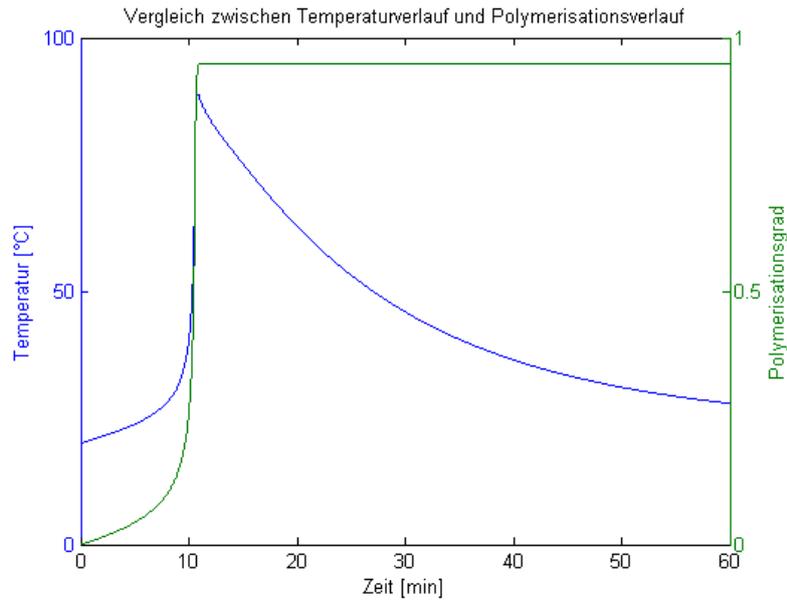


Abbildung 5.32: Verlauf des Polymerisationsgrades und der Temperatur während des Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^\circ C$, $R_{th,K} = 0 \text{ Wm}^2/K$)

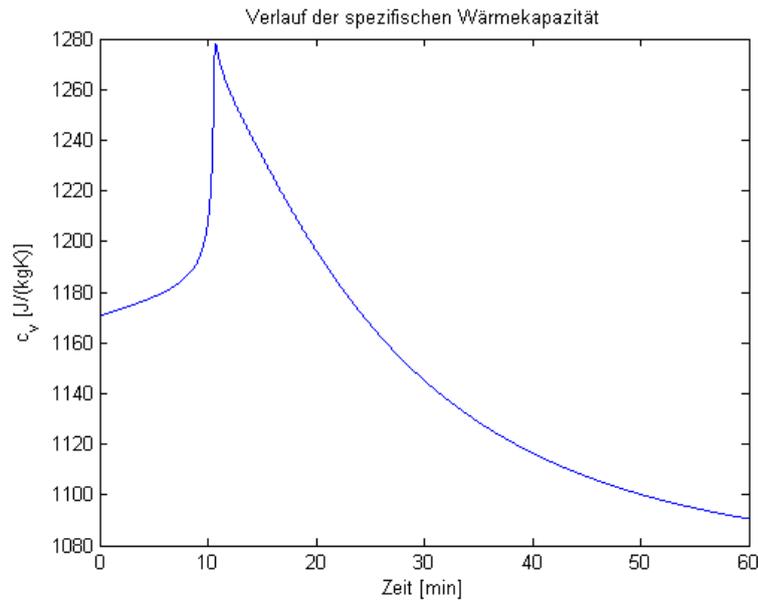


Abbildung 5.33: Verlauf der spezifischen Wärmekapazität während der Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^\circ C$, $R_{th,K} = 0 \text{ Wm}^2/K$)

einer Verkleinerung der Wärmekapazität.

Qualitativ betrachtet ähnelt der Verlauf der Dichte aus Abbildung 5.34 dem einer isothermen Aushärtung. Die gleichzeitige Erhöhung der Temperatur und des Aushärtegrades führen allerdings zu einer großen Steigung zu Beginn der Polymerisation.

5 Simulation des Aushärtevorgangs

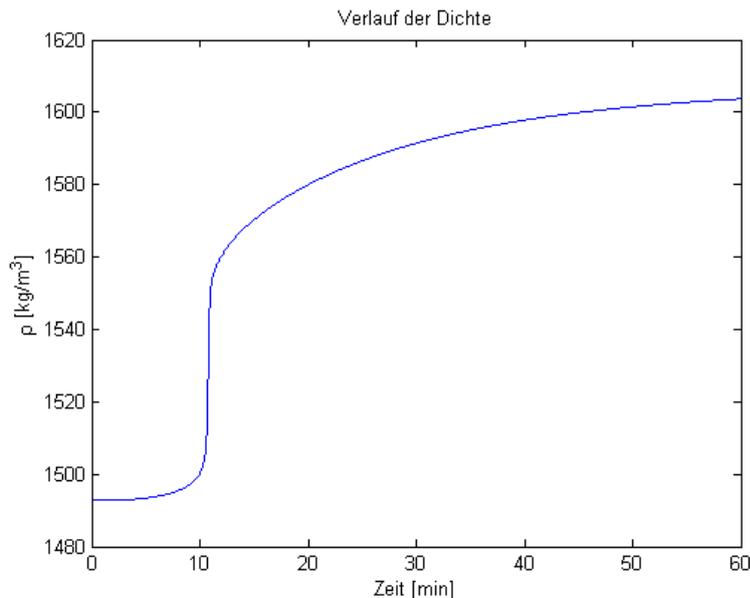


Abbildung 5.34: Verlauf der Dichte während des Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)

Ein großer Teil der Wärmeenergie des Knochenzements wird über die Probenoberfläche, durch freie Konvektion, an die Luft abgegeben. Diese Eigenschaft ist in den bereits dargestellten Temperaturverteilungen im Material zu erkennen (siehe Abb. 5.23 und Abb. 5.31). Ausschlaggebend für diese Energieabgabe ist der Wärmeübergangskoeffizient. Dieser war vor der Simulation unbekannt. Folgende Graphik 5.35 zeigt den Verlauf des Koeffizienten während des Aushärtevorgangs. Darüber hinaus ist die Rayleighzahl aufgetragen.

In den ersten drei Minuten sinkt der Wärmeübergangskoeffizient aufgrund der geringer werdenden Temperaturdifferenz. Die Probe erwärmt sich in dieser Zeit auf Umgebungstemperatur. Hat der Knochenzement Umgebungstemperatur erreicht, fällt die Rayleighzahl und damit der Wärmeübergangskoeffizient auf 0. Da dieser Zeitpunkt aufgrund der hier gewählten zeitlichen Diskretisierung übersprungen wird, erreicht der Wert den Nullpunkt nicht. In den ersten fünf Minuten des Aushärtevorgangs liegt die Rayleighzahl unterhalb des für die empirische Formeln zulässigen Bereichs. Somit gelten in diesem Zeitraum die verwendeten Beziehungen für den Wärmeübergangskoeffizienten nicht. Der daraus entstehende Fehler ist unbekannt. Der Wärmeübergangskoeffizient des restlichen Aushärtevorgangs kann allerdings mit Hilfe der empirischen Gleichungen bestimmt werden. Im Falle von Messung 3 erreicht er einen Maximalwert von etwa $9 W/(m^2K)$ und sinkt im Laufe der Abkühlphase auf $5 W/(m^2K)$ ab.

Betrachtet man die Temperaturverläufe aus Abbildung 5.25 fällt auf, dass die berechneten Maximalwerte unterhalb der gemessenen Spitzentemperatur liegen. In Messung 3 wird eine maximale Temperatur von $100^{\circ}C$ erreicht. Die Simulation ergibt allerdings nur eine Temperatur von $90^{\circ}C$. Es liegt die Vermutung nahe, dass dieser Fehler auf-

5 Simulation des Aushärtevorgangs

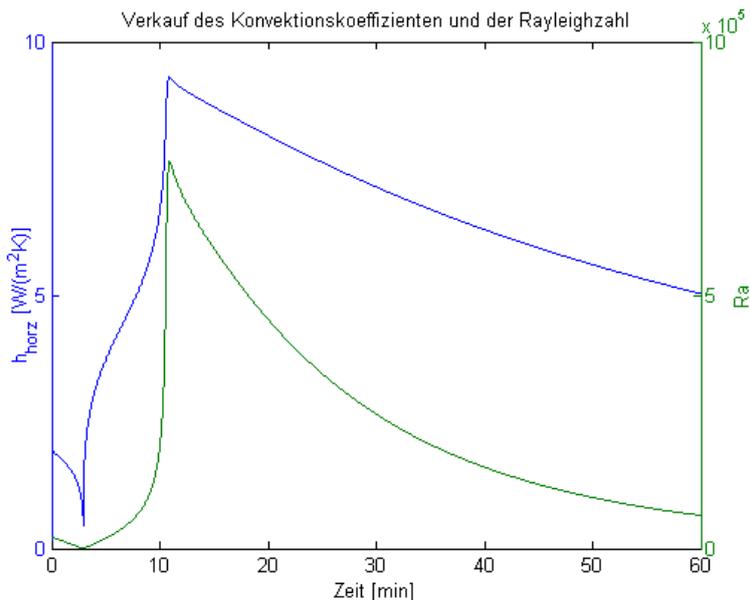


Abbildung 5.35: Verlauf des Konvektionskoeffizienten an der Probenoberfläche während des Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^\circ C$, $R_{th,K} = 0 W m^2 / K$)

grund der ungenauen oder teilweise unbekanntem Randbedingungen zustande kommt. Eine höhere Anfangstemperatur und ein höherer Kontaktwiderstand würden zum Beispiel eine Vergrößerung der Maximaltemperatur bewirken. Auch ein möglicherweise ungenauer Wärmeübergangskoeffizient beeinflusst den Temperaturverlauf. In folgender Abbildung 5.36 wird der Temperaturverlauf, bei einer vollständig adiabaten Umgebung, mit dem Verlauf aus Messung 3 verglichen.

Obwohl die Simulation so ausgelegt wurde, dass keine Wärmeenergie von dem Material abgegeben werden kann, wird dennoch eine niedrigere Maximaltemperatur berechnet. Die Differenz der Maximalwerte beträgt $2^\circ C$. Die ungenauen Randbedingungen können somit nicht die alleinige Ursache dieser Unterschätzung sein. Es liegt die Vermutung nahe, dass die Enthalpiedifferenz $|h_{fest,0} - h_{flüssig,0}|$, welche für die freigesetzte Energie maßgebend ist, zu niedrig abgeschätzt wurde (vgl. Kapitel 4.2). Eine Erhöhung dieses Wertes führt zu einer früher beginnenden Polymerisation und zu größeren Spitzentemperaturen.

Abbildung 5.37 verdeutlicht die Abhängigkeit des Temperaturverlaufs von der Enthalpiedifferenz. Um mit der Simulation die selbe Spitzentemperatur zu erreichen, wie sie in Messung 3 vorliegt, ist eine Differenz von $112 J/g$ nötig. Dieser Wert unterscheidet sich aber bei den einzelnen Messungen. Unter der Voraussetzung, dass die Randbedingungen korrekt sind, kann er allgemein abgeschätzt werden mit

$$110 \frac{J}{g} \leq |h_{fest,0} - h_{flüssig,0}| \leq 115 \frac{J}{g} \quad (5.78)$$

5 Simulation des Aushärtevorgangs

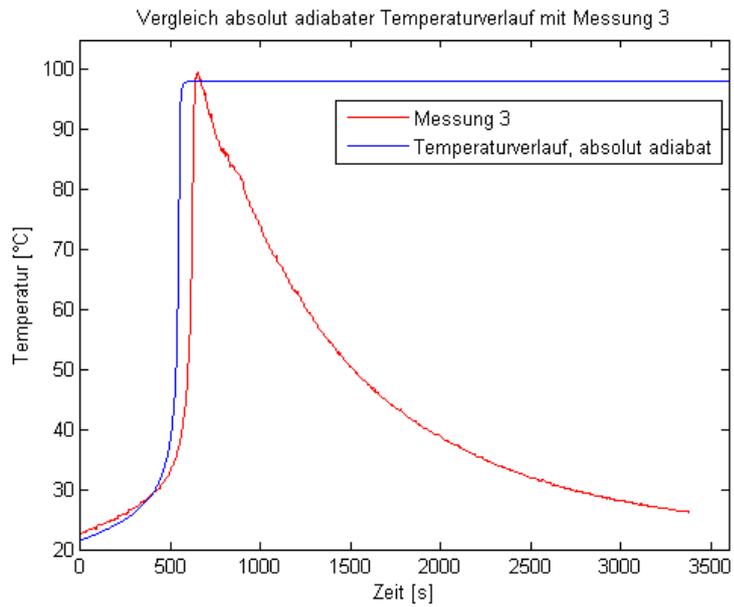


Abbildung 5.36: Vergleich von Messung 3 mit absolut adiabaten Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$)

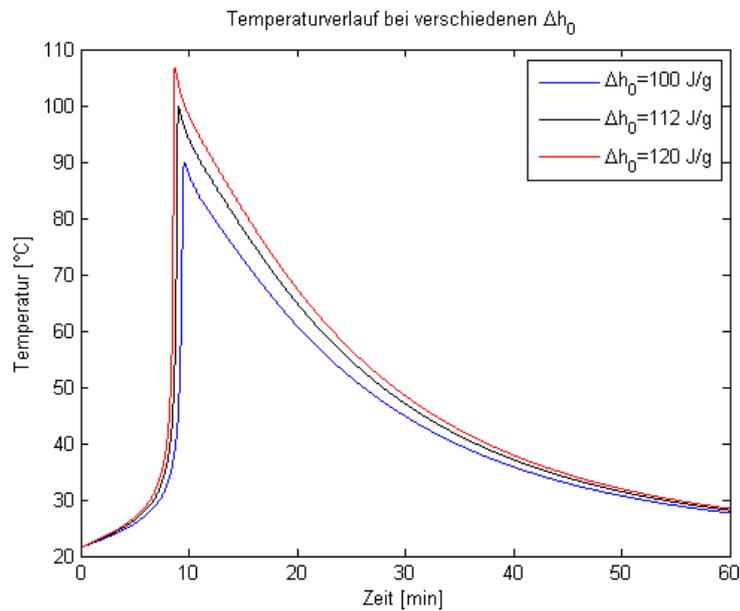


Abbildung 5.37: Einfluss der Enthalpiedifferenz $|h_{fest,0} - h_{flüssig,0}|$ auf den Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 \text{ Wm}^2/K$)

6 Inverse Methode zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Die Parameter a_1 und b_1 der Wärmeleitfähigkeit nach 4.32 sollen mit Hilfe einer inversen Methode numerisch bestimmt werden. Da die gesamte Temperaturverteilung innerhalb der Probe während der Aushärtung unbekannt ist, kann die Wärmeleitfähigkeit nicht berechnet werden. Eine inverse Berechnung setzt eine bekannte Temperatur an jedem Knotenpunkt und zu jedem Zeitpunkt voraus. Der Versuch liefert allerdings nur Temperaturdaten von der Probenoberfläche. Aufgrund des Quellterms und den veränderlichen Stoffparametern sind Rückschlüsse von der Oberflächentemperatur auf die innere Temperaturverteilung nicht möglich. Anstatt die Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements direkt zu berechnen, wird versucht, die Parameter der entsprechenden Gleichung so anzupassen, dass der berechnete Verlauf der Oberflächentemperatur dem gemessenen Temperaturverlauf entspricht. Somit entsteht ein Optimierungsproblem für die unbekannten Parameter.

6.1 Optimierungsproblem

Die Anpassung der Parameter erfolgt über die Minimierung einer vorgegebenen Fehlerfunktion F .

$$F = \sum_{p=0}^Z \sum_{m=0}^M (T_{Messung}^p - T_{Simulation,m,N}^p(a_1, b_1))^2 \quad (6.1)$$

Der Temperaturunterschied zwischen der Simulation und der Messung stellt die Abweichung der Verläufe dar. Die Quadrierung dieser Differenz führt zu einer stärkeren Gewichtung von großen Abweichungen. Für die optimalen Parameter a_1 und b_1 besitzt die Fehlerfunktion ein globales Minimum.

$$F(a_{1,optimal}, b_{1,optimal}) = \min(F) \quad (6.2)$$

Im besten Fall erreicht das Minimum den Wert 0. Diese Vorgehensweise nennt man auch "Lösen eines Optimierungsproblems" mit den variablen Parametern als Zielgrößen.

Bei diesem Verfahren müssen obere und untere Grenzen für die Zielgrößen eingeführt werden.

$$\begin{aligned} a_{1,min} &\leq a_1 \leq a_{1,max} \\ b_{1,min} &\leq b_1 \leq b_{1,max} \end{aligned} \quad (6.3)$$

Der so aufgespannte Bereich definiert die zulässige Menge der Optimierungsaufgabe. Sie beschreibt den Definitionsbereich der Fehlerfunktion. Jede zulässige Kombination von Zielgrößen führt zu einer eindeutigen Temperaturverteilung und somit zu einem eindeutig zuweisbaren Fehler. Innerhalb dieser Menge existiert mindestens ein lokales Minimum der Fehlerfunktion. Falls es sich dabei um ein Randextremum handelt, muss der zulässige Bereich erweitert oder verändert werden. Ein Minimum am Rand des zulässigen Bereichs bedeutet, dass es andere Kombinationen der Parameter gibt, die zwar einen niedrigeren Fehler aufweisen, aber nicht innerhalb der vorgegebenen Grenzen liegen.

Um ein lokales Minimum zu finden, wird ausgehend von einer Startkombination die Abweichung des berechneten Verlaufs von dem gemessenen Verlauf mit Hilfe der Fehlerfunktion ermittelt. Anschließend erfolgt dasselbe für die umliegenden Kombinationen. Aus den so ermittelten Werten für die Fehler, kann die Richtung der betragsmäßig größten negativen Steigung bestimmt werden. Die Zielgrößen werden daraufhin dementsprechend geändert und das Umfeld der neuen Kombination berechnet. Diese Schritte wiederholen sich so lange, bis keine negativen Gradienten mehr auftreten. Die so gefundene Kombination an Parametern ergibt ein lokales Minimum der Fehlerfunktion. Allerdings kann mathematisch nicht davon ausgegangen werden, dass es sich dabei auch um ein globales Minimum handelt. Da nicht davon auszugehen ist, dass es nur ein Minimum gibt, muss der Optimierungsvorgang für andere Startkombinationen wiederholt werden. Ein lokales Minimum kann beispielsweise auch durch numerische Rundungsfehler entstehen. Der Algorithmus unterscheidet dabei nicht zwischen lokalen Minima in der Fehlerfunktion und künstlich erzeugten Minima. Die gefundene Lösung ist somit abhängig von den gewählten Startwerten.

Alternativ zum Gradienten-Verfahren kann das Minimum der Fehlerfunktion auch mit einer Fehlermatrix $[F_K]$ bestimmt werden. Diese Matrix enthält die Werte der Fehlerfunktion für alle Kombinationen der Zielgrößen innerhalb ihrer Grenzen. Dazu müssen die Schrittweiten s_{a_1} und s_{b_1} vorgegeben werden. Die Schrittweiten diskretisieren den zulässigen Bereich und legen die numerische Genauigkeit der Berechnung fest. Die Anzahl an möglichen Kombinationen Z_K der gesuchten Zielgrößen ist somit begrenzt und berechnet sich aus

$$Z_K = Z_{K,a_1} \cdot Z_{K,b_1} \tag{6.4}$$

mit $Z_{K,a_1} = \text{floor} \left(\frac{a_{1,max} - a_{1,min}}{s_{a_1}} \right)$

$$Z_{K,b_1} = \text{floor} \left(\frac{b_{1,max} - b_{1,min}}{s_{b_1}} \right)$$

$$[F_K] = \begin{bmatrix} F(a_{1,min}, b_{1,min}) & F(a_{1,min} + s_{a_1}, b_{1,min}) & \dots & F(a_{1,max}, b_{1,min}) \\ F(a_{1,min}, b_{1,min} + s_{b_1}) & F(a_{1,min} + s_{a_1}, b_{1,min} + s_{b_1}) & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ F(a_{1,min}, b_{1,max}) & \dots & \dots & F(a_{1,max}, b_{1,max}) \end{bmatrix} \quad (6.5)$$

mit $[F_K] \in \mathbb{R}^{Z_{K,b_1} \times Z_{K,a_1}}$

Das Minimum der Fehlerfunktion ist das kleinste Element der Matrix $[F_K]$. Um die dazugehörigen Größen $a_{1,optimal}$ und $b_{1,optimal}$ zu finden, wird zusätzlich zur Fehlermatrix eine Zielgrößenmatrix $[Z_M]$ aufgestellt. Diese beinhaltet die zu den Fehlerfunktionswerten gehörenden Kombinationen von a_1 und b_1 .

$$[Z_M] = \begin{bmatrix} [a_{1,min}, b_{1,min}] & [(a_{1,min} + s_{a_1}, b_{1,min})] & \dots & [a_{1,max}, b_{1,min}] \\ [a_{1,min}, b_{1,min} + s_{b_1}] & [a_{1,min} + s_{a_1}, b_{1,min} + s_{b_1}] & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ [a_{1,min}, b_{1,max}] & \dots & \dots & [a_{1,max}, b_{1,max}] \end{bmatrix} \quad (6.6)$$

mit $[Z_M] \in \mathbb{R}^{Z_{K,b_1} \times Z_{K,a_1}}$

Über einen Vergleich der beiden Matrizen $[F_K]$ und $[Z_M]$ lassen sich die Zielgrößen bestimmen. Die Indizes (i, j) des minimalen Fehlers entsprechen den Indizes der optimalen Parameterkombination.

$$F_{min, i, j} = \min([F_K]) \quad (6.7)$$

$$[a_{1,optimal}, b_{1,optimal}] = F_K(i, j)$$

Im Vergleich zum beschriebenen Gradienten-Verfahren erfordert das Lösen des Optimierungsproblems mit einer Fehlermatrix einen höheren Rechenaufwand. Dieser ist proportional zur Anzahl der möglichen Kombinationen Z_K . Der gefundenen minimale Fehlerfunktionswert entspricht allerdings dem globalen Minimum des zulässigen Bereichs. Die Lösung ist somit nicht mehr von den Startwerten abhängig und die Optimierung muss nur einmal durchgeführt werden. Aus diesen Gründen werden die gesuchten Parameter im Folgenden mit Hilfe der Fehlermatrix berechnet.

Um die richtige Implementierung des Algorithmus zu überprüfen, wird eine berechnete Temperaturverteilung mit beliebigen Größen für a_1 und b_1 als gemessener Temperaturverlauf vorgegeben. Mit Hilfe der beschriebenen inversen Methode müsste die gewählte Kombination an Parametern als optimales Ergebnis berechnet werden. Für den Test wurden folgende Werte gewählt

$$a_{1,Test} = 0.25 \frac{W}{mK}$$

$$b_{1,Test} = -0.0008 \frac{W}{mK^2}$$

Abbildung 6.1 zeigt den Wert der Fehlerfunktion über dem zulässigen Bereich. Der Verlauf des Fehlers stellt eine Parabel im dreidimensionalen Raum dar. Auffallend ist, dass eine Änderung des Parameters b_1 kaum Auswirkungen auf den Fehler hat. Da der Temperaturverlauf kaum von dieser Größe abhängt, ist dieses Ergebnis plausibel. Aufgrund der geringen Gradienten in Richtung der Zielgröße b_1 ist es schwierig, die optimale Größe zu bestimmen. Numerische Rundungsfehler können zu Ungenauigkeiten in diesem Bereich führen. In dem Testbeispiel liegt das Minimum der Fehlerfunktion genau bei den vorgegebenen Werten für $a_{1,Test}$ und $b_{1,Test}$. Der Algorithmus ist somit korrekt implementiert.

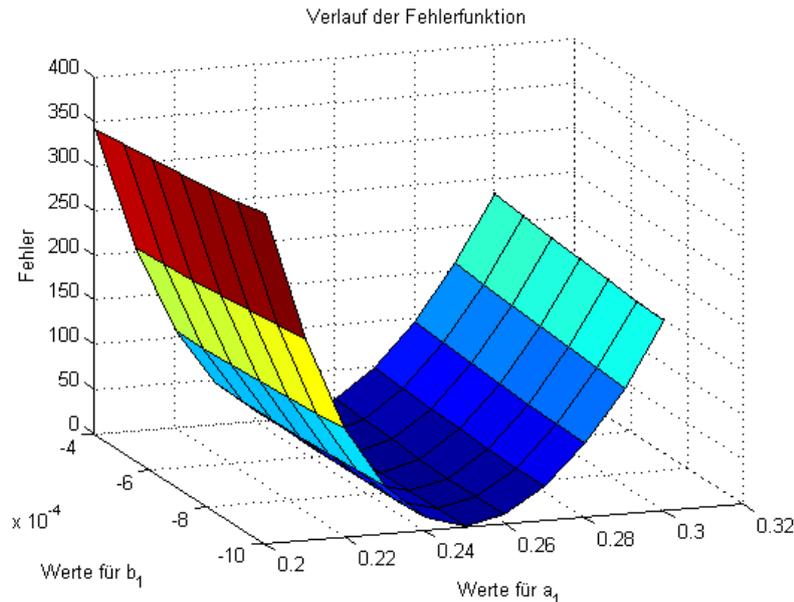


Abbildung 6.1: Wert der Fehlerfunktion über den zulässigen Bereich des Optimierungsvorgangs

6.2 Ergebnisse

Um die Variablen der Wärmeleitfähigkeit zu bestimmen, wurde das inverse Verfahren auf alle Messdaten angewendet. Es stellt sich aber heraus, dass nur Randminima gefunden werden. Auch eine Ausdehnung des zulässigen Bereichs weit über physikalisch sinnvolle Lösungen, führt zu keinem inneren Minimum. Es können somit keine optimalen Werte für die Parameter bestimmt werden. Das Scheitern der Berechnung dieser Größen liegt allerdings nicht im Algorithmus, sondern in der mangelnden Sensibilität des Versuchs auf die Zielgrößen. Wie bereits in Kapitel 5.8 angesprochen, ist die Abhängigkeit des Temperaturverlaufs von den gesuchten Größen sehr gering. Darüber hinaus gibt es zahlreiche mögliche Fehlerquellen, die den Verlauf der Temperatur stärker beeinflussen als die Wärmeleitfähigkeit. Folgende Effekte verhindern eine korrekte Bestimmung der Parameter mit den durchgeführten Versuchen:

6 Inverse Methode zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

- Die Messergebnisse müssen erst durch eine zeitliche Korrelation an die berechneten Verläufe angepasst werden. Die Messung beginnt sofort nach dem Anrühren des Knochenzements. Die mathematische Modellierung des Aushärtevorgangs beginnt aber erst etwa 220 Sekunden danach. Der exakte Zeitversatz zwischen Messung und Simulation ist allerdings nicht bekannt. Durch den Fehler in der zeitlichen Korrelation $\Delta t_{Korrelation}$ kommt es zu einer Abweichung des Temperaturverlaufes um $\Delta T_{Verlauf,Korrelation}$.
- Als Starttemperatur für die Simulation wird die Oberflächentemperatur nach 220 Sekunden angenommen. Da sich der Knochenzement in dieser Zeit bereits erwärmt hat, liegt keine homogene Temperaturverteilung innerhalb der Probe vor. Es kommt somit zu einem Fehler in der Anfangstemperatur ΔT_{Start} , welcher eine Verschiebung des Temperaturverlaufes um $\Delta T_{Verlauf,Start}$ bewirkt.
- Der unbekannte Kontaktwiderstand verursacht einen großen Fehler $\Delta T_{Verlauf,R_{th,K}}$ während der Abkühlphase.
- Die Änderung der Randbedingung an der Mantelfläche wird nicht berücksichtigt. Dies führt ebenfalls zu einem Fehler im Temperaturverlauf $\Delta T_{Verlauf,RB}$.
- Die angenommene Enthalpiedifferenz erweist sich als zu niedrig. Unsicherheiten in dieser Größe $\Delta h_{0,Fehler}$ führen zu einer Veränderung des Temperaturverlaufes $\Delta T_{Verlauf,h_0}$.
- Der Wärmeübergangskoeffizient wurde anhand einer empirischen Formel für eine eben Platte berechnet. Es kann keine Aussage darüber getroffen werden, ob der berechnete Wert der Realität entspricht. Darüber hinaus musste die Formel teilweise außerhalb ihres Definitionsbereichs angewendet werden. Somit kann es zu Abweichungen des Temperaturverlaufes $\Delta T_{Verlauf,h_{horz}}$ kommen.
- Die mathematischen Modelle, auf denen die Simulation beruht, sind auf einen Temperaturbereich von 15°C bis 80°C begrenzt. Außerhalb dieses Bereichs kommt es zu einer fehlerbehafteten Berechnung der Stoffgrößen und damit zu einem Fehler im Temperaturverlauf.
- Die gemessenen Ergebnisse beruhen auf den Strahlungseigenschaften des Knochenzements. Es wurde ein Emissionskoeffizient von 1 angenommen. Es ist davon auszugehen, dass dieser in Realität um einen Wert $\Delta \epsilon$ niedriger ist. Eine Verkleinerung der Emissivität führt zu einer Erhöhung der gemessenen Temperatur. Es ist somit auch ein genereller Messfehler $\Delta T_{Verlauf,Messung}$ zu erwarten.

Um die einzelnen Fehler zu ermitteln und eine quantitative Aussage treffen zu können, wird die Auswirkung der jeweiligen Unsicherheit auf die Abkühlphase bestimmt. Da sich der Einfluss der Wärmeleitfähigkeit auf diesen Zeitraum beschränkt, kann somit eine Aussage über die theoretisch erreichbare Genauigkeit, beziehungsweise Machbarkeit der inversen Parameterbestimmung getroffen werden. Folgende Tabelle ordnet den abgeschätzten Schwankungen der aufgelisteten Größen einen Fehlerwert für den Abkühlvorgang zu. Die Abweichungen wurden mit Hilfe der Simulation und der

6 Inverse Methode zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Auswertesoftware Irbis 3 Professional ermittelt und exemplarisch zum Zeitpunkt $t = 30 \text{ min}$ ausgewertet. Es ist zu beachten, dass sich die aufgezählten Fehler nicht linear Verhalten. Die Tabelle 6.1 soll nur die ungefähre Größenordnung der auftretenden Fehler veranschaulichen.

geschätzte Unsicherheit	Auswirkung auf Abkühlvorgang $\Delta T_{\text{Verlauf},i}$ [K]
$\Delta t_{\text{Korrelation}} = 5 \text{ s}$	0.1
$\Delta T_{\text{Start}} = 1 \text{ K}$	2
$\Delta R_{\text{th},K} = 2.5 \text{ Km}^2/\text{W}$	4
$\Delta h_{0,\text{Fehler}} = 5 \text{ J/g}$	0.7
$\Delta \bar{h}_{\text{horz}} = 0.5 \text{ W}/(\text{m}^2\text{K})$	1
$\Delta \epsilon = 0.1$	2.5
Veränderung der Randbedingung	2

Tabelle 6.1: Auswirkung der Unsicherheiten auf den Abkühlvorgang des Knochenzements

Mit einer Fehlerverteilung nach

$$\Delta T_{\text{Verlauf},\text{Gesamt}} = \sqrt{\sum_i (\Delta T_{\text{Verlauf},i})^2} \quad (6.8)$$

ergibt sich ein gesamter Temperaturfehler während des Abkühlvorgangs von

$$\Delta T_{\text{Verlauf},\text{Gesamt}} \approx 5.6 \text{ K} \quad (6.9)$$

Um eine Aussage über die Machbarkeit der Parameterbestimmung treffen zu können, wird die Veränderung des Temperaturverlaufs durch die Variable a_1 ermittelt.

Δa_1 [W/(mK)]	$\Delta T_{\text{Verlauf},a_1}$ [K]
1	0.4
10	1.8
100	2.9
1000	3.1

Tabelle 6.2: Einfluss des Paramters a_1 auf den Temperaturverlauf

Aus Tabelle 6.2 wird erkennbar, dass die Simulation wesentlich sensibler auf die Unsicherheit, als auf die unbekannt Parameter reagiert. Der gesamte Fehler ist 14 mal größer, als die durch eine Veränderung der Variablen a_1 um $1 \text{ W}/(\text{mK})$ hervorgerufene Temperaturänderung. Somit ist belegt, dass die inverse Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit mit diesem Versuchsaufbau nicht möglich ist.

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Basierend auf den Erkenntnissen aus Kapitel 6.2 soll ein verbesserter Versuchsaufbau konstruiert werden. Die prinzipielle Vorgehensweise bleibt allerdings identisch und das entwickelte inverse Verfahren wird weiterhin angewendet.

7.1 Veränderter Versuchsaufbau

Der modifizierte Versuch beinhaltet nicht mehr den aushärtenden Knochenzement als Probenmaterial, sondern eine stabilisierte Form des PMMA im flüssigen Zustand. In diesem Zustand kommt es zu keiner Polymerisation der Probe. Diese verfestigt sich zwar auch in Abhängigkeit der Temperatur, allerdings geschieht dieser Vorgang langsamer. Für geringe Temperaturdifferenzen können die Stoffeigenschaften der stabilisierten Flüssigkeit über einen kurzen Zeitraum als konstant betrachtet werden. Somit ist eine zeitliche Korrelation zwischen Messung und Simulation nicht nötig und es entsteht kein Fehler durch eine unbekannte Enthalpiedifferenz. Um auch die Auswirkungen der Strahlungseigenschaften des Knochenzements und des Wärmeübergangskoeffizienten zu eliminieren, beschränkt sich der neue Versuch auf Wärmeleitung. Abbildung 7.1 skizziert den modifizierten Versuchsaufbau.

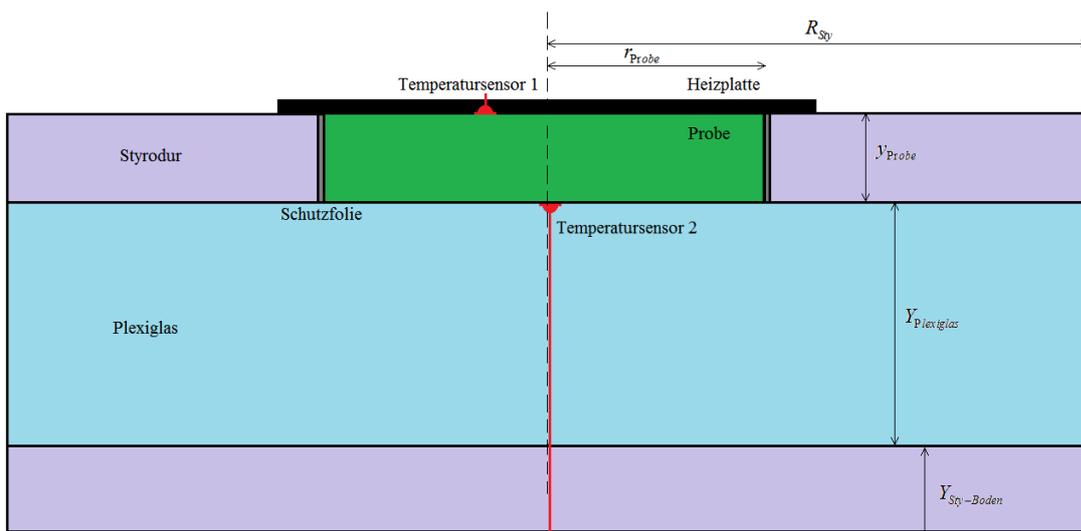


Abbildung 7.1: Querschnitt des modifizierten Versuchsaufbaus

Das stabilisierte PMMA wird in eine zylindrische Hohlform aus Styrodur gegossen, um eine gute Wärmeisolation zu erhalten. Die Ränder sind zum Schutz des Styrodurs mit einer Schutzfolie aus Polyethylen verkleidet. Der Boden unterhalb der Probe besteht aus Plexiglas. Aufgrund der glatten Oberfläche des Plexiglasses und der nicht vorhandenen Schutzfolie, ist der Kontaktwiderstand geringer als beim Styrodur. Der Einfluss dieser unbekanntes Größe wird somit verkleinert. Als Kompromiss wird eine höhere Wärmeleitfähigkeit in Kauf genommen. Unterhalb des Plexiglasses wird noch eine Styrodurplatte angebracht. Der Wärmestrom innerhalb des Plexiglasses und des Styrodurs muss in der Simulation berücksichtigt werden. An der Probenoberfläche befindet sich eine Heizplatte. Diese könnte durch ein Peltier-Element realisiert werden. Die Temperatursensoren an der Probenober- und unterseite nehmen die zeitlichen Temperaturdaten auf. Da ein gewisser Wärmestrom über diese Thermolemente entweicht, werden sie örtlich versetzt angebracht, damit sie sich nicht gegenseitig beeinflussen.

Über die Heizplatte wird die Oberfläche nach Möglichkeit sprunghaft erhitzt. Dieser Temperaturanstieg wird gemessen und stellt die Randbedingung der Simulation dar. Es entsteht ein Wärmestrom in y-Richtung der Probe. Für einen ausreichend großen Probenradius kann ein radialer Wärmestrom aufgrund der flächendeckenden Aufheizung der Oberfläche und der Isolierung durch das Styrodur vernachlässigt werden. Im Idealfall wärmt die Heizplatte auch den Rand des Styrodurs auf. Somit kann die Temperaturdifferenz zwischen der Probe und dem Styrodur verringert werden und es entweicht weniger Wärme. Nach einer gewissen Zeit ist ein Temperaturanstieg an der Probenunterseite zu messen. Dieser ist abhängig von der Wärmeleitfähigkeit des Materials. Über die Anpassung des berechneten Temperaturverlaufs an der Unterseite der Probe an den tatsächlich gemessenen Verlauf, kann die Wärmeleitfähigkeit des flüssigen Knochenzements mit der beschriebenen Methode bestimmt werden.

Die geometrischen Größen, die eingebrachte Temperaturdifferenz ΔT_{in} und die Messzeit $t_{Messung}$ müssen aufeinander abgestimmt werden.

$$\Delta T_{in} = T_{Heizplatte} - T_{Start} \quad (7.1)$$

Der Radius muss ausreichend große sein, damit radiale Wärmeströme vernachlässigbar sind. Die Probenhöhe muss klein genug sein, sodass in der vorgegebenen Zeit und bei der entsprechenden Oberflächentemperatur, eine Änderung an der Probenunterseite erfolgt. Dennoch soll sie möglichst groß sein, damit der Einfluss der Wärmeleitfähigkeit besser aufgelöst werden kann. Die eingebrachte Wärme darf nicht zu groß sein, damit die Verfestigung der Probe nicht beschleunigt wird. Dennoch sollte eine deutliche Änderung der Temperatur an der Unterseite erfolgen. Diese Änderung ist umso größer, je länger die Messzeit ist. Ist diese jedoch zu lange, liegt die Probe nicht mehr im flüssigen Zustand vor.

Die in Tabelle 7.1 vorgeschlagenen Werte beruhen auf den Ergebnissen einer numerischen Berechnung des Temperaturfeldes. Die Größe $Y_{Sty-Boden}$ ergibt sich aus der vorhandenen Plattendicke des Styrodurs. Weist das Plexiglas eine Mindestdicke von 2cm auf, kommt es zu keiner nennenswerten Temperaturdifferenz zwischen den beiden

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Größe	empfohlener Wert
r_{Probe}	25 mm
y_{Probe}	10 mm
R_{Sty}	100 mm
$Y_{Plexiglas}$	30 mm
$Y_{sty-Boden}$	20 mm
ΔT_{in}	8 K
$t_{Messung}$	300 s

Tabelle 7.1: Vorgeschlagene Größen für den modifizierten Versuchsaufbau

Materialien (siehe Abb. 7.2) und die Auswirkungen des Kontaktwiderstandes zwischen Plexiglas und Styrodur sind zu vernachlässigen. Dennoch kann das Styrodur in der Simulation nicht vernachlässigt werden, da die Annahme einer adiabaten Unterseite des Plexiglasses zu einem Fehler im Temperaturverlauf führt. Bei einem dünneren Plexiglas wird der Einfluss des Kontaktwiderstands zwischen Plexiglas und Styrodur größer und der Fehler steigt an.

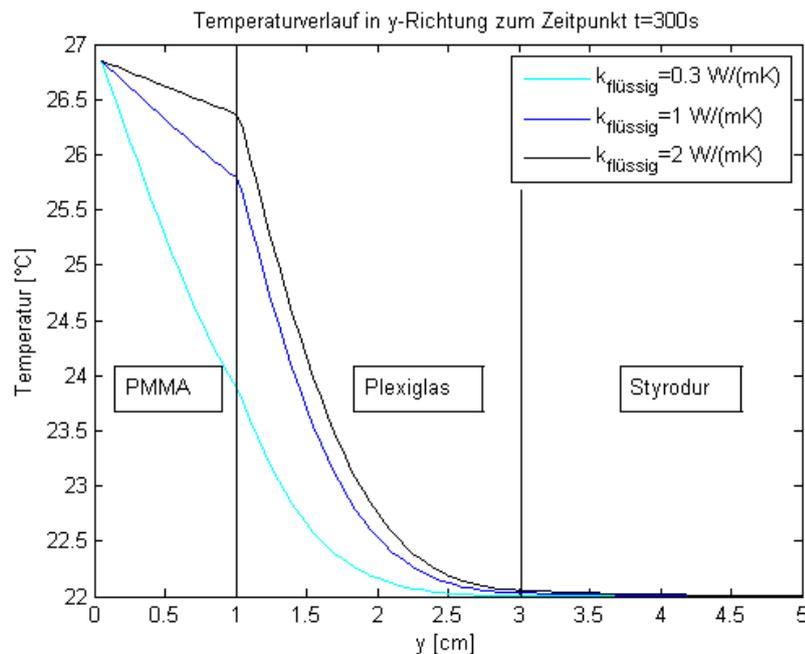


Abbildung 7.2: Temperaturverlauf in y-Richtung zum Zeitpunkt $t = 300s$ in Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit ($R_{th,K} = 0 \text{ Km}^2/W$, $T_{Start} = 22^\circ C$, $T_{Heizplatte} = 30^\circ C$)

Abbildung 7.2 zeigt den Temperaturverlauf entlang der Rotationsachse am Ende der Messung. Geht man davon aus, dass sich die Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements im flüssigen Zustand $k_{flüssig}$ nur gering von der im Festen unterscheidet, dringt die Temperaturänderung im relevanten Bereich nicht bis zur Unterseite des Plexiglasses durch.

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Aufgrund der kurzen Versuchszeit und des verwendeten stabilisierten PMMA, kommt es zu keiner Schrumpfung der Probe während der Messung. Somit entfällt der Fehler durch eine Änderung der Randbedingung. Unter der Bedingung, dass die Probe, das Styrodur und das Plexiglas Umgebungstemperatur besitzt, kann von einer homogenen Temperaturverteilung innerhalb des Materials ausgegangen werden. Der Startwert für die Simulation wird somit korrekt durch den gemessenen Wert an der Probenunterseite zum Zeitpunkt $t = 0$ wiedergegeben. Damit die stabilisierte Flüssigkeit Umgebungstemperatur aufweist, ist es nötig, dass die Komponenten eine ausreichend lange Zeit unter Umgebungsbedingungen lagern. Bis auf die Unsicherheit des Kontaktwiderstandes zwischen der Probe und dem Plexiglas, sind alle auftretenden Fehlerquellen des ursprünglichen Versuchsaufbaus eliminiert worden. Obwohl der erwartete Kontaktwiderstand kleiner ist, verursacht diese Unsicherheit dennoch einen Fehler. Der Einfluss des Kontaktwiderstands auf den Temperaturverlauf in y -Richtung, wird in Abbildung 7.3 veranschaulicht.

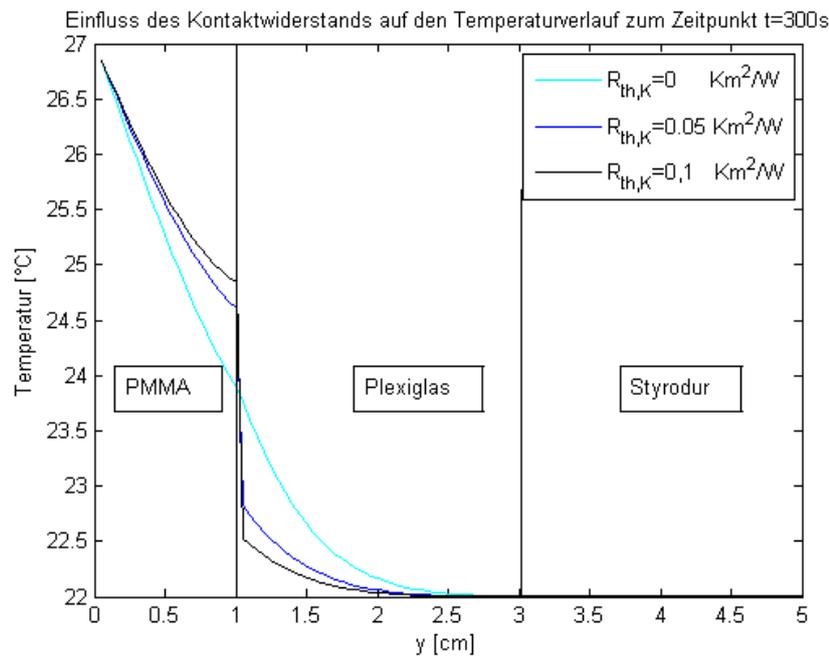


Abbildung 7.3: Temperaturverlauf in y -Richtung zum Zeitpunkt $t = 300s$ in Abhängigkeit des Kontaktwiderstands ($k_{flüssig} = 1 W/(mK)$, $T_{Start} = 22^{\circ}C$, $T_{Heizplatte} = 30^{\circ}C$)

Um auch diese Fehlerquelle auszuschließen, wird der unbekannte Kontaktwiderstand als eine weitere Zielgröße in das Optimierungsproblem mit einbezogen. Somit kann dieser mit Hilfe der inversen Methode bestimmt werden und die Wärmeleitfähigkeit korrekt berechnet werden.

7.2 Simulation des Temperaturverlaufs in vertikaler Richtung

Um die Optimierungsaufgabe über die Minimierung einer vorgegebenen Fehlerfunktion zu realisieren, muss der Temperaturverlauf in vertikaler Richtung berechnet werden können. Da sich die Stoffparameter und die Randbedingungen im Vergleich zum ursprünglichen Versuch geändert haben, muss die Simulation an die neuen Bedingungen angepasst werden. Die Stoffgrößen der Probe werden als zeitlich konstant betrachtet und besitzen die in Tabelle 7.2 aufgelisteten Werte.

Stoffgröße	Wert
ρ_{PMMA}	1490 kg/m^3
$c_{v,PMMA}$	1170 J/(kgK)
$\rho_{Plexiglas}$	1190 kg/m^3
$c_{v,Plexiglas}$	1470 J/(kgK)
$k_{Plexiglas}$	0.184 W/(mK)
ρ_{Sty}	30 kg/m^3
$c_{v,Sty}$	1500 J/(kgK)
k_{Sty}	0.035 W/(mK)

Tabelle 7.2: Verwendete Stoffparameter für modifizierte Simulation

Folgende Abbildung 7.4 veranschaulicht die Randbedingungen der Simulation. An der Probenoberfläche liegt eine Randbedingung erster Art vor (Vorgabe einer Temperatur). Die Unterseite des Versuchsaufbaus wird als adiabat angenommen. Da der Versuch so ausgelegt wurde, dass Wärmeströme in radialer Richtung in der Probenmitte vernachlässigbar sind, genügt die Implementierung eines eindimensionalen Modells mit N Knotenpunkten. Die Randbedingungen in radialer Richtung sind somit ebenfalls adiabat.

Durch die Reduzierung der Simulation auf ein eindimensionales Problem, ist es nicht mehr erforderlich, das Rechengebiet in unterschiedliche Sektoren aufzuteilen, um die Laufzeit zu verbessern. Auch können Knotenpunkte mit einem durchgehend äquidistanten Abstand Δy für die Berechnung verwendet werden. Eine Gitteroptimierung ist nicht nötig.

Wendet man die Energieerhaltungsgleichung (5.3) auf die einzelnen Knotenpunkte an und führt eine örtliche sowie zeitlich implizite Diskretisierung an, ergeben sich folgende Zusammenhänge für die Temperaturen am Knotenpunkt n zum Zeitpunkt $p + 1$.

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

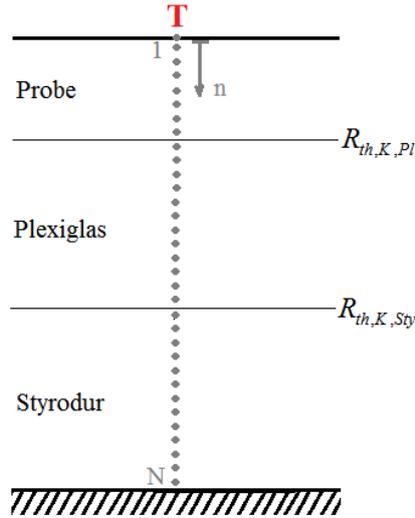


Abbildung 7.4: Veranschaulichung der Randbedingungen der veränderten Simulation

Für $n = 1$ (7.2)

$$T_1^{p+1} = T_{Sensor\ 1}^{p+1}$$

Für $n = [2, \dots, N - 1]$ (7.3)

$$T_n^{p+1} = \frac{k_{Material} \Delta t}{\rho_{Material} c_{v,Material} \Delta y} (T_{n-1}^{p+1} + T_{n+1}^{p+1} - 2T_n^{p+1}) + T_n^p$$

am Materialübergang $k_{Material} = k_{Ersatz,R}$

Für $n = N$ (7.4)

$$T_N^{p+1} = \frac{k_{Sty} \Delta t}{\rho_{Sty} c_{v,Sty} \Delta y} (T_{N-1}^{p+1} - T_N^{p+1}) + T_N^p$$

Der gesamte Temperaturverlauf wird wie in Kapitel 5.5.2 erläutert durch das Lösen eines Gleichungssystems berechnet.

$$\underline{T}_n^{p+1} = [M]^{-1} \underline{T}_n^p \quad (7.5)$$

mit $\underline{T} \in \mathbb{R}^N$ und $[M] \in \mathbb{R}^{N \times N}$

Da es sich bei der veränderten Simulation um ein rein implizites Verfahren handelt, führen große Zeitschritte Δt zu keiner Instabilität. Alle dargestellten Ergebnisse wurden mit einer Zeitschrittweite von $\Delta t = 1s$ berechnet.

7.3 Modifiziertes Optimierungsproblem

Für den veränderten Versuchsaufbau muss eine neue Optimierungsaufgabe konstruiert werden, die den Kontaktwiderstand zwischen Probe und Plexiglas enthält. Es wurde bereits gezeigt, dass der Einfluss des Parameters b_1 vernachlässigbar ist. Somit enthält das modifizierte Optimierungsproblem die Zielgrößen a_1 und $R_{th,K}$. Das Probenmaterial besteht aus der stabilisierten Flüssigkeit des PMMA. Es findet keine Polymerisation statt und der Aushärtegrad hat den konstanten Wert $q = 0$. Der Ansatz für die Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements in Abhängigkeit der Temperatur und des Aushärtegrades

$$k = [a_1 + b_1 (T - T_0)] (1 - q) + [a_2 + b_2 (T - T_0)] q \quad (7.6)$$

vereinfacht sich somit zu

$$k_{PMMA} = a_1 \quad (7.7)$$

Die neue Fehlerfunktion für das Optimierungsproblem lautet

$$F = \sum_{p=0}^Z (T_{Sensor\ 2}^p - T_{Simulation,X}^p(k_{PMMA}, R_{th,K}))^2 \quad (7.8)$$

Dabei wird die Abweichung des gemessenen Temperaturverlaufs an der Probenunterseite (Sensor 2) von dem berechneten Verlauf am Punkt $X = \text{Probenunterseite}$ ermittelt. Die Bestimmung der optimalen Parameter $k_{PMMA,bestfit}$ und $R_{K,bestfit}$, mit welchen der gemessenen Temperaturverlauf am besten wiedergegeben werden kann, erfolgt wie in Kapitel 6.1 geschildert. Dabei gilt

$$F(k_{PMMA,bestfit}, R_{th,K,bestfit}) = \min(F) \quad (7.9)$$

Um den entwickelten Algorithmus zu testen, wird ein berechneter Temperaturverlauf am Punkt X mit den gewählten Testgrößen $k_{PMMA,test}$ und $R_{K,test}$ als Messdaten vorgegeben. Als Randbedingung (Vorgabe der Temperatur $T_{Heizplatte}$) an der Probenoberfläche werden dabei drei verschiedene Fälle betrachtet.

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Validierungsbeispiel 1: (7.10)

$$T_{\text{Heizplatte}} = 30^{\circ}\text{C}$$

Validierungsbeispiel 2: (7.11)

$$T_{\text{Heizplatte}} = 5^{\circ}\text{C} \sin\left(\frac{2\pi}{300\text{s}} t\right) + 27^{\circ}\text{C}$$

Validierungsbeispiel 3: (7.12)

$$T_{\text{Heizplatte}} = 5^{\circ}\text{C} \sin\left(\frac{2\pi}{150\text{s}} t\right) + 27^{\circ}\text{C}$$

Die Starttemperatur der Probe beträgt in allen Fällen $T_{\text{Start}} = 22^{\circ}\text{C}$. Um ein Messrauschen zu simulieren, wird auf jeden berechneten Testverlauf eine Temperaturschwankung von $\Delta T_{\text{Messrauschen}} = \pm 0.25^{\circ}\text{C}$ gegeben.

Im Folgenden werden die Ergebnisse des Optimierungsproblems für alle drei Validierungsbeispiele dargestellt.

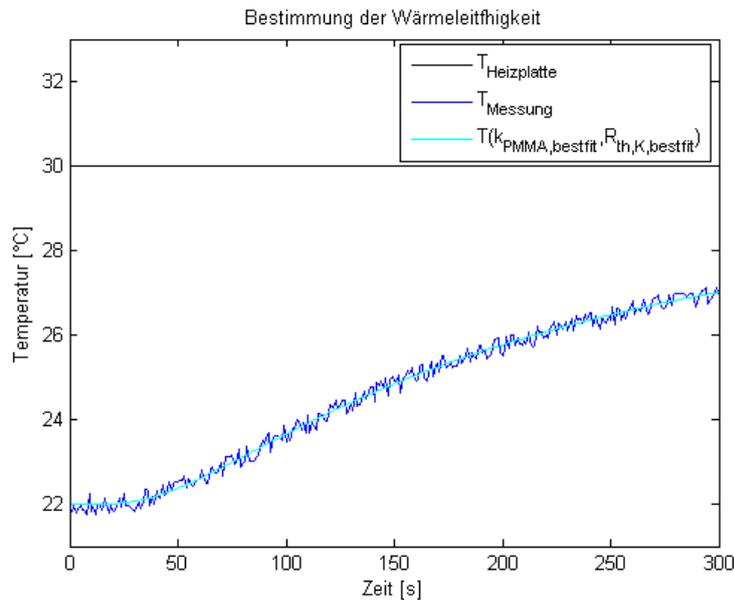


Abbildung 7.5: Validierungsbeispiel 1

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

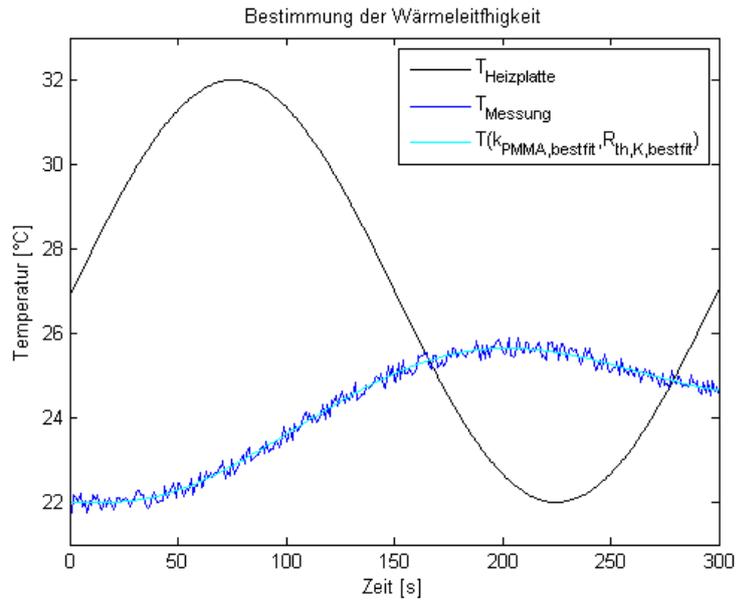


Abbildung 7.6: Validierungsbeispiel 2

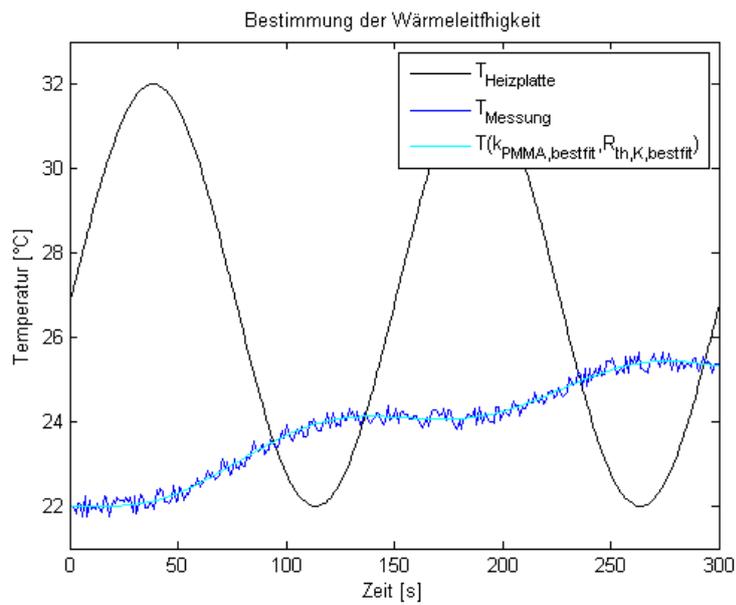


Abbildung 7.7: Validierungsbeispiel 3

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Vorgabe	$k_{PMMA, test} = 0.325$	$R_{th, K, test} = 0.115$
Validierungsbeispiel 1	$k_{PMMA, bestfit} = 0.325$	$R_{th, K, bestfit} = 0.123$
Validierungsbeispiel 2	$k_{PMMA, bestfit} = 0.325$	$R_{th, K, bestfit} = 0.110$
Validierungsbeispiel 3	$k_{PMMA, bestfit} = 0.321$	$R_{th, K, bestfit} = 0.127$

Tabelle 7.3: Ergebnisse der Zielgrößen k_{PMMA} [$W/(mK)$] und $R_{th, K}$ [Km^2/W] für die Validierungsbeispielen 1 bis 3

Wie in Tabelle 7.3 aufgelistet, wird die Wärmeleitfähigkeit der stabilisierten Flüssigkeit k_{PMMA} und damit der unbekannte Parameter a_1 trotz des Messrauschens korrekt bestimmt. In Beispiel 3 kommt es aufgrund des Messrauschens zu einem geringen relativen Fehler von 1, 2%. Die Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit ist somit unabhängig von der vorgegebenen Randfunktion, solange der Temperaturanstieg an der Probenunterseite ausreichend groß ist. Betrachtet man das Validierungsbeispiel 3, so ist zu erkennen, dass dieser die geringste Temperaturänderung am Punkt X bewirkt. Der Kontaktwiderstand wird in keinem der aufgeführten Validierungsbeispiele ohne Fehler ermittelt. In Beispiel 1 beträgt der relative Fehler des Kontaktwiderstands 6.9%. Diese Abweichung hat aber keinen Einfluss auf die korrekte Berechnung der Zielgröße k_{PMMA} . Um diese Eigenschaft zu verdeutlichen, wird in Abbildung 7.8 der Verlauf der Fehlerfunktion veranschaulicht. Die Gradienten in Richtung der Zielgröße $R_{th, K}$ sind im Bereich des optimalen Wertes für die Wärmeleitfähigkeit sehr klein. Somit ist es schwieriger, den korrekten Kontaktwiderstand zu bestimmen. Im Vergleich dazu, kommt es zu großen Gradienten entlang der Zielgröße k_{PMMA} . Somit kann trotz des ungenauen Kontaktwiderstandes die Wärmeleitfähigkeit richtig berechnet werden.

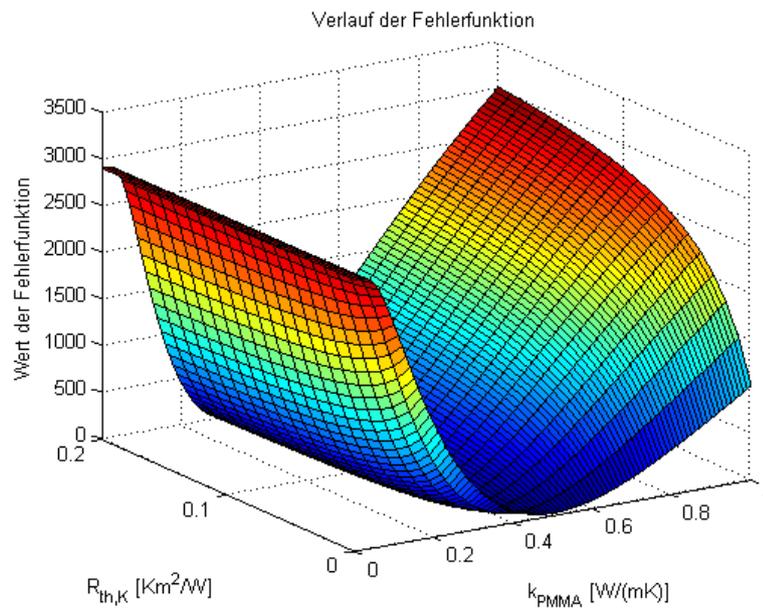


Abbildung 7.8: Verlauf der Fehlerfunktion für Validierungsbeispiel 1

7 Modifizierter Versuch zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Um einen qualitativen Vergleich zum ursprünglichen Versuch herzustellen, wird die Sensibilität des Temperaturverlaufs auf die gesuchte Größe getestet. Dafür wird die Wärmeleitfähigkeit um einen Wert Δk_{PMMMA} geändert und die daraus resultierende Temperaturänderung $\Delta T_{Verlauf, k_{PMMMA}}$ für das Validierungsbeispiel 1 berechnet. Die so bestimmten Werte lassen eine qualitative Aussage über die Empfindlichkeit für die Zielgröße zu (Tabelle 7.4). Mit Hilfe des veränderten Versuchsaufbaus ist es möglich, die Sensitivität auf das 13-fache des ursprünglichen Versuchs zu erhöhen. Die erhöhte Empfindlichkeit des Temperaturverlaufs und die Vermeidung aller Fehlerquellen, die der alte Versuchsaufbau mit sich bringt, ermöglicht eine zuverlässige Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit des Knochenzements. Voraussetzung ist, dass die verwendeten Temperatursensoren eine hohe Genauigkeit aufweisen. Der maximale Messfehler sollte nicht höher als $0.5K$ sein.

Δk_{PMMMA} [W/(mK)]	$\Delta T_{Verlauf, k_{PMMMA}}$ [K]
0.01	0.1
0.05	0.6
0.1	1
1	5

Tabelle 7.4: Einfluss des Parameters k_{PMMMA} auf den Temperaturverlauf des veränderten Versuchs

8 Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier und Maxwell-Cattaneo

Nach dem Fourier'schen Gesetz tritt ein Wärmestrom gleichzeitig zu einer Temperaturdifferenz auf. Damit würde eine unendliche schnelle Informationsgeschwindigkeit zwischen Ursache und Wirkung vorliegen. Dies widerspricht allerdings den physikalischen Grundlagen. Besonders bei viskoelastischen Stoffen kann es zu einer deutlichen zeitlichen Verzögerung zwischen Temperaturdifferenz und dem daraus resultierenden Wärmestrom kommen. Die Wärmeleitung nach Maxwell-Cattaneo berücksichtigt diese zeitliche Verschiebung zwischen Ursache und Wirkung mit Hilfe einer Relaxationszeit τ . Im Folgenden soll der Einfluss der Relaxationszeit auf die Wärmeleitung qualitativ beschrieben, und die Auswirkung auf den modifizierten Versuchsaufbau ermittelt werden.

8.1 Theoretische Grundlagen der Wärmeleitung nach Maxwell-Cattaneo

Nach [9] berechnet sich der Wärmestrom \dot{Q} nach Maxwell-Cattaneo durch eine Differentialgleichung der Form

$$\tau \frac{\partial \dot{Q}}{\partial t} + \dot{Q} = k A \frac{\partial T}{\partial x} \quad (8.1)$$

Je höher die Relaxationszeit ist, desto größer ist der zeitliche Unterschied zwischen Temperaturdifferenz und dem daraus resultierenden Wärmestrom. Für $\tau \rightarrow 0$ gleicht der Wärmestrom dem Fourier'schen Gesetz.

Für die Diskretisierung wird das explizite Eulerverfahren angewendet. Somit ergibt sich die diskrete Form aus (8.1) zu

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{n,n+1}^{p+1} &= \frac{\Delta t}{\tau} \left(k \frac{T_{n,n+1}^p - T_n^p}{\Delta y} - \dot{Q}_{n,n+1}^p \right) + \dot{Q}_{n,n+1}^p \\ \text{mit } Q_{n,n+1}^{p=0} &= 0 \end{aligned} \quad (8.2)$$

Dieser Zusammenhang wird in das eindimensionale Modell aus Kapitel 7.2 implementiert. Für die qualitative Abschätzung werden nur die Stoffdaten der stabilisierten Flüssigkeit verwendet und die Kontaktwiderstände vernachlässigt. Die Einarbeitung der Maxwell-Cattaneo'schen Wärmeleitung erfolgt über die Vorgabe einer Randbedingung zweiter Art an jeder einzelnen Volumenzelle. Somit bezieht sich die Berechnung

der Temperatur um Punkt n nicht auf die Temperaturen der benachbarten Knotenpunkte, sondern auf die ein- und ausfließenden Wärmeströme.

$$\begin{aligned} \text{Für } n = 1 & & (8.3) \\ T_1^{p+1} &= T_{Sensor\ 1}^{p+1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Für } n = [2, \dots, N - 1] & & (8.4) \\ T_n^{p+1} &= \frac{\Delta y \Delta t}{\rho c_v} \left(\dot{Q}_{n-1,n}^p + \dot{Q}_{n,n+1}^p \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Für } n = N & & (8.5) \\ T_N^{p+1} &= \frac{\Delta y \Delta t}{\rho c_v} \dot{Q}_{n-1,n}^p \end{aligned}$$

Die Wärmeströme $\dot{Q}_{n-1,n}^p$ und $\dot{Q}_{n,n+1}^p$ werden mit Hilfe der Gleichung (8.3) bestimmt. Dazu müssen die Wärmeströme des vergangenen Zeitpunkts $p - 1$ gespeichert werden.

8.2 Ergebnisse

Um eine qualitative Aussage über die Auswirkung der Wärmeleitung nach Maxwell-Cattaneo, beziehungsweise die Unterschiede zur der Fourier'schen Wärmeleitung treffen zu können, wird ein Temperatursprung von 22°C auf 30°C auf die Probe gegeben (Validierungsbeispiel 1). Die angenommene Wärmeleitfähigkeit des stabilisierten PMMA beträgt $k_{PMMA} = 0.3$ und die Relaxationszeit $\tau = 10\text{s}$. In den folgenden Abbildungen wird ein Zeitraum von $t = 50\text{s}$ betrachtet. Somit können die Verläufe zu Beginn der Messung besser aufgelöst werden. Es wird auf den Verlauf des Wärmestroms und der Temperatur eingegangen.

Der Fourier'sche Wärmestrom setzt schlagartig ein und wird mit zunehmender Zeit kleiner. Graphik 8.2 zeigt, dass sich der Wärmestrom nach dem Gesetz von Maxwell-Cattaneo erst mit der Zeit aufbaut. Der maximale Wärmestrom tritt somit nicht sofort auf. Je höher die Relaxationszeit ist, desto später bildet sich der maximale Wärmestrom aus. Der selbe Zusammenhang gilt auch für die inneren Punkte. Je weiter der Wärmestrom in das Material vordringt, desto länger dauert es, bis sich das Maximum ausbildet. Darüber hinaus ist der erreichte Maximalwert niedriger. Wie in Abbildung 8.3 zu erkennen ist, breitet sich der Unterschied zwischen den beiden Wärmeströmen mit fortlaufender Zeit in das Material aus.

Die nach dem Fourier'schen Gesetz berechnete Temperatur beginnt sofort nach dem Aufbringen einer Temperaturdifferenz an der Probenoberfläche zu steigen. Da sich der Wärmestrom nach Maxwell-Cattaneo erst mit der Zeit ausbildet, ist der daraus resultierende Temperaturgradient zu Beginn niedriger. Dieser steigt aber mit zunehmendem Wärmestrom an. Aufgrund der Abhängigkeit des maximalen Wärmestroms

8 Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier und Maxwell-Cattaneo

von der Eindringtiefe, kommt es dazu, dass der Wärmestrom eines äußeren Punktes bereits abfällt, aber der des inneren Punktes weiter ansteigt. Zu einem bestimmten Zeitpunkt gibt somit die äußere Volumenzelle mehr Energie an die Innere ab, als sie selbst aufnimmt. Daher sinkt die Randtemperatur zu diesem Zeitpunkt. Mit größer werdender Relaxationszeit wird dieser Effekt verstärkt. Dem zur Folge bilden sich bei hohen Relaxationszeiten Schwingungen im Temperaturverlauf aus.

Aus der Abbildung 8.6 ist zu sehen, dass der mit dem Maxwell-Cattaneo'schen Gesetz berechnete Temperaturverlauf zu Beginn der Rechnung niedriger ist, als der Verlauf nach Fourier. Im Lauf der Zeit wird die so ermittelte Randtemperatur allerdings etwas größer. Die Abweichungen breiten sich wie beim Wärmestrom in das Material aus und werden mit zunehmender Zeit geringer (Abb. 8.7).

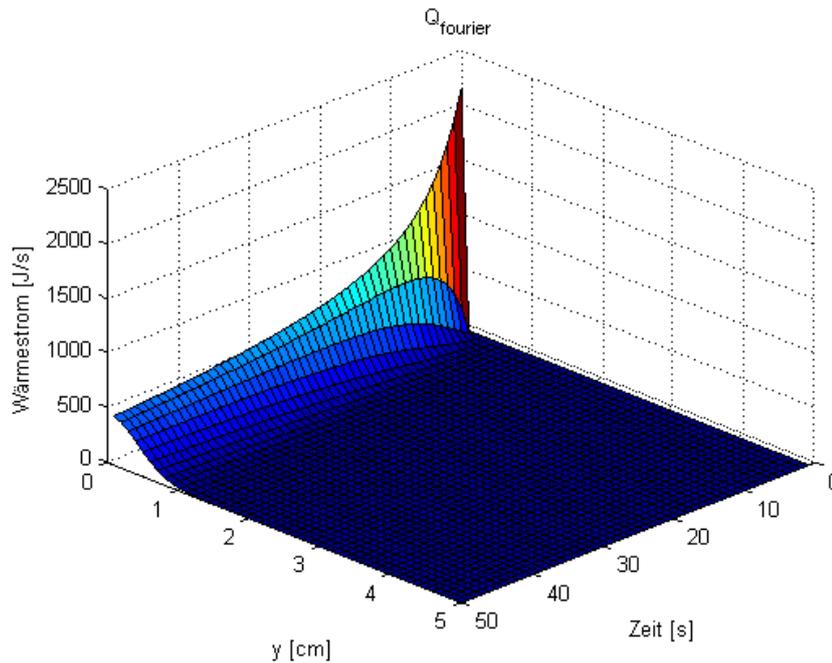


Abbildung 8.1: Verlauf des Wärmestroms nach Fourier in vertikaler Richtung über die Zeit

8 Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier und Maxwell-Cattaneo

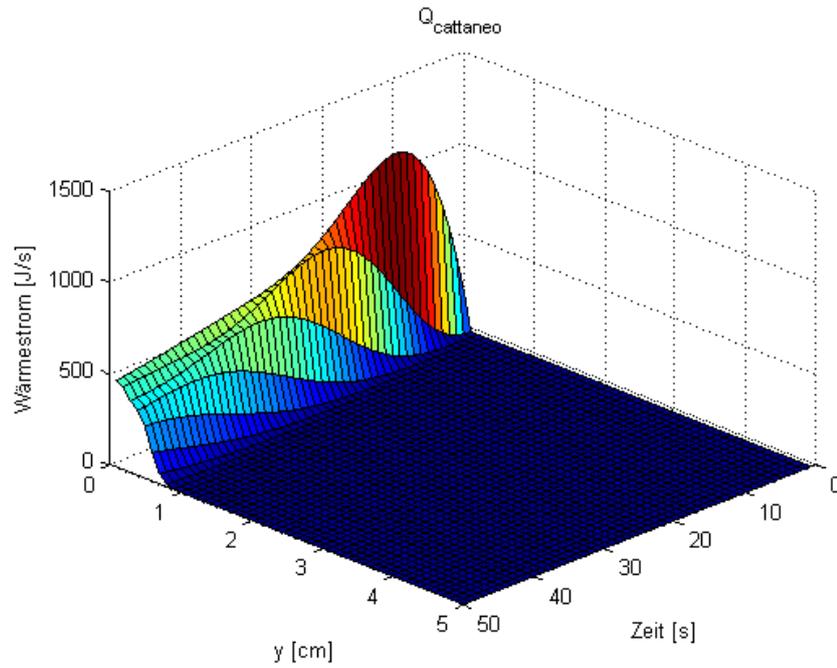


Abbildung 8.2: Verlauf des Wärmestroms nach Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10\text{s}$)

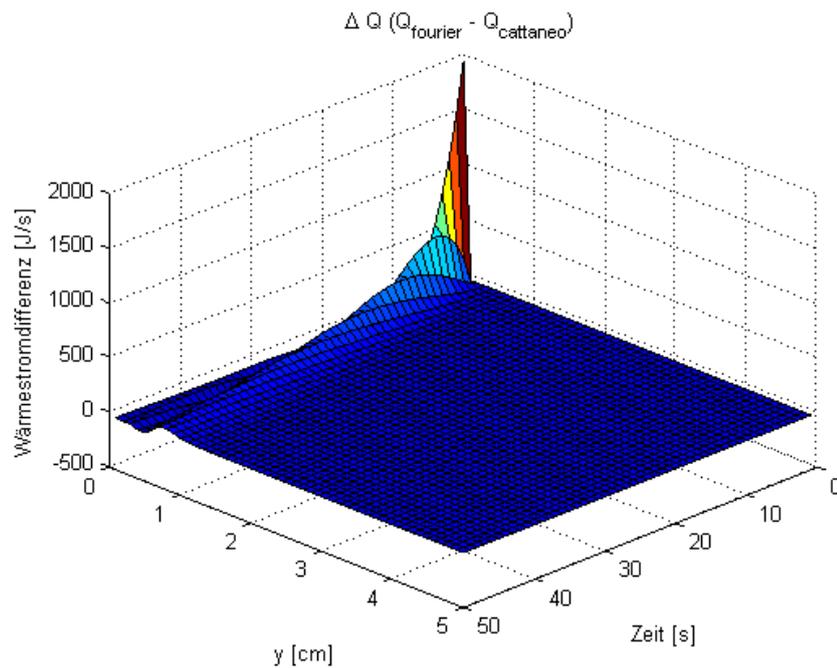


Abbildung 8.3: Unterschiede der Wärmeströme von Fourier und Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10\text{s}$)

8 Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier und Maxwell-Cattaneo

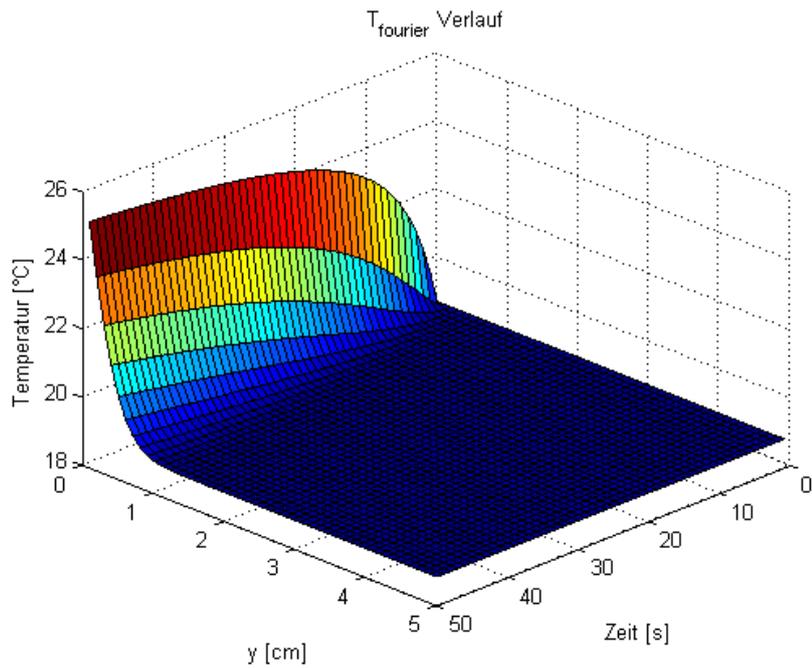


Abbildung 8.4: Verlauf der Temperatur nach Fourier in vertikaler Richtung über die Zeit

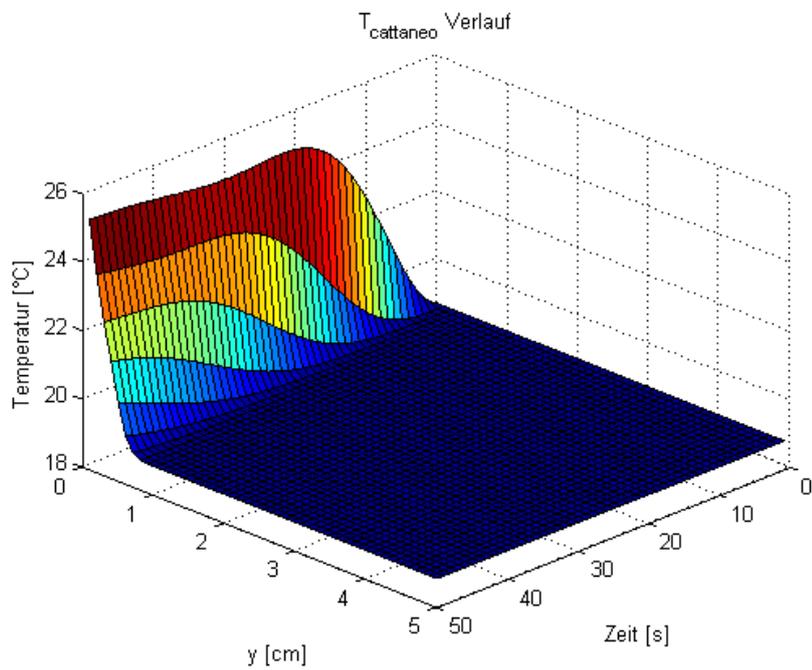


Abbildung 8.5: Verlauf der Temperatur nach Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10s$)

8 Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier und Maxwell-Cattaneo

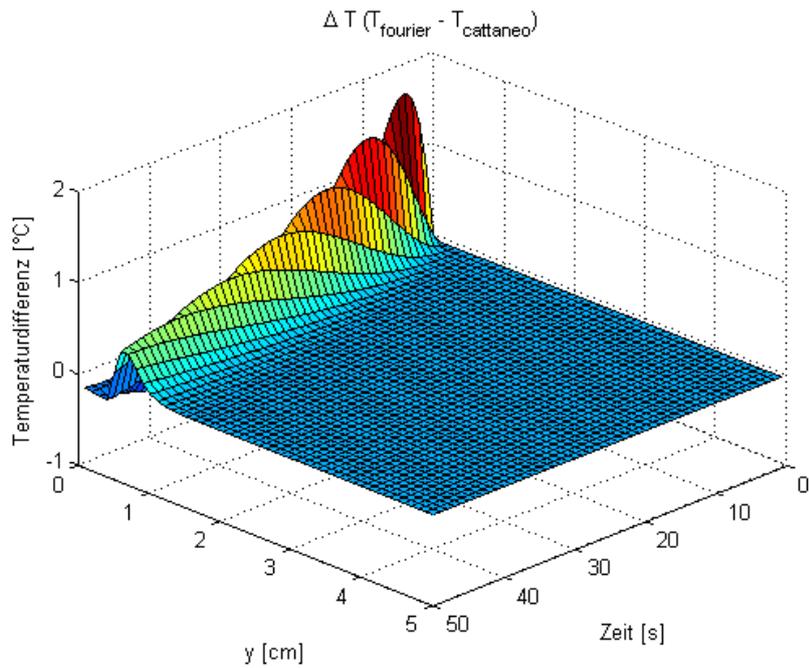


Abbildung 8.6: Unterschiede der Temperaturverläufe von Fourier und Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10s$)

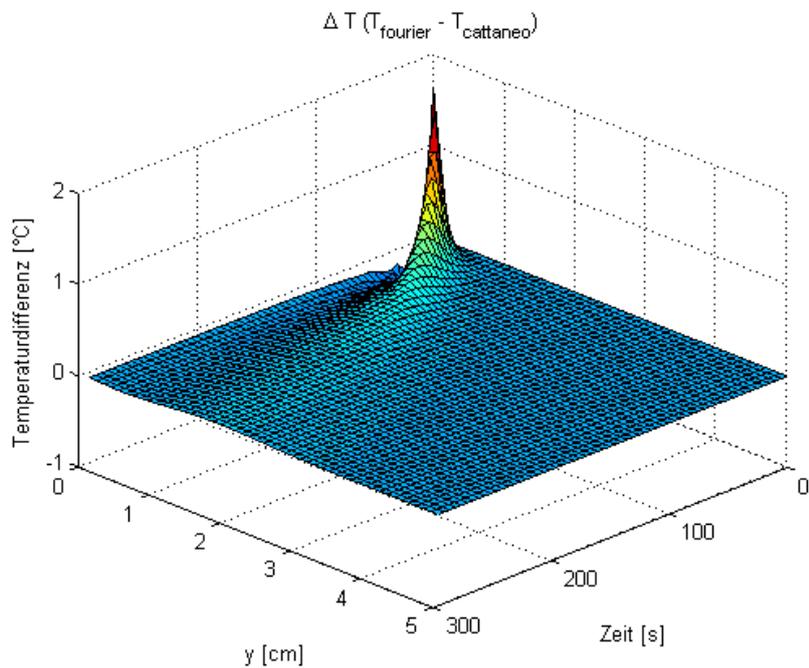


Abbildung 8.7: Unterschiede der Temperaturverläufe von Fourier und Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die gesamte Messzeit ($\tau = 10s$, $t = 300s$)

Nachdem der qualitative Unterschied der beiden Wärmeleitungsgesetze erläutert wurde, stellt sich die Frage, inwieweit sich die Vernachlässigung der Relaxationszeit des Knochenzements auf die Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit auswirkt. Für die Optimierung ist der Temperaturverlauf an der Probenunterseite entscheidend. Ausgehend von einer Probendicke von 1cm ergeben sich in Abhängigkeit der Relaxationszeit folgende Temperaturunterschiede.

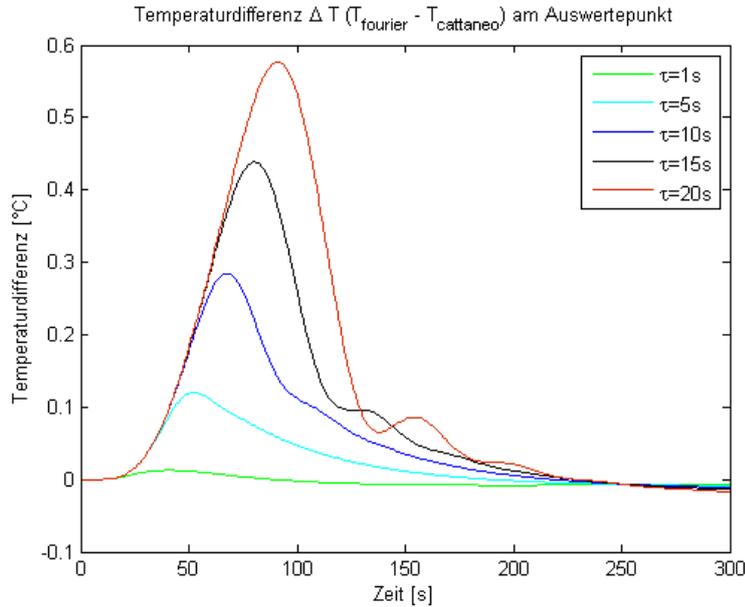


Abbildung 8.8: Temperaturabweichung an der Probenunterseite durch Vernachlässigung der Maxwell-Cattaneoschen Wärmeleitung in Abhängigkeit der Relaxationszeit (Bei einem Temperatursprung von 22°C auf 30°C an der Probenoberseite)

Der Fehler in der berechneten Temperatur nach Fourier steigt mit zunehmender Relaxationszeit. Dabei wird die Temperatur stets zu hoch bestimmt. Die Abweichung beschränkt sich allerdings nur auf einen kurzen Zeitraum und klingt während der Messzeit von $t = 300\text{s}$ ab.

Um den Einfluss dieses Fehlers auf die inverse Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit zu testen, werden Temperaturverläufe bei unterschiedlichen Relaxationszeiten mit den Maxwell-Cattaneo Beziehungen und einer vorgegebenen Wärmeleitfähigkeit $k_{P\text{MMA},\text{test}}$ an der Probenunterseite berechnet. Der Kontaktwiderstand wird dabei vernachlässigt. Diese so bestimmten Verläufe dienen dem Optimierungsalgorithmus anschließend als Messdaten des Temperatursensors 2. Die Optimierungsaufgabe wird weiterhin mit der Fourier'schen Wärmeleitung durchgeführt.

Tabelle 8.1 zeigt die berechnete Wärmeleitfähigkeit $k_{P\text{MMA},\text{bestfit}}$, bei verschiedenen Relaxationszeiten. Je höher die Relaxationszeit des Knochenzements ist, desto größer wird der Fehler der berechneten Wärmeleitfähigkeit. Diese wird zunehmend unterschätzt. Bei einer hohen Relaxationszeit von $\tau = 20\text{s}$ beträgt der prozentuale Fehler in diesem Beispiel 4.3%. Für $\tau < 10\text{s}$ kann der Einfluss vernachlässigt werden.

8 Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier und Maxwell-Cattaneo

$k_{PMMA,test}$	$[W/(mK)]$	τ_i	0.300
$k_{PMMA,bestfit}$	$[W/(mK)]$	$\tau = 0s$	0.300
$k_{PMMA,bestfit}$	$[W/(mK)]$	$\tau = 1s$	0.300
$k_{PMMA,bestfit}$	$[W/(mK)]$	$\tau = 5s$	0.298
$k_{PMMA,bestfit}$	$[W/(mK)]$	$\tau = 10s$	0.295
$k_{PMMA,bestfit}$	$[W/(mK)]$	$\tau = 15s$	0.291
$k_{PMMA,bestfit}$	$[W/(mK)]$	$\tau = 20s$	0.287

Tabelle 8.1: Optimierungsergebnis bei vernachlässigter Relaxationszeit

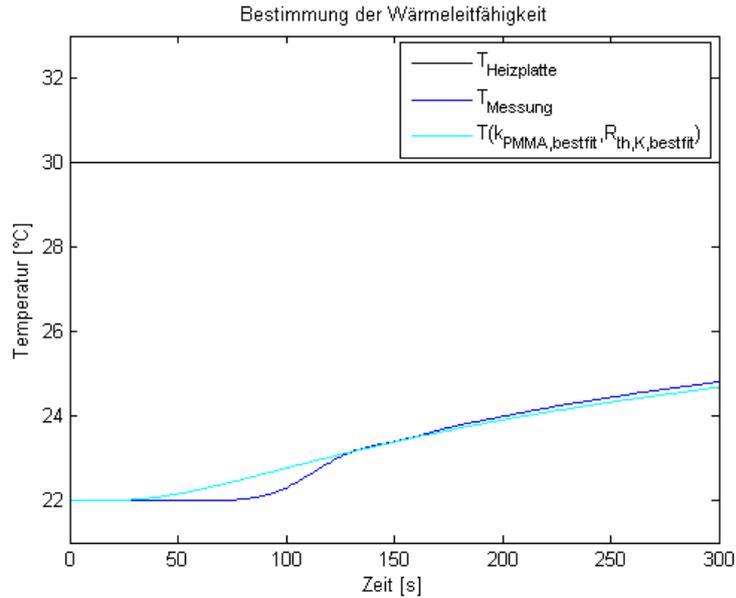


Abbildung 8.9: Optimierungsbeispiel für eine Relaxationszeit von $\tau = 20s$

Abbildung 8.9 zeigt den Temperaturverlauf bei einer Relaxationszeit von $20s$ und den Temperaturverlauf nach Fourier mit der berechneten Wärmeleitfähigkeit $k_{PMMA,bestfit}$. Wie zu sehen ist, wird der entstandene Fehler durch die Minimierung der definierten Zielfunktion (7.9) relativ gut ausgeglichen. Somit kann auch für hohe Relaxationszeiten die Wärmeleitfähigkeit der stabilisierten Flüssigkeit relativ gut mit einem akzeptablen Fehler ermittelt werden.

9 Zusammenfassung

Ziel der Arbeit war es, eine inverse Methode zu entwickeln, mit der die Temperatur und Aushärtegrad abhängige Wärmeleitfähigkeit von Knochenzement berechnet werden kann. Dazu soll eine auf der finiten Volumen Methode basierendes numerisches Berechnungsprogramm des Aushärtevorgangs geschrieben werden. Die Wärmeleitfähigkeit wird dabei mit einer linearen Abhängigkeit von Temperatur und Polymerisationsgrad modelliert. Gleichzeitig werden Versuche durchgeführt, in denen die Oberflächentemperatur des Knochenzements während der Aushärtung mit Hilfe einer Infrarotkamera gemessen wird. Durch einen Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Versuchsergebnissen, soll das mathematische Modell der Wärmeleitfähigkeit so angepasst werden, dass die Temperaturverläufe übereinstimmen.

Die Zusammenhänge der Stoffeigenschaften und der Reaktionskinetik des Knochenzements während der Aushärtung sind bekannt. Für die Simulation werden diese Gleichungen mit dem expliziten Eulerverfahren diskretisiert. Es kommt zu einer inhomogenen Polymerisation und Temperaturverteilung innerhalb der Probe. Dies hat eine örtliche Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit zur Folge. Die örtlichen Unterschiede der Wärmeleitfähigkeit führen zu Unstetigkeiten im Temperaturverlauf, was zu einem Fehler in der berechneten Temperatur führt. Um diesen Fehler zu vermeiden, wird eine Ersatzwärmeleitfähigkeit eingeführt. Sie erzwingt einen stetigen Verlauf der Temperatur zwischen zwei benachbarten finiten Volumenzellen, ohne die berechneten Werte zu verfälschen. Für eine möglichst exakte Berechnung des Temperaturverlaufs, wird die Umgebung des aushärtenden Knochenzements mit in die Simulation eingebunden. Mit Hilfe eines optimierten Gitters mit variablen Abständen, kann die Laufzeit der Simulation verbessert werden. Eine weitere Verkürzung der Laufzeit wird durch eine implizite Berechnung des Temperaturfeldes erreicht. Somit kommt es auch bei größeren Zeitschrittweiten zu keinen Instabilitäten in der Berechnung.

Der durch die Simulation berechnete Temperaturverlauf an der Probenoberfläche, entspricht qualitativ dem gemessenen Temperaturverlauf. Allerdings stellt sich heraus, dass die frei werdende Energie aufgrund der Polymerisation zu gering abgeschätzt wird. Die Enthalpiedifferenz $|h_{fest,0} - h_{flüssig,0}|$ sollte zwischen $110 J/g$ und $115 J/g$ liegen. Des Weiteren bestätigt die Simulation eine starke Abhängigkeit des Aushärtevorgangs von der Starttemperatur. Ein unerwartetes Ergebnis ist, dass sich die Wärmeleitfähigkeit kaum auf den Aushärteprozess auswirkt. Nur die darauf folgende Abkühlung der Probe wird durch diese beeinflusst.

Die inverse Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit wird mit Hilfe einer Optimierungsaufgabe ermöglicht. Dazu wird ein Optimierungsproblem gelöst, indem der berechnete Temperaturverlauf an die gemessenen Daten angepasst wird. Dies geschieht über die Minimierung einer vorgegebenen Fehlerfunktion, welche die Abweichung der berechneten von den gemessenen Größen charakterisiert. Voraussetzung dafür ist, dass der

anzugleichende Temperaturverlauf sensibel genug auf die zu berechnenden Zielgrößen reagiert.

Der ursprüngliche Versuchsaufbau stellt sich dafür als nicht geeignet heraus. Er besitzt nicht die für die Optimierungsaufgabe nötige Empfindlichkeit. Wie bereits durch die Simulation gezeigt wurde, ist der Einfluss der Wärmeleitfähigkeit auf den Temperaturverlauf zu gering. Darüber hinaus enthält der Versuchsaufbau diverse Fehlerquellen, die den Temperaturverlauf wesentlich stärker beeinträchtigen, als die gesuchte Größe. Der größte Fehler wird durch einen unbekanntem Kontaktwiderstand zwischen dem Knochenzement und dem Umgebungsmaterial verursacht. Weitere Fehlerquellen sind Abweichungen in der Emissivität des Knochenzements, die Vernachlässigung der Schrumpfung während der Polymerisation und die zu niedrig abgeschätzte Enthalpiedifferenz.

Basierend auf den Erkenntnissen der Fehleranalyse wird ein veränderter Versuchsaufbau entwickelt. Durch konstruktive Maßnahmen und der Verwendung einer stabilisierten Flüssigkeit des Knochenzements anstelle des aushärtenden Materials können die meisten Fehlerquellen des ursprünglichen Versuchs vermieden werden. Einzig der unbekanntem Kontaktwiderstand verursacht weiterhin einen Fehler. Darüber hinaus erhöht sich die Sensibilität für die Wärmeleitfähigkeit, durch den veränderten Versuchsaufbau, um das 13-fache.

Um auch den Einfluss des Kontaktwiderstands zu berücksichtigen, wird dieser als weitere Zielgröße in das entworfene Optimierungsproblem aufgenommen. Durch die gleichzeitige Bestimmung des Kontaktwiderstands ist eine Berechnung der Wärmeleitfähigkeit im modifiziertem Versuchsaufbau mit einer hohen Genauigkeit möglich. Begrenzender Faktor ist nur die Messgenauigkeit der verwendeten Temperatursensoren.

Bei viskoelastischen Materialien, wie dem Knochenzement, kann es zu einem zeitlich verzögerten Wärmestrom kommen. Dieser Effekt wird durch die Maxwell-Cattaneo Beziehung beschrieben. Im Vergleich zum Fourier'schen Gesetz wird eine Relaxationszeit τ eingeführt, welche die verzögerte Entstehung des Wärmestroms charakterisiert. Der Vergleich der Wärmeleitung nach Fourier mit Maxwell-Cattaneo ergibt, dass die Auswirkung der Relaxationszeit des Knochenzements auf die Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit für $\tau < 10s$ vernachlässigt werden kann. Für größere Relaxationszeiten wird die Wärmeleitfähigkeit geringfügig unterschätzt.

Im Anschluss an diese Arbeit muss der veränderte Versuchsaufbau realisiert und die Messungen durchgeführt werden. Das fertige Programm zur inversen Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit wurde in dieser Arbeit entwickelt und muss ausschließlich angewendet werden. Darüber hinaus ist die Relaxationszeit des Knochenzements in Erfahrung zu bringen. Falls sich diese größer als $10s$ erweist, ist darüber nachzudenken, die Maxwell-Cattaneo Beziehungen in den Algorithmus einzuarbeiten oder einen Korrekturterm herzuleiten.

Literaturverzeichnis

- [1] S.J: Breusch und K.D.Kühn: *Knochenzement auf Basis von Polymethylmethacrylat*, in Orthopäde (2003, Ausgabe 1, S.1)
- [2] S.J: Breusch und K.D.Kühn: *Knochenzement auf Basis von Polymethylmethacrylat*, in Orthopäde (2003, Ausgabe 1, S.3)
- [3] InfraTec: *Thermografie - Physikalische Grundlagen*,
<http://www.infratec.de/de/thermografie/infrarotkamaseras/theorie/grundlagen.html>
(Stand 8.11.2010)
- [4] Sebastian Kolmeder: *Thermomechanisch-chemisch gekoppelte Materialmodellierung akrylischer Knochenzemente*, 2010
- [5] Incopera,DeWitt: *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*,
6th edition (John Wiley and Sons, 2007)
- [6] Marek, Nitsche: *Praxis der Wärmeübertragung*,
2te Auflage (Hanser Verlag, 2010)
- [7] Dipl.-Ing. Lars Nierobis: *Wärmedämmstoffe*,
<http://www.waermedaemmstoffe.com/htm/polystyrol.htm> (Stand 22.11.2010)
- [8] Öziski: *Finite difference methods in heat transfer*,
(CRC Press, 1994)
- [9] Andrea Pietro Reverberi, Patrizia Bagnerini, Luigi Maga, Agostino Giacinto Bruzzone:
On the non-linear Maxwell-Cattaneo equation with non-constant diffusivity: Shock and discontinuity waves,
International Journal of Heat and Mass Transfer 51 (2008) 5327-5332

Abbildungsverzeichnis

3.1	prinzipieller Versuchsaufbau	5
3.2	chemischen Reaktion zwischen Monomer und Styropor	6
3.3	Probe (ausgehärteter Knochenzement)	6
3.4	Probengeometrie	7
3.5	Spektrale Verteilung [3]	8
3.6	Transmissionsgrad von Luft [3]	9
3.7	Momentaufnahme der Oberflächentemperatur von Messung 3 nach 1020 sek	10
3.8	Zeitlicher Temperaturverlauf über den Radius (Messung 3)	11
3.9	Alle Messungen am Punkt $X = r_{Probe}/2$	12
4.1	Polymerisationsgrad bei verschiedenen isothermen Temperaturen	15
4.2	$(\Delta h_p / \Delta t)$ über die Zeit bei verschiedenen Temperaturen	17
4.3	Δh_{Ges} in Abhängigkeit der Temperatur	17
4.4	Vergleich des Aushärtegrades mit der Enthalpiedifferenz ($T = 30^\circ C$)	18
4.5	spezifische Wärmekapazität bei verschiedenen Temperaturen	20
4.6	Vergleich des Aushärtegrades mit der spezifischen Wärmekapazität ($T = 30^\circ C$)	20
4.7	Dichte bei verschiedenen Temperaturen	22
4.8	Vergleich des Aushärtegrades mit der Dichte ($T = 30^\circ C$)	22
5.1	Veranschaulichung der Zerlegung eines Volumens in endlich kleine Teilvolumen	24
5.2	Wärmeströme im Zylinderkoordinatensystem	26
5.3	In der Simualtion betrachtete Querschnittsfläche	26
5.4	Konduktion zu einem inneren Kontrollvolumen von den benachbarten Teilvolumen	27
5.5	Grenzflächen eines Teilvolumens	28
5.6	Auswirkung der Ersatzwärmeleitfähigkeit auf den Temperaturverlauf	30
5.7	Implementierte Randbedingungen	31
5.8	Teilvolumen der rechten oberen Ecke des Zylinders	32
5.9	Wärmeströme am rechten oberen Kontrollvolumen (für Fall 1)	32
5.10	Wärmeströme am rechten oberen Kontrollvolumen (für Fall 2)	35
5.11	Wärmeströme am rechten oberen Kontrollvolumen (für Fall 3)	36
5.12	Entstehung der finiten Volumen mit Hilfe eines Gitters	37
5.13	Finite Volumen	37
5.14	Zerlegung des Rechengebietes in vier Quadranten	43
5.15	Darstellung des gesamten Gitters aller vier Quadranten	46

5.16	Knotenpunkte an den Übergängen der Quadranten	46
5.17	Vergleich der analytisch ermittelten mit der numerisch berechneten Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 15^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$	48
5.18	Fehler der numerischen Berechnung der Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 15^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$	49
5.19	Vergleich der analytisch ermittelten mit der numerisch berechneten Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 30^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$	49
5.20	Fehler der numerischen Berechnung der Oberflächentemperatur bei $T_{start} = 30^{\circ}C$ und $T_{\infty} = 21^{\circ}C$	50
5.21	Temperaturverteilung [$^{\circ}C$] zum Zeitpunkt $t = 25min$ in Fall 1	51
5.22	Temperaturverteilung [$^{\circ}C$] zum Zeitpunkt $t = 25min$ in Fall 2	52
5.23	Temperaturverteilung [$^{\circ}C$] zum Zeitpunkt $t = 25min$ in Fall 3 mit dem Kontaktwiderstand $R_{th,K} = 0 Km^2/W$	52
5.24	Temperaturverteilung [$^{\circ}C$] zum Zeitpunkt $t = 25min$ in Fall 3 mit dem Kontaktwiderstand $R_{th,K} = 0.1 Km^2/W$	53
5.25	Abhängigkeit des Temperaturverlaufs von der Starttemperatur ($R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	54
5.26	Abhängigkeit des Temperaturverlaufs vom Kontaktwiderstand ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$)	55
5.27	Abhängigkeit des Temperaturverlaufs von der Randbedingung an der Mantelfläche ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$)	55
5.28	Einfluss des Parameters a_1 der Wärmeleitfähigkeit auf den Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	56
5.29	Einfluss des Parameters b_1 der Wärmeleitfähigkeit auf den Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	57
5.30	Temperaturverteilung innerhalb der Probe zum Zeitpunkt $t = 10min$ ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	58
5.31	Temperaturverteilung innerhalb der Probe zum Zeitpunkt $t = 11min$ ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	58
5.32	Verlauf des Polymerisationsgrades und der Temperatur während des Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	59
5.33	Verlauf der spezifischen Wärmekapazität während der Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	59
5.34	Verlauf der Dichte während des Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	60
5.35	Verlauf des Konvektionskoeffizienten an der Probenoberfläche während des Aushärtevorgangs ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	61
5.36	Vergleich von Messung 3 mit absolut adiabaten Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$)	62
5.37	Einfluss der Enthalpiedifferenz $ h_{fest,0} - h_{flüssig,0} $ auf den Temperaturverlauf ($T_{start} = 21.5^{\circ}C$, $R_{th,K} = 0 Wm^2/K$)	62
6.1	Wert der Fehlerfunktion über den zulässigen Bereich des Optimierungsvorgangs	66

Abbildungsverzeichnis

7.1	Querschnitt des modifizierten Versuchsaufbaus	69
7.2	Temperaturverlauf in y-Richtung zum Zeitpunkt $t = 300s$ in Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit ($R_{th,K} = 0 \text{ Km}^2/W$, $T_{Start} = 22^\circ C$, $T_{Heizplatte} = 30^\circ C$)	71
7.3	Temperaturverlauf in y-Richtung zum Zeitpunkt $t = 300s$ in Abhängigkeit des Kontaktwiderstands ($k_{flüssig} = 1 \text{ W}/(mK)$, $T_{Start} = 22^\circ C$, $T_{Heizplatte} = 30^\circ C$)	72
7.4	Veranschaulichung der Randbedingungen der veränderten Simulation	74
7.5	Validierungsbeispiel 1	76
7.6	Validierungsbeispiel 2	77
7.7	Validierungsbeispiel 3	77
7.8	Verlauf der Fehlerfunktion für Validierungsbeispiel 1	78
8.1	Verlauf des Wärmestroms nach Fourier in vertikaler Richtung über die Zeit	82
8.2	Verlauf des Wärmestroms nach Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10s$)	83
8.3	Unterschiede der Wärmeströme von Fourier und Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10s$)	83
8.4	Verlauf der Temperatur nach Fourier in vertikaler Richtung über die Zeit	84
8.5	Verlauf der Temperatur nach Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10s$)	84
8.6	Unterschiede der Temperaturverläufe von Fourier und Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die Zeit ($\tau = 10s$)	85
8.7	Unterschiede der Temperaturverläufe von Fourier und Maxwell-Cattaneo in vertikaler Richtung über die gesamte Messzeit ($\tau = 10s$, $t = 300s$)	85
8.8	Temperaturabweichung an der Probenunterseite durch Vernachlässigung der Maxwell-Cattaneoschen Wärmeleitung in Abhängigkeit der Relaxationszeit (Bei einem Temperatursprung von $22^\circ C$ auf $30^\circ C$ an der Probenoberseite)	86
8.9	Optimierungsbeispiel für eine Relaxationszeit von $\tau = 20s$	87

Tabellenverzeichnis

3.1	Messungen	7
3.2	Styrodur Daten	7
5.1	Stoffparamter für analytische Berechnung der Oberflächentemperatur .	48
5.2	Abmessungen und Anfangstemperaturen für Validierungsbeispiel	51
6.1	Auswirkung der Unsicherheiten auf den Abkühlvorgang des Knochenze- ments	68
6.2	Einfluss des Paramters a_1 auf den Temperaturverlauf	68
7.1	Vorgeschlagene Größen für den modifizierten Versuchsaufbau	71
7.2	Verwendete Stoffparameter für modifizierte Simulation	73
7.3	Ergebnisse der Zielgrößen k_{PMMMA} [$W/(mK)$] und $R_{th,K}$ [Km^2/W] für die Validierungsbeispielen 1 bis 3	78
7.4	Einfluss des Paramters k_{PMMMA} auf den Temperaturverlauf des veränderten Versuchs	79
8.1	Optimierungsergebnis bei vernachlässigter Relaxationszeit	87

Anhang

Materialparameter

Zeichen	Einheit	Wert
$c_{p,Luft}$	J/kgK	1010
$c_{v,Plexiglas}$	$J/(kgK)$	1470
$c_{v,PMMA}$	$J/(kgK)$	1170
$c_{v,Sty}$	$J/(kgK)$	1500
k_{Luft}	W/mK	0.0262
$k_{Plexiglas}$	$W/(mK)$	0.184
k_{Sty}	$W/(mK)$	0.035
T_0	K	310.15
T_∞	K	294.15
$T_{g,0}$	$^\circ C$	-50
$T_{g,1}$	$^\circ C$	105
ε_{th}	$1/K$	0.000928
$\Delta\varepsilon_{th}$	$1/K$	-0.000367
ν_{Luft}	m^2/s	$1.316 \cdot 10^{-5}$
ρ_0	kg/m^3	1469.7
ρ_{Luft}	kg/m^3	1.3
$\rho_{Plexiglas}$	kg/m^3	1190
ρ_{PMMA}	kg/m^3	1490
ρ_{Sty}	kg/m^3	30
χ		-0.090602

Programme und Messdaten

Alle in der Arbeit entwickelten Programme befinden sich als Matlab 2009b kompatible m-files auf der CD-ROM. Darüber hinaus enthält sie die aufgezeichneten Messdaten der Infrarotkamera.

Beiträge zur Materialtheorie

Herausgeber: Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Alexander Lion

Universität der Bundeswehr München

ISSN 1862-5703

In dieser Reihe sind bisher folgende Hefte erschienen:

- | | |
|------|---|
| 1/07 | RETKA, JOHANNES / HÖFER, PHILIPP
Numerische Simulation aushärtender Klebstoffe |
| 2/07 | RANZ, THOMAS
Ein feuchte- und temperaturabhängiger anisotroper Werkstoff: Holz |
| 3/07 | THURNER, FLORIAN / RANZ, THOMAS
Rheologisches Verhalten von Holz unter Biegebelastung |
| 4/07 | LION, ALEXANDER
Einführung in die Lineare Viskoelastizität |
| 5/07 | RANZ, THOMAS
Elementare Materialmodelle der Linearen Viskoelastizität im Zeitbereich |
| 1/09 | DIERCKS, NICO
Validierung und ANSYS-Implementierung des Schlimmer-Mahnken
Materialmodells zur Festigkeitsberechnung von Klebeverbindungen |