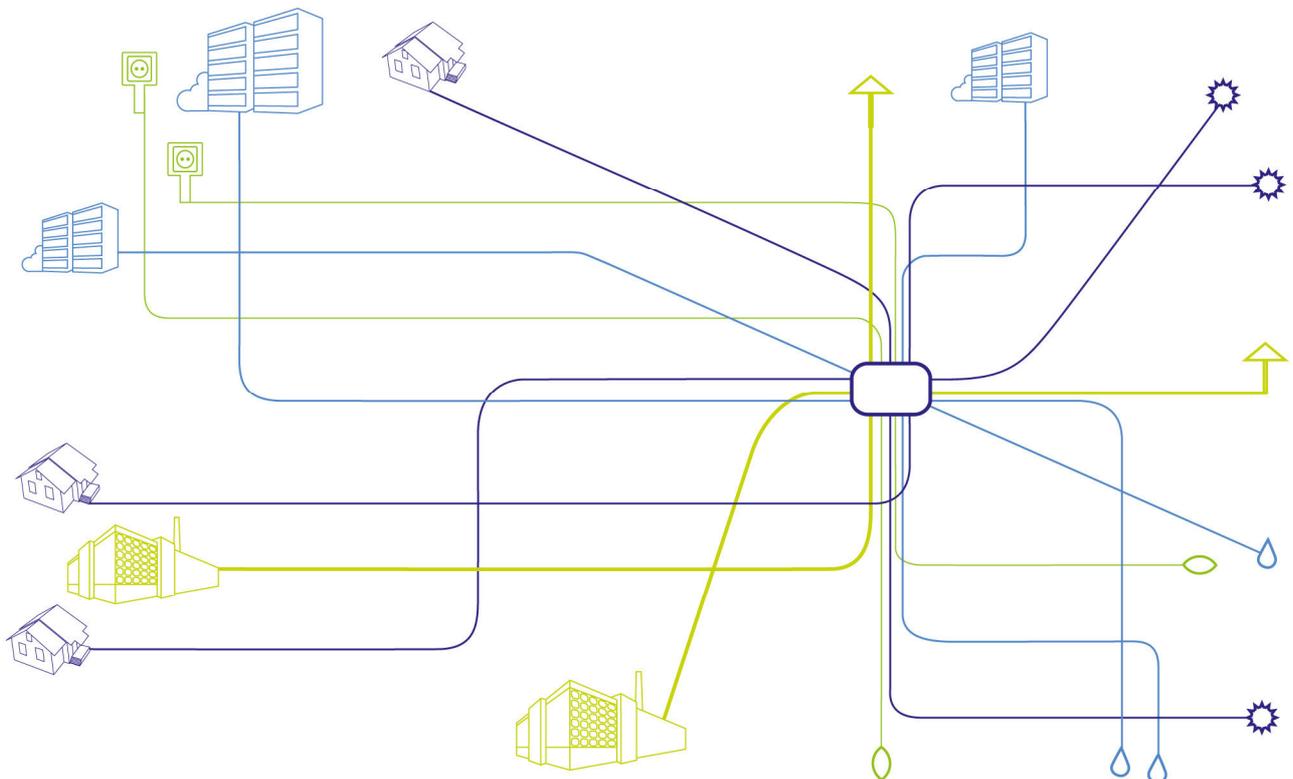




InnoCon

INN0vative CONcrete products

Energy Storage in PCM-enhanced
cement-based materials



VORWORT

Die Publikationsreihe **BLUE GLOBE REPORT** macht die Kompetenz und Vielfalt, mit der die österreichische Industrie und Forschung für die Lösung der zentralen Zukunftsaufgaben arbeiten, sichtbar. Strategie des Klima- und Energiefonds ist, mit langfristig ausgerichteten Förderprogrammen gezielt Impulse zu setzen. Impulse, die heimischen Unternehmen und Institutionen im internationalen Wettbewerb eine ausgezeichnete Ausgangsposition verschaffen.

Jährlich stehen dem Klima- und Energiefonds bis zu 150 Mio. Euro für die Förderung von nachhaltigen Energie- und Verkehrsprojekten im Sinne des Klimaschutzes zur Verfügung. Mit diesem Geld unterstützt der Klima- und Energiefonds Ideen, Konzepte und Projekte in den Bereichen Forschung, Mobilität und Marktdurchdringung.

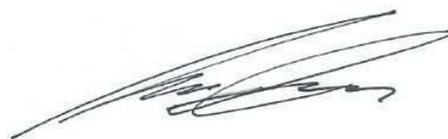
Mit dem **BLUE GLOBE REPORT** informiert der Klima- und Energiefonds über Projektergebnisse und unterstützt so die Anwendungen von Innovation in der Praxis. Neben technologischen Innovationen im Energie- und Verkehrsbereich werden gesellschaftliche Fragestellung und wissenschaftliche Grundlagen für politische Planungsprozesse präsentiert. Der **BLUE GLOBE REPORT** wird der interessierten Öffentlichkeit über die Homepage www.klimafonds.gv.at zugänglich gemacht und lädt zur kritischen Diskussion ein.

Der vorliegende Bericht dokumentiert die Ergebnisse eines Projekts aus dem Forschungs- und Technologieprogramm „Neue Energien 2020“. Mit diesem Programm verfolgt der Klima- und Energiefonds das Ziel, durch Innovationen und technischen Fortschritt den Übergang zu einem nachhaltigen Energiesystem voranzutreiben.

Wer die nachhaltige Zukunft mitgestalten will, ist bei uns richtig: Der Klima- und Energiefonds fördert innovative Lösungen für die Zukunft!



Theresia Vogel
Geschäftsführerin, Klima- und Energiefonds



Ingmar Höbarth
Geschäftsführer, Klima- und Energiefonds

Grundlagen für die Mehrskalenmodellierung und die thermo-chemische Simulation von innovativen zementgebundenen Materialien

Ch. Pichler und R. Lackner
September 2013

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen für die Bestimmung der effektiven Eigenschaften von Kompositmaterialien - Mehrskalenmodellierung	2
2.1	Differentialschema zur Bestimmung der effektiven Eigenschaften von Matrix/Einschluss-Kompositmaterialien	2
2.2	Erweiterung des Differentialschemas auf mehrere Einschlussphasen	4
2.3	Beispiel für die Anwendung des Mehrskalenmodells	5
3	Thermo-chemische Simulation von Bauteilen	5
3.1	Algorithmisierung im Rahmen der Finiten Elemente Methode	5
3.1.1	Feldgleichung für axialsymmetrische Probleme	5
3.1.2	Schwache Formulierung und Diskretisierung	8
3.2	Parameterstudien	9
3.2.1	Tagesgang der Temperatur: Auswirkung auf ein ebenes Bauteil	9
3.2.2	Einfluss von Phasenwechselmaterialien auf den Heiz-/Kühlenergiebedarf	11
3.2.3	Berücksichtigung realitätsnaher Randbedingungen: Jahresgang der Temperatur	13
4	Added value der entwickelten theoretischen Grundlagen	14

1 Einleitung

In diesem Endbericht werden die im Rahmen des Forschungsprojektes geschaffenen theoretischen Grundlagen für ...

- die Mehrskalenmodellierung der mechanischen Eigenschaften sowie der Wärmetransporteigenschaften von hochporösen und hochgefüllten Kompositmaterialien, wie den untersuchten innovativen zementgebundenen Materialien sowie
- die thermo-chemische Simulation von Bauteilen aus den erwähnten Kompositmaterialien unter Berücksichtigung einer temperaturabhängigen Phasenwechselenthalpie präsentiert. Die betontechnologische Umsetzung dieser theoretischen Grundlagen ist Gegenstand aktueller Forschungsarbeiten (z.B. [8, 7]) und soll im Zuge weiterer Forschungsprojekte fortgesetzt werden.

2 Grundlagen für die Bestimmung der effektiven Eigenschaften von Kompositmaterialien - Mehrskalenmodellierung

Während man bei einem Kompositmaterial aus mehreren Materialphasen für die Bestimmung der Dichte ρ [kg/m³], der Wärmespeichkapazität c [kJ/(kg K)] und der Phasenwechselenthalpie Δh [kJ/m³] mit einer einfachen Mittelung der Volumsfraktionen der Materialphasen das Auslangen findet, muss für die Ermittlung der Wärmeleitfähigkeit k [kJ/(m h K)] des Kompositmaterials die Morphologie berücksichtigt werden. Dazu kommen Homogenisierungsverfahren für Matrix-Einschluss Materialien zum Einsatz, die auf klassischen Methoden der Kontinuumsmikromechanik führen (siehe z.B. [4, 2, 9]).

Die Bestimmung der effektiven Eigenschaften im Rahmen der Mehrskalenmodellierung geht von der Kompositrezeptur, d.h. den Volumsfraktionen der verschiedenen Materialphasen und den intrinsischen Eigenschaften dieser Materialphasen aus und basiert auf klassischen, einfach anwendbaren analytischen Homogenisierungsverfahren. Das mehrskalenbasierte Konzept (siehe Abbildung 1) soll in den folgenden Projektjahren zur Optimierung thermischer und mechanischer Eigenschaften verwendet werden, wobei sich im Fall von (mikro)porösen Kompositmaterialien (i) der Widerstand gegen mechanische Belastung (d.h. die Steifigkeit des Materials) und (ii) der Widerstand gegen Wärmedurchgang als gegenläufige Funktionen darstellen. Der Widerstand ist dabei (i) eine monoton fallende und (ii) eine monoton steigende Funktion in Abhängigkeit vom Porengehalt. Die Berücksichtigung von Phasenwechselmaterialien (PCMs) in der Rezeptur, wobei sowohl die Steifigkeit als auch die Wärmeleitfähigkeit der PCMs i.a. geringer als der entsprechende Wert für das Matrixmaterial ist, haben eine ähnliche Auswirkung auf das effektive Verhalten.

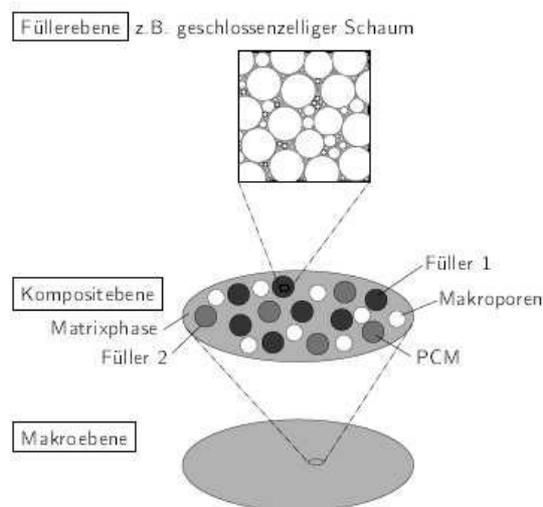


Abbildung 1: Mehrskalenmodell zur Bestimmung effektiver elastischer Eigenschaften und effektiver Wärmeleitfähigkeit von (mikroporösen) Matrix/Einschluss Materialien

2.1 Differentialschema zur Bestimmung der effektiven Eigenschaften von Matrix/Einschluss-Kompositmaterialien

Die untenstehenden Gleichungen sollen zur Bestimmung der effektiven elastischen Eigenschaften und der effektiven Wärmeleitfähigkeit von Zwei- und Mehrphasen Kompositmaterialien verwendet werden:

- Im ersten Fall sind die Materialtensoren $M_i (M_{i1}, M_{i2}, \dots)$, M_m und M_{eff} mit dem Elastizitätstensor des (der) Einschlussmaterials (-materialien) $C_i (C_{i1}, C_{i2}, \dots)$, des Matrixmaterials C_m und des gesuchten, homogenisierten Materials C_{eff} zu ersetzen.
- Zur Bestimmung der effektiven Wärmeleitfähigkeit sind, unter Annahme isotropen Materialverhaltens $M_i (M_{i1}, M_{i2}, \dots)$, M_m und M_{eff} durch die skalaren Werte für die Wärmeleitfähigkeit des (der) Einschlussmaterials (-materialien) $k_i (k_{i1}, k_{i2}, \dots)$, des

Matrixmaterials k_m und des gesuchten, homogenisierten Materials k_{eff} zu ersetzen. Der Eshelbytensor S_m vereinfacht sich hierbei bei Annahme kugelförmiger Einschlüsse auf den skalaren Wert 1/3.

Ausgangspunkt für das Differentialschema ist das Modell der dünnen Defektverteilung für ein Zweiphasenmedium, das die Situation der Verteilung einer niedrigkonzentrierten Einschlussphase „i“ im Matrixmaterial abbildet, wobei die Interaktion der Einschlüsse vernachlässigt werden kann. Dieses Modell stellt die direkte Anwendung der Eshelbylösung [3] dar [4]. Der effektive Materialtensor ist eine Funktion der Materialtensoren des Matrix- sowie des Einschlussmaterials, M_m und M_i :

$$M_{eff} = M_m + f_i(M_i - M_m) : [\mathbb{I} + S_m : M_m^{-1} : (M_i - M_m)]^{-1} . \quad (1)$$

In Gleichung (1) bezeichnet f_i die Volumsfraktion der Einschlussphase. Das Differentialschema stellt eine infinitesimale Formulierung des Modell der dünnen Defektverteilung dar [4]. Ausgehend vom homogenen Matrixmaterial M_m wird die Einschlussphase in infinitesimalen Schritten df_i in das Matrixmaterial eingebettet. Nach jedem dieser Schritte erfolgt die Aktualisierung der Eigenschaften der Matrixphase laut dem Modell der dünnen Defektverteilung, das für den Fall einer infinitesimalen Volumsfraktion der Einschlussphase die exakte Lösung darstellt. Im $(n+1)$ -ten Schritt repräsentiert $M_{eff}^n(f_i^n)$ das Materialverhalten des Matrixmaterials (siehe Bild 2). Dann wird einerseits das infinitesimale Volumen dV , das $f_i^n dV$ des Einschlussmaterials enthält, aus dem Kontrollvolumen entfernt. Andererseits wird das entfernte Volumen dV durch das Einschlussmaterial ersetzt. Daraus ergibt sich im $(n+1)$ -ten Schritt die Zunahme der Volumsfraktion der Einschlussphase auf $f_i^{n+1} = f_i^n + df_i$ und aus der Volumsbilanz:

$$(f_i^n + df_i)V = f_i^n V - f_i^n dV + dV \rightarrow \frac{dV}{V} = \frac{df_i}{1 - f_i^n} . \quad (2)$$

Das Modell der dünnen Defektverteilung ergibt sich für den $(n+1)$ -ten Schritt als

$$\begin{aligned} M_{eff}^{n+1}(f_i^{n+1}) &= M_{eff}^{n+1}(f_i^n + df_i) \\ &= M_{eff}^n(f_i^n) + \frac{dV}{V}(M_i - M_{eff}^n(f_i^n)) : \\ &\quad [\mathbb{I} + S_{eff}(f_i^n) : (M_{eff}^n(f_i^n))^{-1} : (M_i - M_{eff}^n(f_i^n))]^{-1} , \end{aligned}$$

wo dV/V die Volumsfraktion des Einschlussinkrements laut Gleichung (2) bezeichnet. Die Differentialgleichung zur Bestimmung des effektiven Materialtensors folgt dann zu

$$\begin{aligned} \frac{dM_{eff}^{n+1}(f_i^{n+1})}{df_i} &= \frac{M_{eff}^{n+1} - M_{eff}^n}{df_i} \\ &= \frac{1}{1 - f_i^n}(M_i - M_{eff}^n(f_i^n)) : \\ &\quad [\mathbb{I} + S_{eff}(f_i^n) : (M_{eff}^n(f_i^n))^{-1} : (M_i - M_{eff}^n(f_i^n))]^{-1} \end{aligned} \quad (4)$$

und
$$M_{eff}^{n+1} = M_{eff}^n + dM_{eff}^{n+1} \quad (5)$$

wobei die Anfangsbedingung

$$M_{eff}(f_i = 0) = M_m \quad (6)$$

gilt.

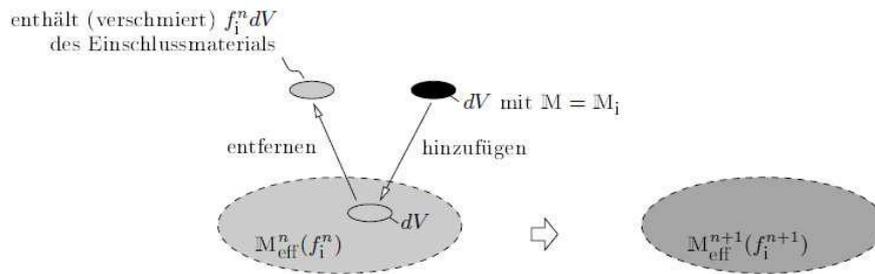


Abbildung 2: $(n+1)$ -ter Schritt im Zuge der Anwendung des Differentialschemas zur Bestimmung der effektiven Eigenschaften eines Zweiphasenmediums

2.2 Erweiterung des Differentialschemas auf mehrere Einschlussphasen

Die Generalisierung der Methode der dünnen Defektverteilung auf mehrere Einschlussphasen „i1“, „i2“, ... gibt

$$\mathbb{M}_{\text{eff}} = \mathbb{M}_m + \sum_{j=1,2,\dots} f_{ij}(\mathbb{M}_{ij} - \mathbb{M}_m) : [\mathbb{I} + \mathbb{S}_m : \mathbb{M}_m^{-1} : (\mathbb{M}_{ij} - \mathbb{M}_m)]^{-1}, \quad (7)$$

Im $(n+1)$ -ten Schritt des Differentialschemas beträgt der Materialtensor des Matrixmaterials $\mathbb{M}_{\text{eff}}^n(f_{i1}^n, f_{i2}^n, \dots)$. In Analogie zum Differentialschema mit einer Einschlussphase werden infinitesimale Volumina dV_{i1}, dV_{i2}, \dots aus dem betrachteten Bereich entfernt, die $f_{i1}^n dV_{i1}, f_{i2}^n dV_{i2}, \dots$ des jeweiligen Einschlussmaterials enthalten. Die gleichen Volumina dV_{i1}, dV_{i2}, \dots werden durch die Einschlussmaterialien „i1“, „i2“, ... ersetzt, was zu einer Vergrößerung der Volumensfraktionen auf $f_{i1}^{n+1} = f_{i1}^n + df_{i1}, f_{i2}^{n+1} = f_{i2}^n + df_{i2}, \dots$ führt. Das Gleichungssystem, das die Bilanz der aktuellen Volumensfraktionen der Einschlussphasen „i1“, „i2“, ... abbildet, ergibt sich zu

$$\begin{aligned} (f_{i1}^n + df_{i1})V &= f_{i1}^n V - f_{i1}^n dV_{i1} - f_{i1}^n dV_{i2} - f_{i1}^n dV_{i3} - \dots + dV_{i1} \\ (f_{i2}^n + df_{i2})V &= f_{i2}^n V - f_{i2}^n dV_{i1} - f_{i2}^n dV_{i2} - f_{i2}^n dV_{i3} - \dots + dV_{i2} \\ &\vdots \end{aligned} \quad (8)$$

Spezifizierung von Gleichung (7) auf den $(n+1)$ -ten Schritt des Differentialschemas führt auf

$$\begin{aligned} d\mathbb{M}_{\text{eff}}^{n+1}(f_{i1}^{n+1}, f_{i2}^{n+1}, \dots) &= \sum_{j=1,2,\dots} \frac{dV_{ij}}{V} (\mathbb{M}_{ij} - \mathbb{M}_{\text{eff}}^n(f_{ij}^n)) : \\ &\quad [\mathbb{I} + \mathbb{S}_{\text{eff}}^n(f_{ij}^n) : (\mathbb{M}_{\text{eff}}^n(f_{ij}^n))^{-1} : (\mathbb{M}_{ij} - \mathbb{M}_{\text{eff}}^n(f_{ij}^n))]^{-1}, \end{aligned} \quad (9)$$

wobei dV_{ij}/V aus dem Gleichungssystem (8) zu

$$\frac{dV_{ij}}{V} = \frac{df_{ij} \left(1 - \sum_{k=1,2,\dots,j} f_{ik}^n \right) + f_{ij}^n \sum_{k=1,2,\dots,j} df_{ik}}{1 - \sum_{k=1,2,\dots} f_{ik}^n} \quad (10)$$

bestimmt wird.

2.3 Beispiel für die Anwendung des Mehrskalensmodells

Anhand des erhaltenen funktionalen Zusammenhänge zwischen Materialzusammensetzung und technischen Eigenschaften können Betonrezepturen mit vorgegebenen mechanischen Eigenschaften hinsichtlich ihrer Wärmedämmeigenschaften zielorientiert konzipiert werden. Die Ergebnisse dieses Optimierungskonzepts sind in [6, 5] zusammengefasst (siehe Abbildung 3).

3 Thermo-chemische Simulation von Bauteilen

3.1 Algorithmisierung im Rahmen der Finiten Elemente Methode

3.1.1 Feldgleichung für axialsymmetrische Probleme

Ausgangspunkt für die Herleitung der Feldgleichung für das axialsymmetrische thermochemische Problem ist das infinitesimale Volumselement dV (siehe Abbildung 4(a)).

Der Aggregatzustand des PCMs wird durch den Soliditätsgrad ξ beschrieben, mit $\xi = 1$ für den festen Aggregatzustand und $\xi = 0$ für den flüssigen Aggregatzustand.

Die zur Überwindung des Phasenwechsels notwendige Wärmemenge wird als Phasenwechselenthalpie l_ξ bezeichnet.

Die Veränderung der Wärme zufolge einer infinitesimalen Temperaturänderung dT entspricht $(\rho c) dT dV$, wobei ρ die Dichte und c die Wärmespeicherkapazität bezeichnet. Wenn die Veränderung der Temperatur innerhalb eines infinitesimalen Zeitschritts dt auftritt, kann die Veränderungen dT durch $\partial T / \partial t dt$ ersetzt werden,

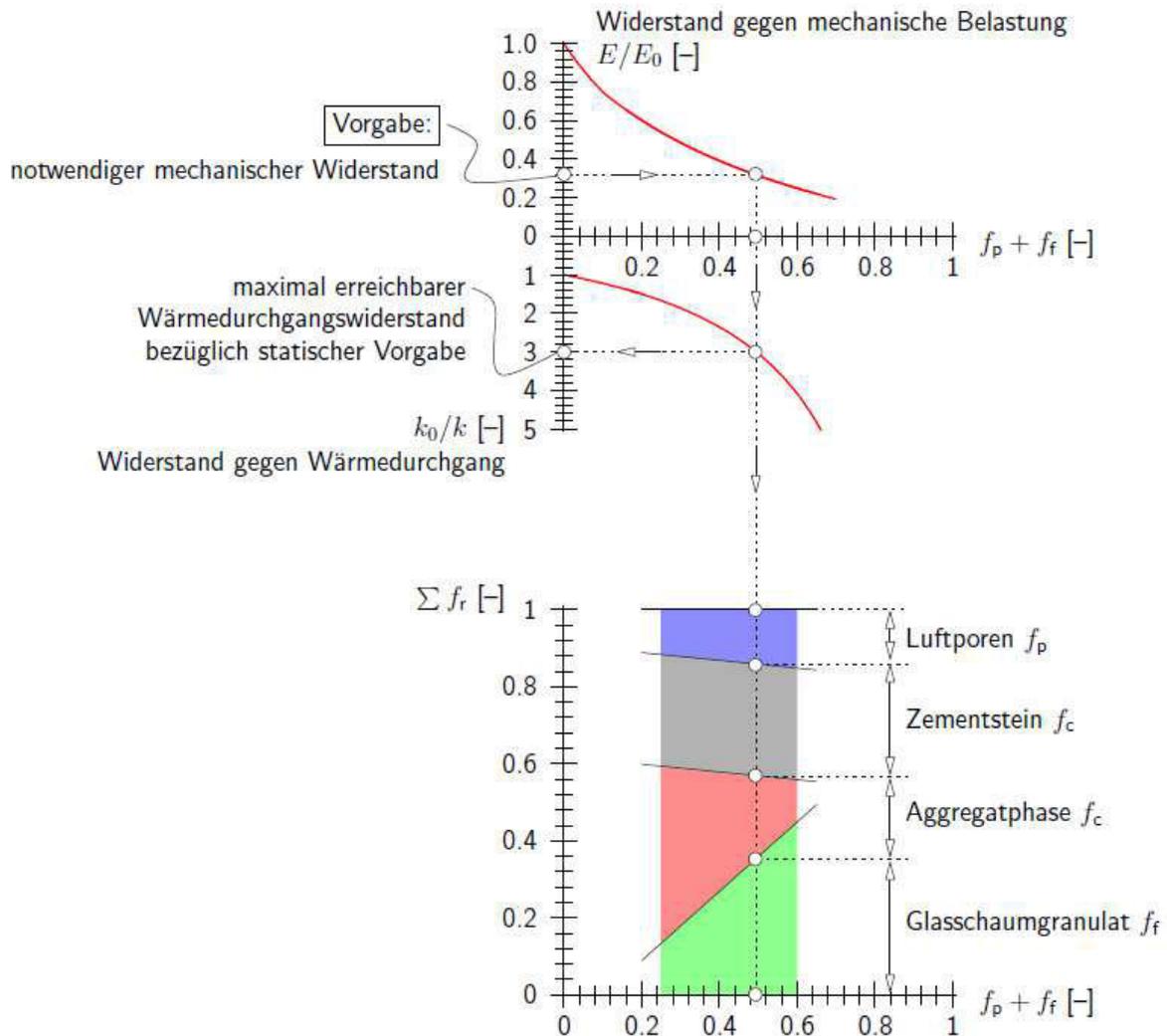


Abbildung 3: Optimierung des Materialverhaltens von hochporösem Leichtbeton auf Glasschaumgranulatbasis, Proportionierung der Anteile der Materialfraktionen in der Rezeptur

was schlussendlich auf $(\rho c) \frac{\partial T}{\partial t} dV dt$ führt. Im Zeitschritt dt fließt die Wärmemenge $q(r) dS(r) dt$ in das Volumen, wobei q den Wärmefluss und S die Oberfläche bezeichnet. Im selben Zeitschritt fließt die Wärmemenge $q(r+dr) dS(r+dr) dt$ aus dem Volumen. Setzt man die Veränderung der Wärmemenge $(\rho c) \frac{\partial T}{\partial t} dV dt$ in Bezug auf die Wärmemenge aus der Phasenwechselenthalpie $\ell_\xi d\xi dV$ spezialisiert, auf einen infinitesimalen Zeitschritt $\ell_\xi \frac{\partial \xi}{\partial t} dV dt$, ergibt sich

$$(\rho c) \frac{\partial T}{\partial t} dt dV = \ell_\xi \frac{\partial \xi}{\partial t} dt dV + q(r) dt dS(r) - q(r+dr) dt dS(r+dr). \quad (11)$$

Ersetzt man dV durch $r d\varphi dr dz$, $dS(r)$ durch $r d\varphi dz$, $dS(r+dr)$ durch $(r+dr) d\varphi dz$ und schreibt $q(r+dr)$ als Taylor Reihe, folgt

$$(\rho c) \frac{\partial T}{\partial t} dt r d\varphi dr dz = \ell_\xi \frac{\partial \xi}{\partial t} dt r d\varphi dr dz + q dt r d\varphi dz - \left(q + \frac{\partial q}{\partial r} dr + \dots \right) dt (r+dr) d\varphi dz. \quad (12)$$

In Gleichung (15) werden n_1 und n_{n+1} als -1 und +1 gesetzt; \bar{q} ist ein vorgeschriebener Wärmefluss.

3.1.2 Schwache Formulierung und Diskretisierung

Durch Einführung eines beliebigen, kontinuierlichen Temperaturfeldes δT , das der Randbedingung $\delta T = 0$ auf S_T genügt, erhält man eine schwache Formulierung der Differentialgleichung (14) und der Randbedingungen (Gleichungen 15):

$$\int_{r_1}^{r_{n+1}} \delta T \left[-k \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - k \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + (\rho c) \frac{\partial T}{\partial t} - \ell_\xi \frac{\partial \xi}{\partial t} \right] (2\pi r) dr + \delta T_1 \left[-k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_1} + \bar{q}_1 \right] (2\pi r_1) + \delta T_{n+1} \left[k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_{n+1}} + \bar{q}_{n+1} \right] (2\pi r_{n+1}) = 0. \quad (16)$$

Partielle Integration des ersten Terms in Gleichung (16) ergibt

$$\begin{aligned} -2\pi \int_{r_1}^{r_{n+1}} (r \delta T) k \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} dr = & \\ -2\pi (r_{n+1} \delta T_{n+1}) k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_{n+1}} + 2\pi (r_1 \delta T_1) k \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_1} & \quad (17) \\ + 2\pi \int_{r_1}^{r_{n+1}} \delta T k \frac{\partial T}{\partial r} dr + 2\pi \int_{r_1}^{r_{n+1}} r \frac{\partial(\delta T)}{\partial r} k \frac{\partial T}{\partial r} dr . & \end{aligned}$$

Einsetzen von Gleichung (17) in Gleichung (16) ergibt

$$\int_{r_1}^{r_{n+1}} \left[\frac{\partial(\delta T)}{\partial r} k \frac{\partial T}{\partial r} + \delta T (\rho c) \frac{\partial T}{\partial t} - \delta T \ell_\xi \frac{\partial \xi}{\partial t} \right] (2\pi r) dr + \delta T_1 \bar{q}_1 (2\pi r_1) + \delta T_{n+1} \bar{q}_{n+1} (2\pi r_{n+1}) = 0. \quad (18)$$

Räumliche Diskretisierung ($T = N\mathbf{v}$, daraus folgt $\Delta T = N\Delta\mathbf{v}$ und $\delta T = N\delta\mathbf{v}$) und zeitliche Diskretisierung ($\partial T/\partial t \rightarrow \Delta T/\Delta t$ und $\partial \xi/\partial t \rightarrow \Delta \xi/\Delta t$) führen auf

$$\delta\mathbf{v}^T (\mathbf{R}_k + \mathbf{R}_{(\rho c)} + \mathbf{R}_\xi + \mathbf{R}_{bc}) = 0 \quad (19)$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_k &= \left[\mathbf{A} \int_{r_e}^{r_{e+1}} \left(\frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial r} k \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial r} \right) (2\pi r) dr \right] \mathbf{v}, \\ \mathbf{R}_{(\rho c)} &= \left[\mathbf{A} \int_{r_e}^{r_{e+1}} \left(\mathbf{N}^T \frac{(\rho c)}{\Delta t} \mathbf{N} \right) (2\pi r) dr \right] \Delta\mathbf{v}, \\ \mathbf{R}_\xi &= \left[\mathbf{A} \int_{r_e}^{r_{e+1}} \left(\mathbf{N}^T \ell_\xi \frac{\Delta \xi}{\Delta t} \right) (2\pi r) dr \right], \\ \mathbf{R}_{bc} &= \mathbf{1}_1 \bar{q}_1 (2\pi r_1) + \mathbf{1}_{n+1} \bar{q}_{n+1} (2\pi r_{n+1}). \end{aligned} \quad (20)$$

In Gleichung (20) bezeichnen $\mathbf{1}_1$ und $\mathbf{1}_{n+1}$ Vektoren mit $n+1$ Komponenten: $\mathbf{1}_1^T = [1, 0, 0, \dots]$ und $\mathbf{1}_{n+1}^T = [\dots, 0, 0, 1]$. Die Lösung von $\mathbf{R}_k + \mathbf{R}_{(\rho c)} + \mathbf{R}_\xi + \mathbf{R}_{bc} = 0$ für diskrete Zeitpunkte erfolgt mit Hilfe eines inkrementell-iterativen Algorithmus [1, 10]:

$$\mathbf{R}^{(k)} + \left. \frac{d\mathbf{R}}{dv} \right|^{(k)} \Delta \mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{0}, \quad (21)$$

wobei (k) den jeweiligen Iterationsschritt bezeichnet und die sog. konsistente Tangente zu

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\mathbf{R}}{dv} \right|^{(k)} = & \sum_{e=1}^n \int_{r_e}^{r_{e+1}} \left(\frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial r} k \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial r} \right) (2\pi r) dr \\ & + \sum_{e=1}^n \int_{r_e}^{r_{e+1}} \left(\mathbf{N}^T \frac{(\rho c)}{\Delta t} \mathbf{N} \right) (2\pi r) dr \\ & - \sum_{e=1}^n \int_{r_e}^{r_{e+1}} \left(\mathbf{N}^T \ell_\xi \frac{1}{\Delta t} \left. \frac{d\xi}{dT} \right|^{(k)} \mathbf{N} \right) (2\pi r) dr \end{aligned} \quad (22)$$

gegeben ist. Für die Berechnung des ebenen Problems (Raumkoordinate x) werden die Terme $(2\pi r)$, $(2\pi r_1)$ und $(2\pi r_{n+1})$ in Gleichungen (20) und (22) durch 1 und $\int_{r_e}^{r_{e+1}} \dots dr$ durch $\int_{x_e}^{x_{e+1}} \dots dx$ ersetzt.

3.2 Parameterstudien

3.2.1 Tagesgang der Temperatur: Auswirkung auf ein ebenes Bauteil

Im Rahmen einer numerischen Studie auf Basis des entwickelten Programms wurde der Phasenwechsel von fest ($\xi=1$) zu flüssig ($\xi=0$) des PCMs durch folgende Materialfunktion beschrieben (siehe Abbildung 5):

$$\begin{aligned} \xi &= 1 - \exp \left[- (T_{\text{char}} - T)^2 / \kappa_{\text{char}}^2 \right] & \text{für } T \leq T_{\text{char}} \\ \xi &= 0 & \text{für } T > T_{\text{char}}, \end{aligned} \quad (23)$$

was eine quasi-Sprungfunktion bei der charakteristischen Temperatur T_{char} darstellt.

κ_{char} ist ein Materialparameter, der die Breite des Phasenübergangs beschreibt. In einer ersten Parameterstudie wurde das in Abbildung 6 dargestellte Szenario betrachtet: An der Innenseite eines ebenen Bauteils mit Dicke d wird die Temperatur

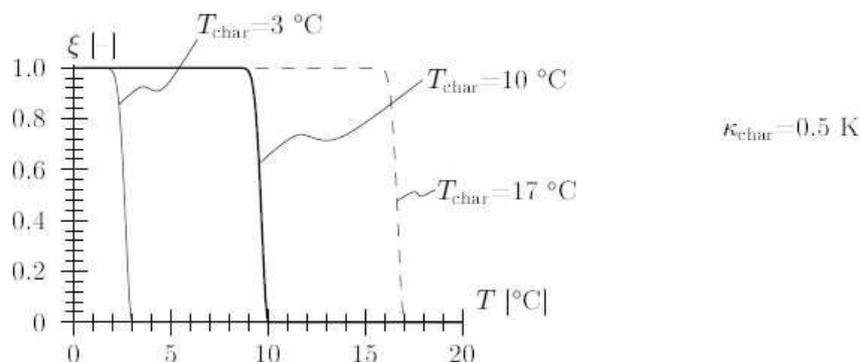


Abbildung 5: Materialfunktion für das PCM

T_i konstant gehalten. An der Außenseite wird die Temperatur sinusförmig mit einer Periodendauer von 24 h vorgeschrieben, wobei der Mittelwert \bar{T} und die Amplitude betragen. Der Minimalwert von T_a tritt jeweils um 3:00, der Maximalwert um 15:00 auf. Ausgewertet wurde der Wärmefluss an der Innenseite q_i [$\text{kJ}/(\text{m}^2\text{h})$], der notwendig ist um T_i konstant zu halten. Um die Ergebnisse für verschiedene Materialparameter vergleichen zu können, wurde q_i normiert:

$$\Pi_q = \frac{q_i}{k \text{grad} \bar{T}} \quad (24)$$

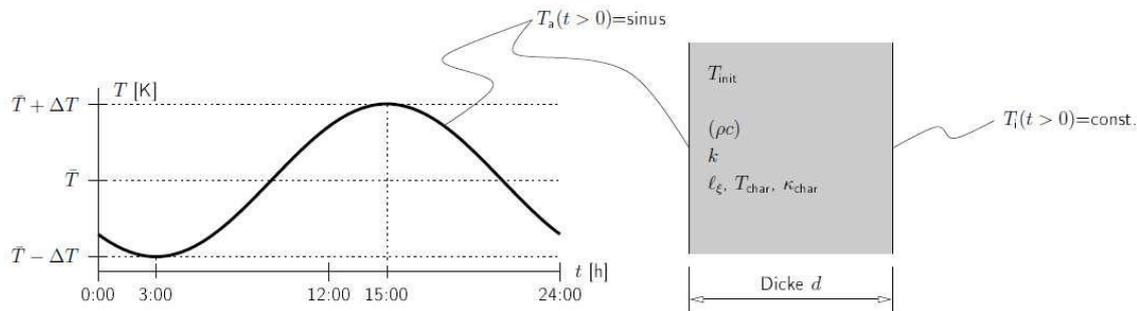


Abbildung 6: Materialparameter und Randbedingungen für die Parameterstudie

In Gleichung (24) bezeichnet $\overline{\text{grad} \bar{T}}$ den mittleren Temperaturgradienten mit

$$\overline{\text{grad} \bar{T}} = \frac{T_i - \bar{T}}{d} \quad (25)$$

Für das inerte Material ($l_{\xi}=0$) ist die Trägheit des Systems bzw. die Dämpfung des Wärmeflusses nach dem Einstellen eines quasi-stationären Zustandes eine Funktion des Diffusionskoeffizienten $D = k/(\rho c)$ [m^2/h]: je kleiner D ist, desto größer ist die Trägheit des Systems (siehe Abbildung 7).

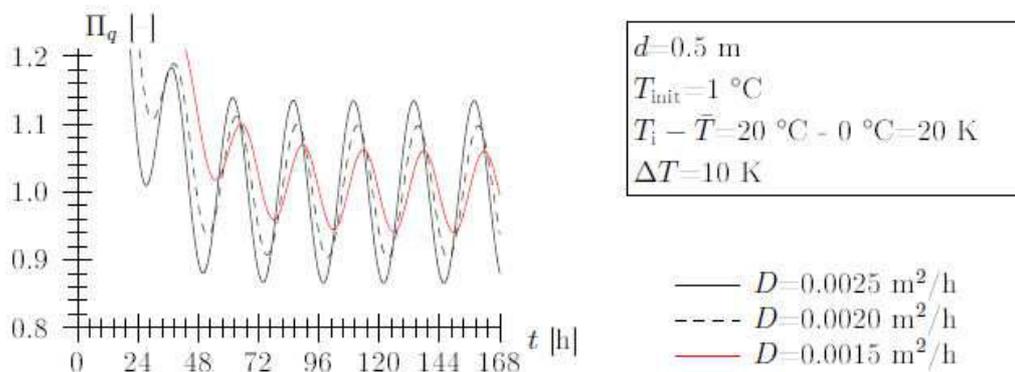


Abbildung 7: Normierter Wärmefluss für inertes Materialverhalten

- Bei Berücksichtigung einer Phasenwechselenthalpie wird die Dämpfung des Systems verstärkt (siehe Abbildung 8). Vergleicht man den dämpfenden Effekt aus der Reduzierung von D (siehe Abbildung 7) mit dem dämpfenden Effekt aus der Erhöhung der Phasenwechselenthalpie l_{ξ} (z.B. roter, durchgezogener Graph in Abbildungen 7 und 8), so ist Π_q in Abbildung 8 durch einen geringeren Phasenversatz, d.h. Nachlauf der Minima/Maxima bezüglich der Minima/Maxima des Temperaturgangs gekennzeichnet.
- Durch entsprechende Abstimmung der charakteristischen Temperatur der PCMs T_{char} (in Bezug auf die an den Rändern herrschenden Temperaturen) lässt sich die Dämpfung für eine gegebene Phasenwechselenthalpie optimieren (siehe Abbildung 9).

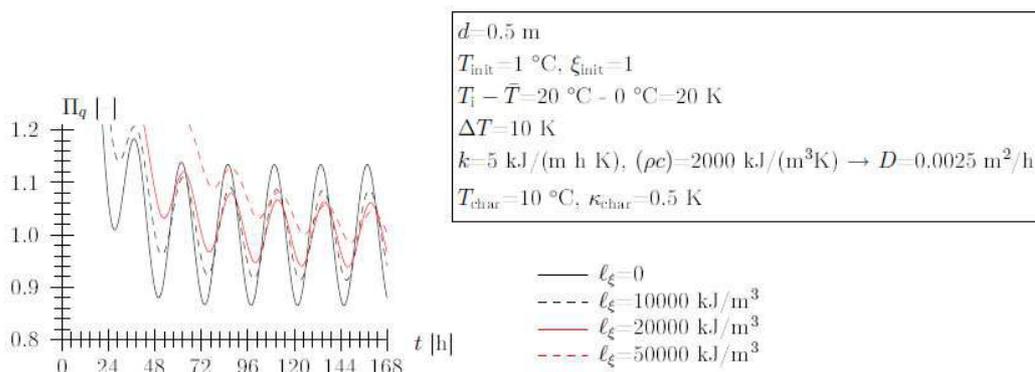


Abbildung 8: Normierter Wärmefluss bei Berücksichtigung von PCMs im Kompositwerkstoff

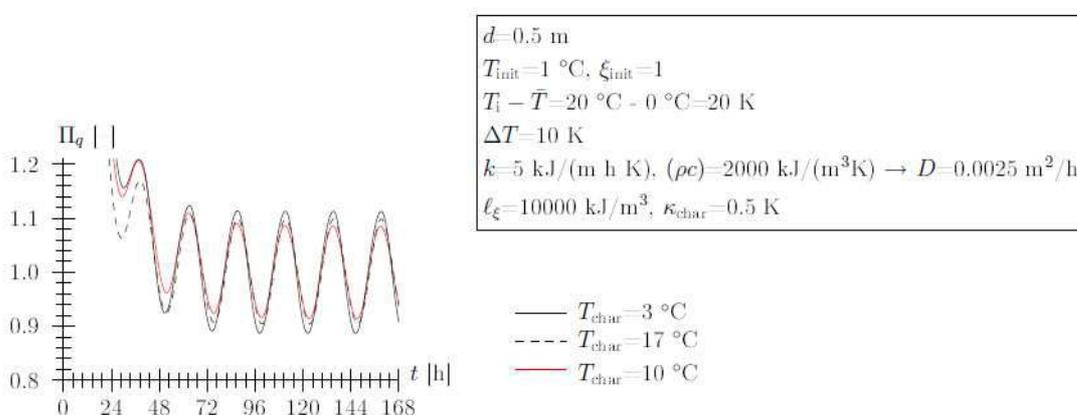


Abbildung 9: Auswirkung der charakteristischen Temperatur des PCMs auf den normierten Wärmefluss

3.2.2 Einfluss von Phasenwechselmaterialien auf den Heiz-/Kühlenergiebedarf

Eine geplante Hauptanwendung von PCMs ist der Wärme-/Kälteschutz: tageszeitliche Schwankungen sollen durch ein entsprechendes Wärmespeichervermögen ausgeglichen werden ohne dass dabei eine ausgesprochen massive Struktur, d.h. große Wandstärken notwendig sind. In einer Parameterstudie wurde die Auswirkung (i) des Wertes der Phasenwechselenthalpie des PCM-modifizierten Betons und (ii) der räumlichen Verteilung des PCMs im Bauteil untersucht. An der Innenseite „i“ eines ebenen Bauteils mit Dicke $d=0,20\text{m}$ wird die Temperatur $T_i=20\text{ }^\circ\text{C}$ konstant gehalten. An der Außenseite „a“ wird die Temperatur sinusförmig mit einer Periodendauer von 24 h vorgeschrieben, wobei der Mittelwert \bar{T} gleich der Innenseitentemperatur gesetzt wird, $\bar{T} = T_i$; die Amplitude der Außenseitentemperatur wird zu $\Delta T = \pm 7,5\text{ }^\circ\text{C}$ gesetzt (vgl. Abbildung 6). Der Minimalwert von T_a tritt jeweils um 3:00, der Maximalwert um 15:00 auf. Die Wärmeleitfähigkeit $k=5 \text{ kJ}/(\text{m h K})$ und die Wärmekapazität $(\rho c)=2000 \text{ kJ}/(\text{m}^3\text{K})$ wurde über die Gesamtdicke des Bauteils konstant gehalten und entspricht charakteristischen Werten für Beton. Die 11 Phasenwechseltemperatur des PCMs, T_{char} , wurde zu $20,42\text{ }^\circ\text{C}$ so gewählt, dass sich für $T = T_i$ das Ausmaß der Phasenumwandlung $\xi = \bar{\xi} = 0,5$ ergibt:

$$T_{\text{char}} = T_i + \kappa_{\text{char}} \sqrt{-\ln(1 - \bar{\xi})} \quad (26)$$

wobei κ_{char} zu $0,5 \text{ K}$ gesetzt wurde. Initial betragen Temperatur und Ausmaß der Phasenumwandlung im Bauteil $20\text{ }^\circ\text{C}$ und $0,5$. Ergebnis der thermo-chemischen Simulation ist der Wärmefluss an der

Innenseite $\underline{q \cdot n}$ [kJ/(m²h)], der notwendig ist um T_i konstant zu halten (siehe Abbildung 10). Die zeitliche Integration des Wärmeflusses ergibt die notwendige Heiz-/Kühlenergie (siehe Abbildung 11). Je größer die Phasenwechselenthalpie des Materials ist, desto

ℓ

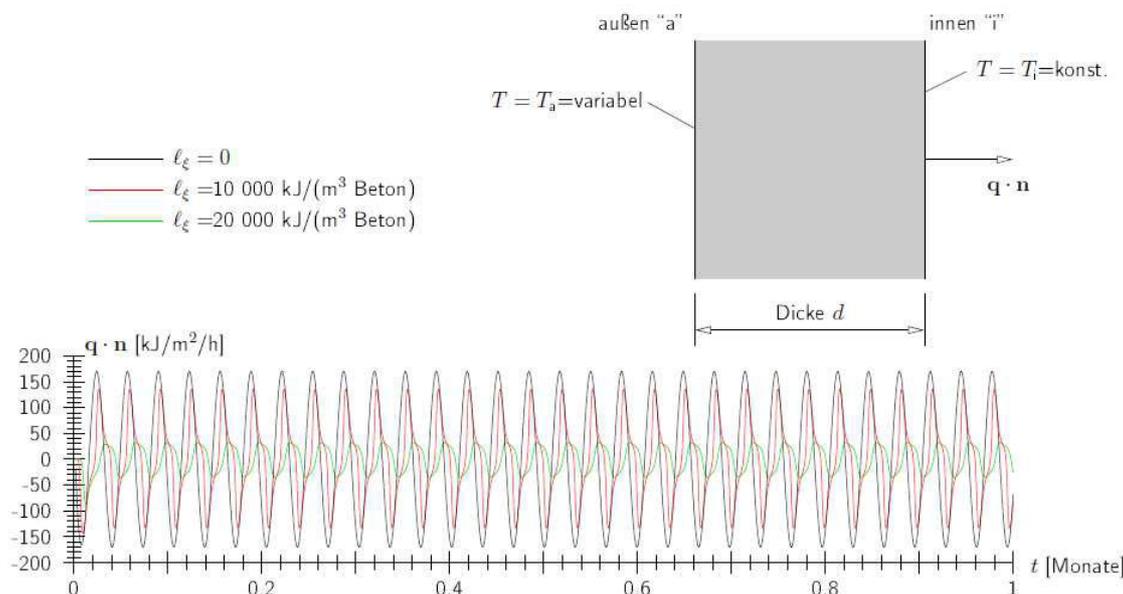


Abbildung 10: Wärmefluss an der Innenseite des Bauteils

ausgeprägter ist die Dämpfung des notwendigen Wärmeflusses an der Innenseite und desto kleiner die notwendige Heiz-/Kühlenergie, die in Abbildung 11 für einen simulierten Zeitraum von 6 Monaten angeführt ist. Eine Fragestellung aus der Ingenieurspraxis bezieht sich auf die optimale räumliche Anordnung des PCMs im Träger/Matrixmaterial. In einer Parameterstudie (siehe Abbildungen 12 und 13) wurde der gesamte PCM Gehalt im Bauteil mit $\ell_\xi \times d = 10\,000 \text{ kJ}/\text{m}^3 \times 0,2 \text{ m} = 2000 \text{ kJ}/\text{m}^2$ konstant gehalten und

- homogen über die Dicke d verteilt (schwarzer Graph in Abbildungen 12 und 13);
- in der äußeren Bauteilhälfte (grüner Graph) oder
- der inneren Bauteilhälfte (blauer Graph) angeordnet; sowie

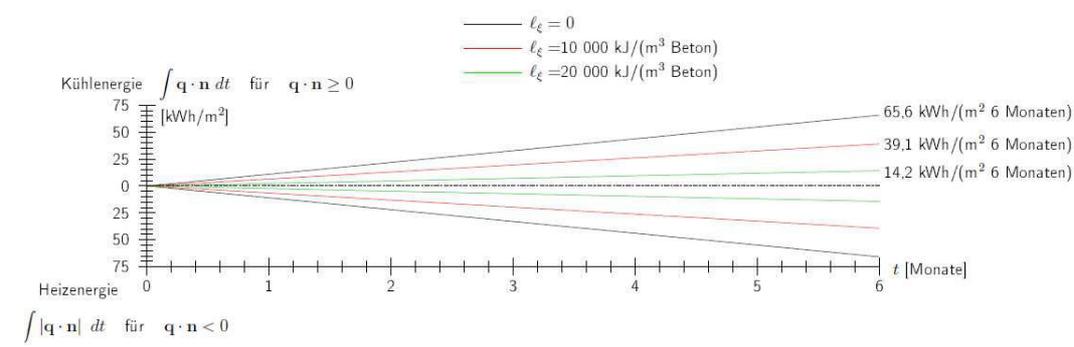


Abbildung 11: Notwendige Heiz/Kühlenergie zur Aufrechterhaltung der Temperatur an der Innenseite des Bauteils

¹Siehe Gleichung (23.1), Materialfunktion für das PCM: $\xi = 1 - \exp[-(T_{\text{char}} - T)^2/\kappa_{\text{char}}^2]$ für $T < T_{\text{char}}$; $\xi = 1$... fester, $\xi = 0$... flüssiger Zustand.

- im inneren Bauteilviertel (roter Graph) platziert.

Die thermischen Randbedingungen sowie die übrigen Materialparameter entsprechen den oben angegebenen. Während die Anordnung in der äußeren Hälfte zu einer Erhöhung der notwendigen Heiz/Kühlenergie führt (im Vergleich zur homogenen Anordnung, siehe Abbildung 13), lässt sich mit der Anordnung auf der Bauteilinnenseite der Energiebedarf weiter minimieren, wobei die Aufteilung des PCMs auf die Hälfte der Dicke im Rahmen der betrachteten Szenarien das Optimum darstellt.

3.2.3 Berücksichtigung realitätsnaher Randbedingungen: Jahresgang der Temperatur

Für ein realitätsnahes Temperaturszenario wurde der von der ZAMG publizierte Jahresgang der Temperatur (exemplarisch für Innsbruck, Standort Universität, Seehöhe 578 m) sinusförmig approximiert (strichlierter Graph in Abbildung 14, mittlere Temperatur 9 °C, Amplitude ± 10 °C, niedrigste mittlere Temperatur Mitte Jänner²). Für die tageszeitlichen Schwankungen wurde eine Amplitude von 6°C angenommen, wobei der Minimalwert der tageszeitlichen Schwankungen um 3:00 auftritt. Um Ausreißer in den tageszeitlichen Schwankungen zu berücksichtigen wurde jeden siebten Tag abwechselnd die negative bzw. positive Auslenkung verdoppelt. In einer Parameterstudie wurde ein 0,2 m dickes Bauteil, in der das PCM in der inneren Bauteilhälfte angeordnet ist, betrachtet. An der Innenseite wird die Temperatur mit $T_i=18^\circ\text{C}$ konstant gehalten, an der Außenseite der oben angeführte Temperaturgang eingepreßt. Initial betragen Temperatur (über die Gesamtdicke) und Ausmaß der Phasenumwandlung (in der inneren Hälfte) des Bauteils 18_C und 0,5. Die Wärmeleitfähigkeit und die Wärmekapazität betragen wie in den vorherigen Parameterstudien $k=5$ kJ/(m h K) und $(pc)=2000$ kJ/(m³K) (über die Gesamtdicke des Bauteils konstant). Die Phasenwechseltemperatur des PCMs beträgt $T_{\text{char}}=18,42^\circ\text{C}$ und $k_{\text{char}}=0,5$ K.

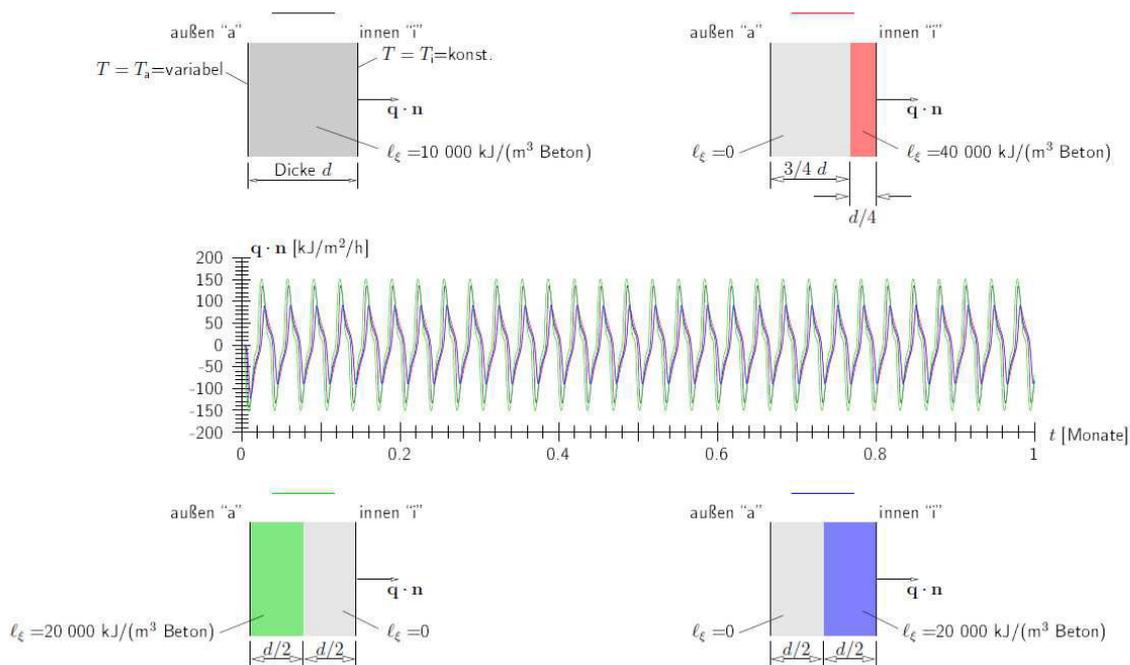


Abbildung 12: Wärmefluss an der Innenseite des Bauteils

² In den Berechnungen wurde die Dauer eines „mittleren“ Monats = 1 Jahr/12 = 365×24/12=8760/12=730 h = 30,42 Tage gesetzt.

Die Dämpfung der tageszeitlichen Schwankungen im Wärmeflusses an der Innenseite des Bauteils ist in jenen Monaten am stärksten ausgeprägt, in denen die mittlere Außentemperatur der vorgegebenen Innenseitentemperatur ähnelt (Juni, Juli, August; siehe Abbildung 15) und vergrößert sich mit der Phasenwechselenthalpie des Materials. So lässt sich mit $\ell_{\xi}=40\,000\text{ kJ/m}^3$ in der inneren Hälfte des Bauteils die notwendige Kühlenergie von 32,5 auf 6,9 kWh/m² reduzieren (Einsparung von 32,5-6,9=25,6 kWh/m² auf das Jahr bezogen, siehe Abbildung 16). Die notwendige Heizenergie reduziert sich von 579,2 auf 553,2 kWh/m² (Einsparung von 579,2-553,2=26,0 kWh/m²).

4 Added value der entwickelten theoretischen Grundlagen

Das entwickelte Mehrskalenmodell/Homogenisierungsverfahren sowie das numerische Simulationswerkzeug zur Bauteilbewertung bereiten das Fundament für weiterführende anwendungsorientierte Forschungsarbeiten im Bereich der Material- und Produktentwicklung für zementös gebundene Werkstoffe.

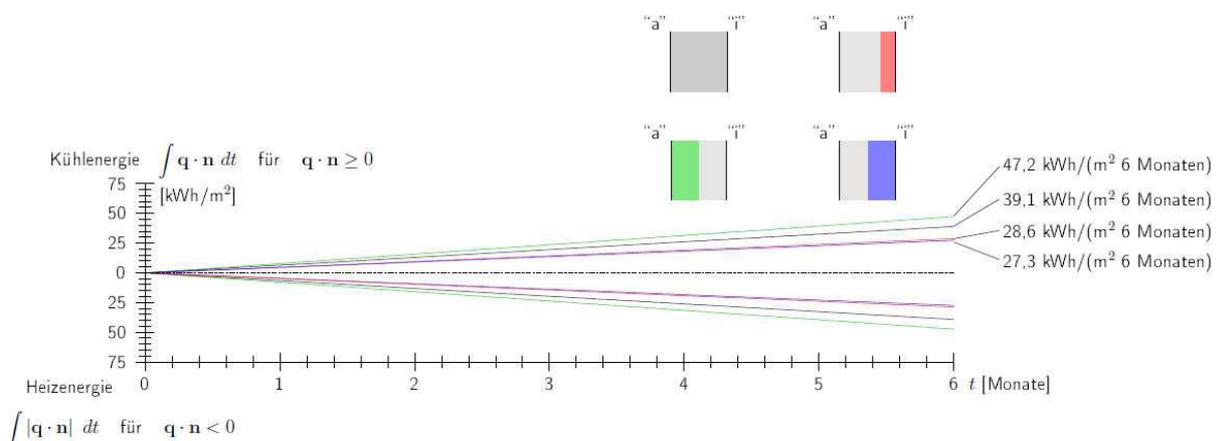


Abbildung 13: Notwendige Heiz/Kühlenergie zur Aufrechterhaltung der Temperatur an der Innenseite des Bauteils

Durch den Grundlagencharakter des gegenständlichen Forschungsprojektes und der, daraus folgenden, weitreichenden Anwendbarkeit der Ergebnisse, können in den weiterführenden Arbeiten auch unkonventionelle Ideen in der Werkstoffentwicklung (z.B. Biobeton auf Stärkebasis) physikalisch fundiert bewertet werden.

Literatur

- [1] K.-J. Bathe. Finite element procedures. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, USA, 1996.
- [2] L. Dormieux and E. Lemarchand. Homogenization approach of advection and diffusion in cracked porous material. ASCE Journal of Engineering Mechanics, 127(12):1267{1274, 12 2001.
- [3] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. Proceedings of the Royal Society of London A, 241:376{396, 1957.
- [4] D. Gross and T. Seelig. Bruchmechanik, mit einer Einführung in die Mikromechanik [Fracture mechanics, containing an introduction to continuum micromechanics]. Springer, 2001. In German.
- [5] Ch. Pichler, G. Metzler, Ch. Niederegger, and R. Lackner. Thermo-mechanical optimization of porous building materials based on micromechanical concepts: Application to load-carrying insulation materials. Composites Part B: Engineering, 43(3):1015{1023, 2012.

[6] Ch. Pichler, Ch. Niederegger, and R. Lackner. Mehrskalmodellierung von Thermobeton auf Glasschaumgranulatbasis: Charakterisierung und Prognose

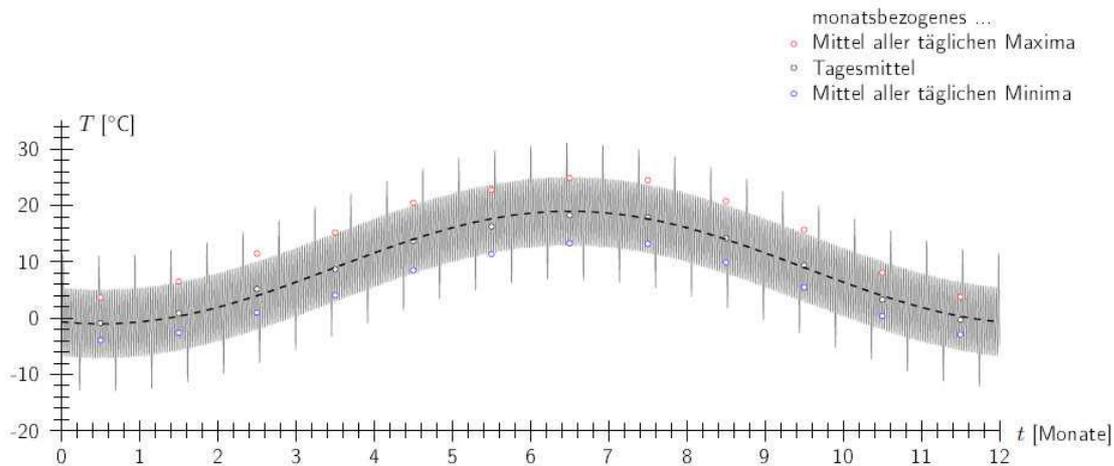


Abbildung 14: Jahresgang der Temperatur für Innsbruck, Universität, Seehöhe 578 m [ZAMG, Datenpunkte aus www.zamg.at, Klimadaten Österreich 1971–2000]

Abbildung 14: Jahresgang der Temperatur für Innsbruck, Universität, Seehöhe 578 m [ZAMG, Datenpunkte aus www.zamg.at, Klimadaten Österreich 1971{2000}]

der mechanischen und thermischen Eigenschaften. Bauingenieur, 86(9):365{370, 2011.

- [7] G. Weissteiner. Experimentelle Untersuchung der thermischen und mechanischen Eigenschaften von Betonrezepturen mit Phasen-Wechsel-Material (PCM). Master's thesis, University of Innsbruck, Innsbruck, Austria, 2013.
- [8] R. Wellenzohn. Teiladiabatische und differentialkalorimetrische versuche zur Bestimmung der Hydratationskinetik von Bindemitteln. Master's thesis, University of Innsbruck, Innsbruck, Austria, 2013.
- [9] A. Zaoui. Continuum micromechanics: Survey. Journal of Engineering Mechanics (ASCE), 128:808{816, 2002.
- [10] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, and J. Z. Zhu. The Finite Element Methods: its Basics and Fundamentals. Elsevier, Oxford, 2005.

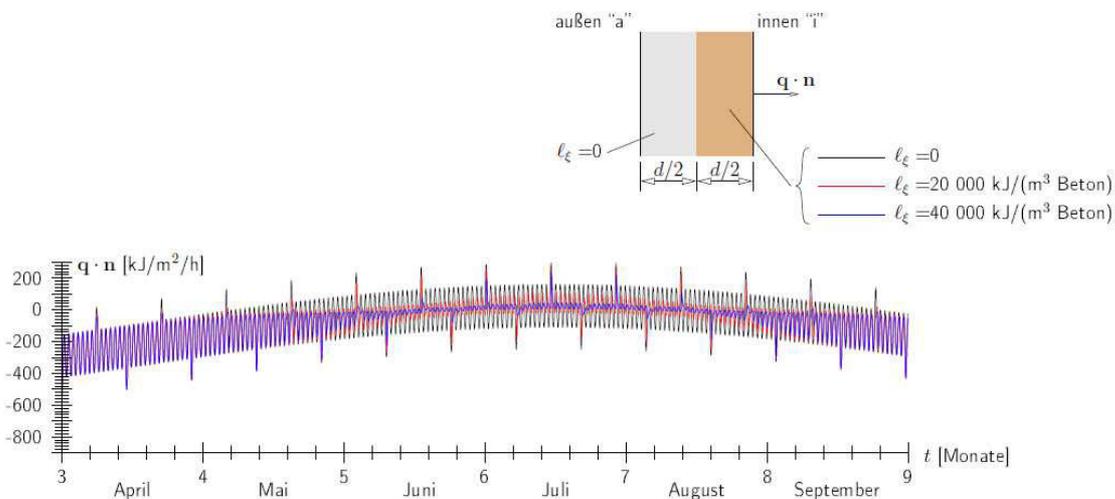


Abbildung 15: Wärmefluss an der Innenseite des Bauteils

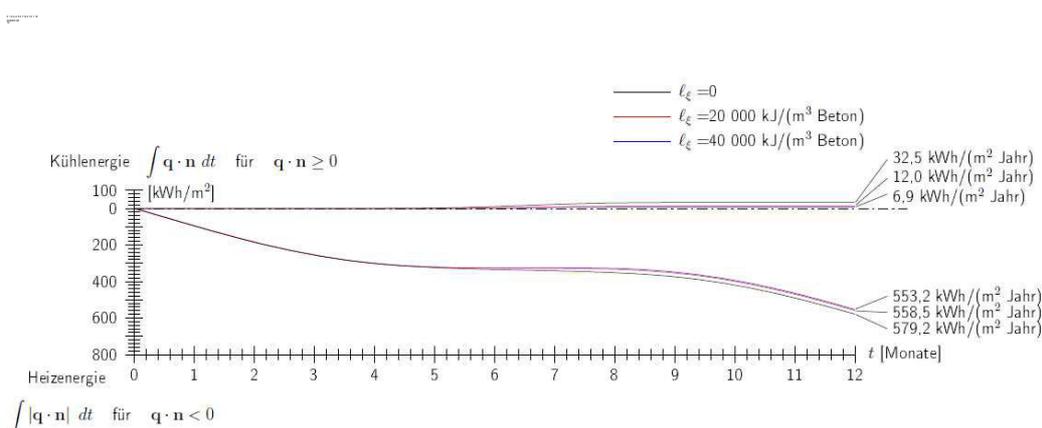


Abbildung 16: Notwendige Heiz/Kühlenergie zur Aufrechterhaltung der Temperatur an der Innenseite des Bauteils

IMPRESSUM

Verfasser

Universität Innsbruck Institut für
Konstruktion und Materialwissenschaften

Ch. Pichler und R. Lackner
Technikerstraße 13, 6020 Innsbruck
Telefon: +43-(0)512-507-63501
Fax: +43-(0)512-507-2902
Email: materialtechnologie@uibk.ac.at
Web: www.uibk.ac.at

Eigentümer, Herausgeber und Medieninhaber

Klima- und Energiefonds
Gumpendorfer Straße 5/22
1060 Wien
office@klimafonds.gv.at
www.klimafonds.gv.at

Disclaimer

Die Autoren tragen die alleinige
Verantwortung für den Inhalt dieses
Berichts. Er spiegelt nicht notwendigerweise
die Meinung des Klima- und Energiefonds
wider.

Der Klima- und Energiefonds ist nicht für die
Weiternutzung der hier enthaltenen
Informationen verantwortlich.

Gestaltung des Deckblattes

ZS communication + art GmbH