

## MODELLBILDUNG EINES PHASENWECHSEL-FASSADENELEMENTS IN IDA-ICE

I. Plüss<sup>1</sup>, Ph. Kräuchi<sup>1</sup>, D. Bionda<sup>1</sup>, M. Schröcker<sup>2</sup>, S. Felsenstein<sup>2</sup> und G. Zweifel<sup>1</sup>  
<sup>1</sup>Hochschule Luzern – Technik & Architektur, Horw, Schweiz  
<sup>2</sup>GlassX AG, Zürich, Schweiz

### KURZFASSUNG

Für ein transluzentes Fassadenelement, welches mit Hilfe von Phasenwechselmaterial die Energieeffizienz von Gebäuden steigern kann, wird für dessen thermisches Verhalten ein mathematisches Modell vorgestellt. Das Modell legt den Focus auf die Abbildung des Unterkühlungsverhaltens des eingesetzten Salzhydrats.

Zum Modell wurde ein Bibliotheksmodul für die Simulationssoftware IDA-ICE erstellt. Dazu wurde die Sprache NMF verwendet.

Weiter wird kurz darauf eingegangen, wie in NMF ein Wechseln zwischen unterschiedlich ausgestalteten Gleichungssystemen realisiert werden kann. Im vorliegenden Modell ist die Ausgestaltung je nach Phasenzustand des PCM unterschiedlich.

### ABSTRACT

A mathematical model is presented describing the thermal behavior for a translucent facade element, which uses phase change materials to increase building energy efficiency. The model puts the focus on accurately representing sub-cooling effects in the salt hydrate (phase change material) which is used.

Based on this model a library module for the simulation software IDA ICE was created, using the programming language NMF.

It is furthermore discussed how a change between differently structured systems of equations can be realized in NMF, since the model uses different ones depending on the state of the phase change material.

### EINLEITUNG

Das Fassadenelement verwendet ein Salzhydrat als Phasenwechselmaterial für die Speicherung von Latentwärme. Wie jedes PCM-Material zeigt dieses eine Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität und der Wärmeleitfähigkeit. Weiter zeigt es ein ausgeprägtes Unterkühlungsverhalten beim Abkühlen aus dem vollständig flüssigen Zustand. Beide Aspekte wurden als zentral für eine akkurate Abbildung der Schmelz- und Kristallisationsvorgänge identifiziert und im Modell berücksichtigt.

### MATHEMATISCHES MODELL

Das mathematische Modell repräsentiert eine homogene PCM-Schicht, welche an jeder Stelle denselben Zustand aufweist. Der Zustand ist ausgezeichnet durch die Temperatur, die Enthalpie, und den Anteil flüssiges (oder kristallisiertes) PCM. Die nachfolgend verwendeten Formelzeichen und Indizes sind in Tabelle 1 und Tabelle 2 beschrieben.

*Tabelle 1: Formelzeichen*

FORMELZEICHEN	BESCHREIBUNG
A	Fläche des PCM-Elementes [m <sup>2</sup> ]
C	flächenbezogene Wärmekapazität [(m <sup>2</sup> K)/W]
cp	spezifische Wärmekapazität [J/(kg K)]
H	Enthalpie [J/kg]
m	Masse [kg]
Q	Wärmestrom [W]
R	Wärmewiderstand [(m <sup>2</sup> K)/W]
T	Temperatur [°C]
X	Anteil festes bzw. flüssiges PCM am gesamten PCM [-]

*Tabelle 2: Indizes*

INDIZES	BESCHREIBUNG
a, b	seitliche Oberflächen des PCM-Elements
in use	aktuell massgeblicher Wert
lat	latent
lat_diff	latent, als Differenz zum Wert bei Simulationsstart
lat_eq	latent, im Gleichgewichtszustand
lat_max	latent, maximal (d.h. wenn alles PCM flüssig)
lat_sc	latent, unterkühlungsbedingt
liq	flüssig („liquid“)
pcm	Phasenwechselmaterial („Phase Change Material“)
sc	unterkühlungsbedingt (sc: „subcooling“)
sc_crys	unterkühlungsbedingte Kristallisation (sc: „subcooling“; crys: „crystallisation“)
sen	sensibel
solid	fest („solid“)

In NMF wird zwischen Gleichungen und Zuweisungen unterschieden (Sahlin, 1996-1, S. 16 und S. 18ff). Das Gleichungssystem umfasst im Sinne von NMF vier Gleichungen. Zwei dieser Gleichungen sind ohne zeitliche Ableitungen (1), zwei dieser Gleichungen sind Differentialgleichungen. Die erste beschreibt die Temperaturänderung in der PCM-Schicht (2), die zweite die Enthalpieänderung der PCM-Schicht (3). Weiter beinhaltet das Gleichungssystem mehrere Gleichungen, welche als NMF-Zuweisungen implementiert sind.

$$(1) \quad Q_a = A * \frac{T_a - T_{pcm}}{R_{in\ use}}, \quad Q_b = A * \frac{T_b - T_{pcm}}{R_{in\ use}}$$

$$(2) \quad (C_{sen} * A) * T' = Q_{sen}$$

$$(3) \quad \frac{dH_{lat\_diff}}{dt} m_{pcm} = Q_{lat} - Q_{sc\_crys}$$

In Gleichung (1) gilt für den flächenbezogenen Wärmewiderstand  $R_{in\ use}$  [(m<sup>2</sup> K)/W] die Zuweisung (4).

$$(4) \quad R_{in\ use} := (X_{solid} * R_{solid}) + (X_{liq} * R_{liq})$$

Der Fest- bzw. Flüssiganteil des PCM-Materials ( $X_{solid}$ ,  $X_{liq}$ ) ist durch die Zuweisungen (5) und (6) bestimmt.

$$(5) \quad X_{liq} := -0.002 + \left( 1.004 * \frac{H_{lat}}{H_{lat\_max}} \right)$$

$$(6) \quad X_{solid} := 1 - X_{liq}$$

In Gleichung (2) wird eine latente Wärmekapazität verwendet (Variable  $C_{sen}$ ) wie auch ein latenter Wärmestrom (Variable  $Q_{sen}$ ). Auf diese beiden Größen wird in den beiden folgenden Absätzen „Sensible und latente Wärmekapazität“ und „Sensibler und latenter Wärmestrom“ eingegangen.

### Sensible und latente Wärmekapazität

Die Wärmekapazität des PCM-Materials wird in eine sensible und latente Wärmekapazität unterteilt (Variablen  $C_{sen}$  und  $C_{lat}$ ). Beide Wärmekapazitäten sind flächenbezogen [J/(m<sup>2</sup> K)] und gemäss Zuweisungen (7) und (8) definiert.

$$(7) \quad C_{sen} := (X_{solid} * C_{solid}) + (X_{liq} * C_{liq})$$

$$(8) \quad C_{lat} := \frac{m_{pcm}}{A} * cp_{lat} \quad \text{,sofern festes PCM vorhanden}$$

$$C_{lat} := 0 \quad \text{,sofern alles PCM flüssig}$$

Die in Zuweisung (8) verwendete spezifische latente Wärmekapazität  $cp_{lat}$  [J/kg] ist temperaturabhängig im Modell vorgegeben. Diese Werte wurden mittels

Dynamischer Differenzkalorimetrie (DCS) experimentell bestimmt.

### Modus-Wechsel

Die Zuweisung (8) hat eine Abhängigkeit vom Systemzustand; sie tritt in zwei Ausgestaltungen auf. Entsprechend gibt es zeitlich ein Wechseln zwischen zwei verschiedenen ausgestalteten Gleichungssystemen. Dieser Wechsel wurde eventgesteuert implementiert, wie beispielhaft in Sahlin (1996-2, S. 51ff) beschrieben.

Welche der beiden Ausgestaltungen von Zuweisung (8) in einem bestimmten Zeitschritt im Modell verwendet wird, ist einzig abhängig vom Wert einer Modus-Variablen. Diese Modusvariable wird eventgesteuert geändert. Einer dieser Events wird ausgelöst, wenn die PCM-Temperatur eine gegebene kritische Temperatur unterschreitet (Parameter  $T_{sc}$ ).

### Sensibler und latenter Wärmestrom

Der Wärmestrom  $Q_{pcm}$  wird in einen sensiblen und latenten Wärmestrom unterteilt (Variablen  $Q_{sen}$  und  $Q_{lat}$ ). Beide Wärmeströme sind absolut [W] und gemäss Zuweisungen (9) und (10) definiert.

$$(9) \quad Q_{sen} := \frac{C_{sen}}{C_{sen} + C_{lat}} * Q_{pcm}$$

$$(10) \quad Q_{lat} := \frac{C_{lat}}{C_{sen} + C_{lat}} * Q_{pcm}$$

Der Wärmestrom  $Q_{pcm}$  ist berechnet über die Zuweisung (11).

$$(11) \quad Q_{pcm} := Q_a + Q_b + Q_{sc\_crys}$$

Die beiden Oberflächenwärmeströme  $Q_a$  und  $Q_b$  sind in den Gleichungen (1) verwendet. Der Wärmestrom  $Q_{sc\_crys}$  ist eine „Wärmequelle“ im PCM-Material. Sie kommt durch das Freiwerden des kumulierten Unterkühlungspotentials zustande. Dieser Unterkühlungsprozess ist im folgenden Absatz „Unterkühlung“ beschrieben.

### Unterkühlung

Das im Element verwendete PCM zeigt ein ausgeprägtes Unterkühlungsverhalten: Kühlt vollständig aufgeschmolzenes PCM unter die Schmelztemperatur ab, tritt vorerst keine Kristallisation auf. Im Verlaufe der weiteren Abkühlung setzt der Kristallisationsprozess plötzlich ein und ein bedeutender Anteil des PCM kristallisiert dann mit hoher Geschwindigkeit.

Dieser Effekt wird über ein Unterkühlungspotential modelliert. Es baut sich während dem Abkühlen in einer ersten Phase auf und wird nach Einsetzen der Kristallisation in einer zweiten Phase wieder frei.

Zur Berechnung des Unterkühlungspotentials wird eine temperaturabhängige Enthalpie definiert, welche das PCM im Gleichgewicht hätte (Variable  $H_{lat\_eq}$ ). Diese Gleichgewichts-Enthalpie wurde mittels Dynamischer Differenzkalorimetrie (DCS) experimentell bestimmt. Das Unterkühlungspotential ergibt sich als Differenz der aktuellen Enthalpie und der Gleichgewichts-Enthalpie (12).

$$(12) H_{lat\_sc} := H_{lat} - H_{lat\_eq}$$

Es wird angenommen, dass der freiwerdende Wärmestrom proportional zum kumulierten Unterkühlungspotential und zum Quadrat des Festanteils ist. Das Quadrat des Festanteils wurde gewählt, weil die Oberfläche der nadelförmigen Salzhydratkristalle in etwa proportional zum Festanteil sein dürfte.

Weiter geht die PCM-Masse (Variable  $m_{pcm}$ ) als Faktor ein, damit die Proportionalitäts-Konstante  $k$  unabhängig von der PCM-Masse ist und als einfacher Parameter in der Simulation variiert werden kann.

$$(13) Q_{sc\_cryst} := k * m_{pcm} * H_{lat\_sc} * X_{solid}^2$$

## MODELBIldUNG IN IDA-ICE

### Einschicht- und Mehrschicht-Modell

Das mathematische Modell wurde für eine homogene PCM-Schicht definiert. In der Anwendung kann dieses mathematische Modell einfach oder mehrfach eingesetzt werden, entsprechend ergibt sich ein Einschicht- oder ein Mehrschicht-PCM Modell. (siehe Abbildung 1 bzw. Abbildung 2).

Das mathematische Modell ist in einem NMF-Block implementiert. Dieser Block kommt im Einschicht-Modell nur als eine Instanz vor, im 11-Schicht-Modell erscheint er 11-fach. Das Modell ist jeweils als Makro realisiert; die beiden oben erwähnten Abbildungen zeigen dieses Makro.

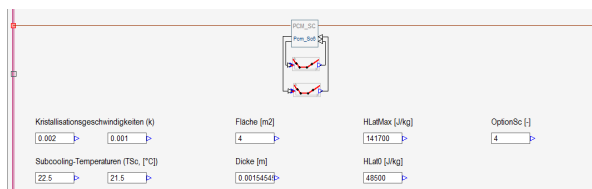


Abbildung 1: Makro mit 1-Schicht PCM-Modell

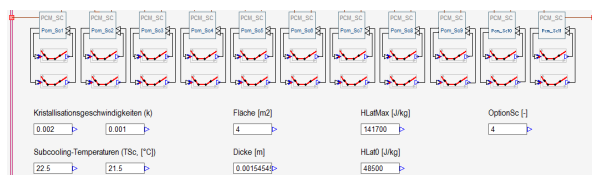


Abbildung 2: Makro mit 11-Schicht PCM-Modell

Im folgenden ist das Mehrschichtmodell Gegenstand der Betrachtung; eine Simulation mit dem Einschichtmodell ist in Kräuchi et al. (2014) gezeigt.

### Einbettung des PCM-Modells in das Validierungsmodell

Nachfolgend wird das Gesamtmodell präsentiert, mit welchem Messungen nachsimuliert wurden. Dieses Gesamtmodell ist in Abbildung 3 gezeigt. Das Teilmodell, welches die 11 PCM-Schichten enthält, ist darin als Makro enthalten („pcm\_th“). Auf beiden Seiten des PCM-Makros sind Standardkomponenten von IDA-ICE eingesetzt: direkt angrenzend an das PCM-Makro die Komponente „FDWall“, gefolgt von der Komponente „CESurf“. Diese beiden Elemente repräsentieren die auf beiden Seiten des PCM-Elementes vorhandene Glasscheibe und den Wärmeübergang vom Glas zur Luft. Die Lufttemperatur ist beidseitig als Zeitprofil vorgegeben; es herrscht beidseitig dieselbe Lufttemperatur, welche vom gleichen Zeitprofil gelesen wird.

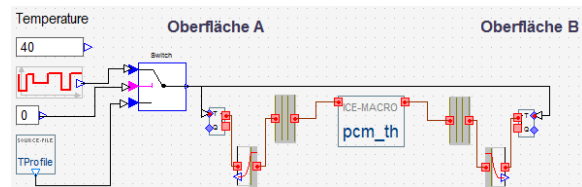


Abbildung 3: Gesamtmodell zum Messexperiment

## SIMULATION UND EXPERIMENT

### Simulation

Die hier beschriebene Simulation bildet ein Messexperiment nach. Im Experiment (Abbildung 4) wurde ein PCM-Element in einer Klimakammer einem zeitlichen Temperaturprofil ausgesetzt. Das Element bestand aus zwei Glasscheiben (Dicke je 6 mm), zwischen denen eine PCM-Schicht (Dicke 17 mm, Fläche 0.11 m<sup>2</sup>) eingeschlossen war.

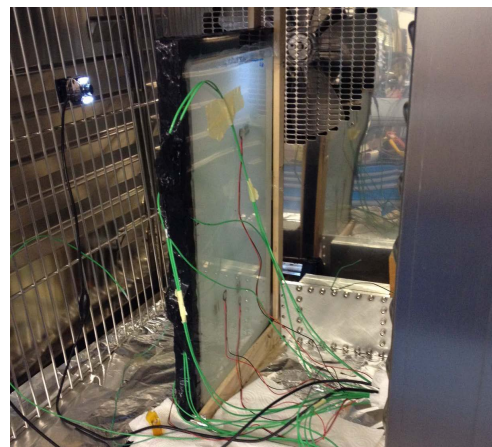


Abbildung 4: PCM Messprototyp

Während des Durchlaufes des Temperaturprofils wurden die Oberflächentemperaturen der Glas-scheiben sowie die Temperaturen innerhalb der PCM-Schicht an insgesamt 12 Messpunkten aufgenommen. Zusätzlich wurden die Wärmeströme durch das Glas mit Hilfe von 4 Wärmestromsensoren gemessen.

### Experiment (Parametrierung und Validierung)

Basierend auf den im vorgängig beschriebenen Experiment ermittelten Temperaturkurven wurde eine Parameter-Optimierung mittels MOBO (Palonen et al., 2013) vorgenommen. MOBO erlaubt eine Optimierung gleichzeitig nach mehreren Parametern. Hier wurden die Parameter  $k$  (Kristallisationsgeschwindigkeit) und  $T_{sc}$  (Unterkühlungstemperatur) optimiert. Das Optimierungskriterium war dabei eine möglichst gute Übereinstimmung von gemessener und simulierter PCM-Temperatur. Als Optimierungs-Zeitperiode wurde die langsame Abkühlungsperiode ausgehend vom vollständig aufgeschmolzenen PCM gewählt (Abbildung 4, von Stunde 13.0 h bis 39.8 h), weil der unterkühlungsbedingte Kristallisationsprozess bei langsamen Temperaturänderungen für die Praxis als sehr bedeutsam beurteilt wird.

Als simulierte Temperatur wurde die Temperatur der Mittelschicht verwendet (Instanz Nr. 6 des PCM-NMF-Bausteins); als gemessene PCM-Temperatur der Mittelwert aus den drei Temperaturmessungen der schicht-mittig plazierten Sensoren.

Die einzelnen PCM-Schichten wurden bezüglich der Unterkühlungsparameter unterschiedlich konfiguriert. Es wurden dazu je zwei Werte für  $k$  und für  $T_{sc}$  verwendet, welche die zwei Parametersets  $[k_1, T_{sc1}]$  und  $[k_2, T_{sc2}]$  bildeten. Dies deshalb, weil aufgrund der Messdaten vermutet wird, dass das PCM aus einem Stoffgemisch von zwei Stoffen mit unterschiedlichem Kristallisationsverhalten besteht. Die Schichten Nr. 2, 4, 8 und 10 wurden nach Set 2 konfiguriert, alle andern Schichten nach Set 1.

## ERGEBNISANALYSE UND DISKUSSION

Die beste Übereinstimmung wurde erreicht mit  $T_{sc1} = 22.78 \text{ °C}$  und  $T_{sc2} = 22.29 \text{ °C}$ , wobei die erste Geschwindigkeitskonstante  $k_1$  rund eine Größenordnung kleiner war wie die zweite Geschwindigkeitskonstante  $k_2$ . Die dazugehörigen Temperaturverläufe sind in Abbildung 5 gezeigt.

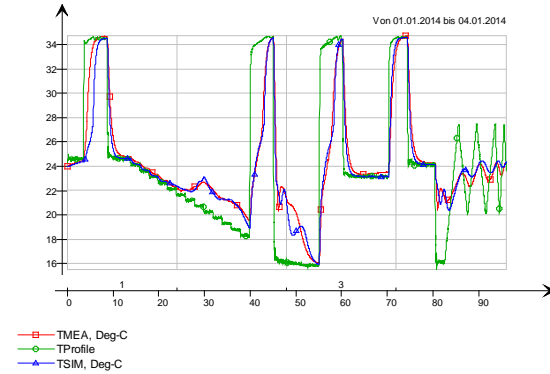


Abbildung 5: Temperatur-Verlauf im PCM (rot: gemessen, blau: simuliert) und in der Luft (grün)

Während den ersten Stunden des Labor-Experimentes soll ein wohldefinierter Zustand des Systems erreicht werden. In diesem Zeitabschnitt dürften Abweichungen zwischen Simulation und Messung auf einen vom realen Systemzustand verschiedenen parametrisierten Startzustand zurückzuführen sein. Nach Erreichen vollständiger Aufschmelzung stimmen die simulierten Werte generell gut mit den gemessenen Werten überein. Das Freiwerden des Unterkühlungspotentials während der langsamen Abkühlungsphase führt zu einer plötzlichen Temperaturerhöhung im PCM (von Stunde 27 h bis 40 h). Dieser Verlauf kann sehr gut reproduziert werden. Dafür entscheidend sind die bezüglich Unterkühlung unterschiedlich parametrisierten Schichten (2 Parametersets). In der zweiten, schnellen Abkühlungsphase (von Stunde 44 h bis 55 h) sind die Abweichungen grösser, allerdings dürften in der Praxis solche schnellen Abkühlungsprozesse kaum vorkommen. In der dritten unvollständigen Abkühlungsphase (von Stunde 60 h bis 70 h) wird die kritische Temperatur  $T_{sc1} = 22.78 \text{ °C}$  nicht unterschritten, das Unterkühlungspotential wird deshalb nicht frei.

Eine gute Übereinstimmung zeigen auch die gemessenen und simulierten Wärmeströme (Abbildung 6).

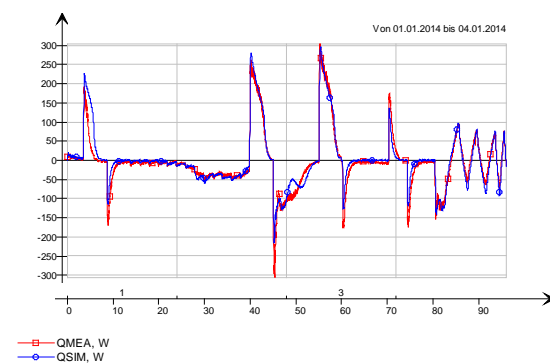


Abbildung 6: Wärmestrom-Verlauf im PCM (rot: gemessen, blau: simuliert)

## Ausblick

Parallel zur Modellbildung wurden Berechnungsansätze für die Überführung der dynamischen Simulation in stationäre Berechnungen entwickelt. Diese wurden mit den zuständigen Behörden besprochen, um eine spätere Verwendung der gewählten Methodik im Rahmen der relevanten Schweizer Normen zu ermöglichen.

Zurzeit wird das optische Verhalten des PCM-Material modelliert, insbesondere die Absorption der Solarstrahlung sowie die Wechselwirkung mit dem in dieser Veröffentlichung präsentierten thermischen PCM-Modell. Beide Modellteile werden zusammen in ein Makro gekapselt. Damit wird ein Standard IDA-ICE Gebäudemodell auf einfache Weise erweiterbar. Die Erweiterung erfolgt im Advanced Mode: Abbildung 7 zeigt das Zonenmodell, wie dieses standardmässig in IDA-ICE ausgestaltet ist. Abbildung 8 zeigt das mit einem PCM-Element ergänzte Zonenmodell.

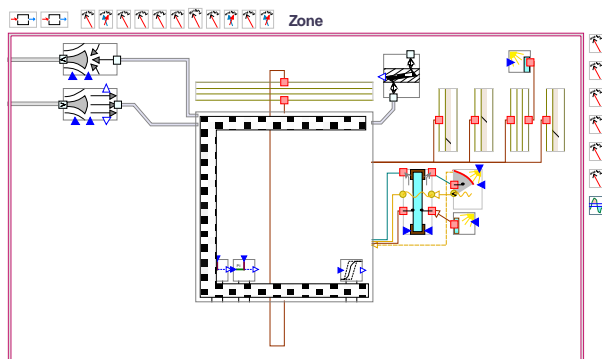


Abbildung 7: Zonenmodell Standard

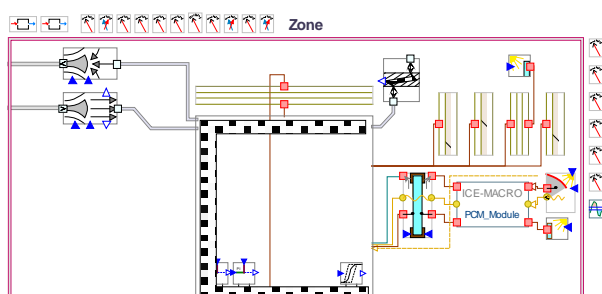


Abbildung 8: Zonenmodell mit PCM-Element

## ZUSAMMENFASSUNG

Das präsentierte PCM Modell kennzeichnet sich aus durch die Berücksichtigung der Unterkühlungseffekte, sowie der Temperaturabhängigkeit von Wärmekapazität und Leitfähigkeit.

An der EMPA in Dübendorf wurden Validierungsmessungen an einem PCM-Element in einer Klimakammer durchgeführt. Durch die Auswahl von geeig-

neten Temperaturverläufen und –sprüngen konnten so noch unbekannte Parameter wie Unterkühlungstemperatur und Kristallisationsgeschwindigkeit für das untersuchte System bestimmt werden. Zusätzlich dienten die Messdaten der Validierung des thermischen Modells. Es konnte eine hohe Übereinstimmung zwischen Simulationsresultaten und Messergebnissen gezeigt werden.

## DANKSAGUNG

An dieser Stelle sei Herr D. Jurt gedankt für Parameter-Optimierung mittels MOBO.

## LITERATUR

Kräuchi, Ph., Bionda, D., Plüss, I., Schröcker, M., Felsenstein, S., Zweifel, G., 2014. Thermisches Modell eines PCM-Fassadenelementes, eingereicht für 18. Status-Seminar «Forschen für den Bau im Kontext von Energie und Umwelt», Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Schweiz, 4. – 5. September 2014

Palonen, M., Hamdy, M., Hasan, A., 2013. MOBO a new software for multi-objective building performance optimization. BS2013, the 13th Conference of the International Building Performance Simulation Association, France, August 26-28 2013. <http://ibpsa-nordic.org/tools.php> (zugegriffen 11.6.2014)

Sahlin, P., Bring, A., Sowell, E.F., 1996-1. The Neutral Model Format for Building Simulation, Version 3.02, Royal Institute of Technology, Stockholm Sweden.

Sahlin, P., 1996-2. NMF Handbook. An Introduction to the Neutral Model Format. NMF version 3.02, Royal Institute of Technology, Stockholm Sweden.