

## Kurzfassung

Latente thermische Energiespeicher nutzen den Fest-flüssig-Phasenübergang eines Materials aus, um thermische Energie nahezu isotherm mit hoher Energiedichte zu speichern. Zur zielgerichteten Auslegung dieser Speicher kommen Experimente und Simulationen in Betracht. Analytische Methoden eignen sich nur zur Vorauslegung oder für überschlägige Berechnungen. Experimente sind aufwendig und damit teuer. Daher wird versucht, diese mehr und mehr durch numerische Methoden zu ersetzen. Hier tritt jedoch das Problem auf, dass diese Methoden unzureichend validiert sind. Aus diesem Grund unterliegen die damit erzielten Ergebnisse großer Unsicherheit.

Zur Lösung dieser Problemstellung wird in dieser Arbeit eine kombinierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse des Aufschmelzprozesses eines Paraffins in einem Quader durchgeführt. Die Validierung des zur Simulation des Phasenwechsels verwendeten Modells erfolgt mithilfe experimenteller Ergebnisse. Diese werden mit einem im Rahmen dieser Arbeit aufgebauten Teststands gewonnen. Eingangsparmeter der kombinierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse sind die Stoffdaten des PCM und die Rand- und Anfangsbedingungen des Experiments. Es zeigt sich, dass die Unsicherheit im Flüssigphasenanteil bei korrekter Implementierung der Stoffdaten zwischen  $\pm 5\%$  und  $\pm 6\%$  beträgt. Dies ist deutlich geringer, als es die teils stark schwankenden Ergebnisse aus der Literatur erwarten lassen. Weiterhin wird deutlich, dass insbesondere die Viskosität temperaturabhängig implementiert sein sollte, um eine geringe Unsicherheit zu erhalten. Unter der Annahme, dass die Stoffwerte im Modell als temperaturabhängig implementiert sind, haben die Wärmeleitfähigkeit im Festen, der Schmelzpunkt sowie die Feststoffdichte den größten Einfluss auf den Flüssigphasenanteil. Diese Größen sollten daher in erster Linie genauer bestimmt werden, um die Genauigkeit der Simulation zu erhöhen.

Neben dem Flüssigphasenanteil werden auch die über die Ränder des Simulationsgebiets fließenden Wärmeströme und die maximale Geschwindigkeit in der flüssigen Phase als Zielgröße der kombinierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse betrachtet. Für diese Größen wird daher ebenfalls die Unsicherheit bestimmt. Je nach Zielgröße beträgt sie zwischen  $\pm 4\%$  und  $\pm 20\%$ .

**Abstract**

Latent heat thermal energy storages utilize the solid-liquid phase transition of a material to store thermal energy almost isothermally with high energy density. Experiments or simulations can be used to design these storages. Analytical methods are only useful for preliminary design or rough calculations. Experiments are complex and expensive. Therefore, attempts are being made to replace them to an increasing extent by numerical methods. However, these methods are insufficiently validated. For this reason, the results obtained with these methods are subject to a high degree of uncertainty.

To solve this problem, a combined uncertainty and sensitivity analysis of a paraffin melting in a cuboid is performed in this thesis. The validation of the model used to simulate the phase change is done by means of experimental results. These are obtained through a test rig built for this thesis. Input parameters of the combined uncertainty and sensitivity analysis are the thermophysical properties of the PCM and the boundary and initial conditions of the experiment. It is shown that the uncertainty of the liquid fraction is between  $\pm 5\%$  and  $\pm 6\%$ , if the thermophysical properties are implemented correctly. This is considerably lower than what could be expected taking into account the varying literature results. Moreover, it is evident that the viscosity must be implemented to be temperature-dependent to obtain a low uncertainty. Assuming that the thermophysical properties are implemented as temperature-dependent, the thermal conductivity of the solid, the melting point and the solid density are the input parameters with the highest influence on the liquid fraction. Hence, these parameters should be measured with higher accuracy to improve the accuracy of the simulation.

In addition to the liquid fraction, also the heat flux flowing through the boundary of the simulation domain and the maximum velocity in the liquid phase are considered as objectives of the combined uncertainty and sensitivity analysis. Therefore, the uncertainty is also determined for these quantities. Depending on the quantity, the uncertainty lies between  $\pm 4\%$  and  $\pm 20\%$ .

# 1 Einleitung

Energiespeicher spielen eine entscheidende Rolle für das Gelingen der Energiewende. Durch den vermehrten Einsatz von regenerativen Energiequellen entsteht eine zeitliche Diskrepanz zwischen Energiebereitstellung und Verbrauch. Die Aufgabe von Energiespeichern ist es, diese Lücke zu schließen und eine stetige Energieversorgung sicherzustellen. Darüber hinaus kann durch das Einbinden eines Speichers in ein bestehendes Energiesystem dessen Effizienz erhöht und dessen Primärenergieverbrauch gesenkt werden. Energiespeicher werden anhand ihres Speicherprinzips in elektrische, elektrochemische, mechanische, chemische und thermische Speicher eingeteilt [1]. Einsatzgebiete für thermische Energiespeicher sind z. B. die Abwärmenutzung in wärmeintensiven Industrieanlagen [2], Pufferspeicher in Häusern [3], Hochtemperaturspeicher bei der solarthermischen Energieerzeugung [4] und in Zukunft Carnot-Batterien, auch Strom-Wärme-Strom-Speicher genannt [5, 6].

Eine wichtige Unterklasse der thermischen Energiespeicher bilden die latenten thermischen Energiespeicher. Diese beruhen auf dem Prinzip der Energiespeicherung durch einen Phasenwechsel und nutzen, aufgrund der hohen Phasenwechselenthalpie bei geringer Volumenänderung, meist den Fest-flüssig-Phasenübergang eines Speichermaterials aus. Die als Speichermaterialien in Frage kommenden Stoffe haben jedoch oftmals eine sehr geringe Wärmeleitfähigkeit [7]. Es liegt nahe, diese durch eine vergrößerte Übertragungsfläche zwischen Speichermaterial und Wärmeträgerfluid zu kompensieren, um akzeptable Be- und Entladeleistungen der Energiespeicher zu erhalten. Allerdings ist die Auslegung solcher Speicher mit erhöhter Übertragungsfläche sehr komplex und führt zu einem erhöhten Auslegungsaufwand. Daher gewinnen numerische Methoden zur Auslegung von latenten thermischen Energiespeichern zunehmend an Bedeutung. Sie können den Phasenwechsellvorgang zeitlich und räumlich besser auflösen als semi-analytische Methoden und sind deutlich günstiger als aufwändige Experimente.

Die Grundlage der simulationsgestützten Auslegung von latenten thermischen Energiespeichern bilden die Modelle und Algorithmen zur numerischen Lösung von Fest-flüssig-Phasenwechseln. Zwar gibt es in der wissenschaftlichen Literatur eine Vielzahl von Modellen und Lösungsstrategien [8, 9], jedoch sind die Modelle bisher unzureichend validiert und die damit erzielten Ergebnisse variieren stark. Dies gilt insbesondere für Modelle, die einen Phasenübergang unter dem Einfluss der natürlichen Konvektion in der flüssigen Phase und mit temperaturabhängigen Stoffdaten beschreiben. Die Gründe für die große Unsicherheit in den erzielten Ergebnissen

sind vielfältig. Ein gewichtiger Grund ist mit Sicherheit, dass es für diese Fälle keine analytischen Vergleichslösungen gibt. Daher werden die numerischen Modelle mit den Ergebnissen von Experimenten in einfachen Geometrien verglichen. Diese besitzen natürlich selbst eine gewisse Unsicherheit. Aus historischen Gründen werden zur Validierung der Modelle am häufigsten die Aufschmelzversuche von Gau und Viskanta [10] verwendet. Bei diesem Experiment schmilzt das Metall Gallium an einer vertikalen, isothermen Wand auf. Trotz der großen zur erwartenden Unsicherheit wurde die Position der Phasengrenze durch Ausschütten des Behälters bestimmt, da Gallium nicht transparent ist.

Weiterhin sind bei vielen Materialien, die eventuell zur Speicherung thermischer Energie verwendet werden können, die Stoffdaten nur unzureichend bekannt. Dies liegt zum einen an der großen Anzahl der in Frage kommenden Materialien. Zum anderen ist die Bestimmung der Stoffdaten nahe der Phasenwechseltemperatur schwierig. Trotzdem wurde der Einfluss der Stoffdaten auf das Simulationsergebnis bisher nur unsystematisch und/oder sehr vereinfacht untersucht. Auch sind die Stoffwerte in den meisten Modellen als temperaturunabhängig implementiert.

Die Einbindung temperaturabhängiger Stoffdaten, die Unsicherheit der Stoffdaten und die Variation in den experimentellen Ergebnissen sorgen für eine große Unsicherheit bei der numerischen Simulation von Fest-flüssig-Phasenübergängen und verringern die Vorhersagegenauigkeit der Modelle. In dieser Arbeit wird daher das Aufschmelzen des Paraffins Octadecan in einem einseitig beheizten Hohlraum detailliert experimentell und numerisch untersucht. Besonderes Augenmerk wird auf die Unsicherheit der verfügbaren Stoffdaten und deren Temperaturabhängigkeit gelegt. Eine umfassende Analyse des Modells wird über eine kombinierte globale Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse erreicht, die zusätzlich zu den Stoffdaten auch die Unsicherheit der Randbedingungen des Experiments berücksichtigt.

## 2 Stand der Forschung und Entwicklung

In diesem Kapitel wird zunächst kurz auf die verschiedenen Möglichkeiten zur Speicherung thermischer Energie und insbesondere auf latente thermische Energiespeicher eingegangen. Danach werden die existierenden Modelle und Algorithmen zur numerischen Lösung von Fest-flüssig-Phasenwechseln vorgestellt. Dabei werden nur Lösungsmethoden für die makroskopische Beschreibungsweise von Phasenwechseln betrachtet, da nur solche zur Auslegung von latenten thermischen Energiespeichern verwendet werden. Die numerischen Modelle werden meist mithilfe von Aufschmelzexperimenten in einfachen Geometrien, wie z. B. Quadern, Zylindern oder Kugeln, validiert. Daher wird im dritten Abschnitt der aktuelle Stand der Forschung von Aufschmelzexperimenten beschrieben. Im letzten Abschnitt wird dann der Kenntnisstand zur Unsicherheit und zu den Ursachen dieser Unsicherheit bei der Simulation von Fest-flüssig-Phasenübergängen genau erläutert.

### 2.1 Latente thermische Energiespeicher

Thermische Energie kann entweder über chemische oder physikalische Prozesse gespeichert werden [11]. Die physikalischen Prozessen lassen sich wiederum in die sensible und latente Speicherung thermischer Energie klassifizieren. Bei der sensiblen Speicherung wächst die gespeicherte thermische Energie proportional zum Temperaturanstieg des Materials  $\Delta T$ . Die Proportionalitätskonstanten sind die Wärmekapazität des Materials  $c$  und dessen Masse  $m$ . Damit ergibt sich für die gespeicherte Enthalpie:

$$\Delta H = m \cdot c \cdot \Delta T. \quad (2.1)$$

Im Gegensatz zu sensiblen Speichern erfolgt bei latenten thermischen Energiespeichern die Speicherung der Energie nahezu isotherm über den Phasenwechsel eines Materials (engl. Phase Change Material oder kurz PCM). Dadurch wird die Speicherung von thermischer Energie mit geringer Temperaturspreizung bei gleichzeitig hohen Energiedichten ermöglicht (Abb. 2.1). Da der Anteil der sensibel gespeicherten Energie bei latenten thermischen Energiespeichern oft vernachlässigbar ist, lautet hier die vereinfachte Berechnungsgleichung der gespeicherten Enthalpie:

$$\Delta H = m \cdot L, \quad (2.2)$$