



**ΕΘΝΙΚΟ
ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Α.Π. :
Αθήνα,

ΚΟΣΜΗΤΟΡΑΣ

**Προς τα Μέλη ΔΕΠ της
Σχολής Μη/γων
Μηχ/κών**

ΠΡΟΣΚΛΗΣΗ

Σας προσκαλούμε στην παρουσίαση της Διδακτορικής Διατριβής της Υ.Δ. καις **ZENEΛΗ Μυρτώς**, διπλωματούχος **Μηχανολόγος Μηχανικός του ΕΜΠ**, την οποία εκπόνησε στον Θεرمότητα. Η παρουσίαση θα πραγματοποιηθεί τη Δευτέρα 24/4/2023 ώρα 14:00-17:00 στην αίθουσα Τηλεκπαίδευσης της Κεντρικής Βιβλιοθήκης του ΕΜΠ. Ο ελληνικός τίτλος της Διδακτορικής Διατριβής είναι ο ως εξής:

«Αριθμητική προσομοίωση καινοτόμων συστημάτων αποθήκευσης ενέργειας
βασιζόμενων σε πολυφασικές ροές»

Και ο Αγγλικός :

« Numerical investigation of novel energy storage systems based on multi-phase
flows»

Ο Κοσμητορας της Σχολής



Ν. Μάρμυρας
Καθηγητής Ε.Μ.Π



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Θερμότητας
Εργαστήριο Ατμοκινητήρων & Λεβήτων

Αριθμητική προσομοίωση καινοτόμων συστημάτων αποθήκευσης ενέργειας βασισμένων σε πολυφασικές ροές

Μυρτώ Ζενέλη

Επιβλέπων: Σωτήριος Καρέλλας, Καθηγητής ΕΜΠ

Περίληψη Διδακτορικής Διατριβής

Ο σκοπός της παρούσας διδακτορικής διατριβής είναι η μοντελοποίηση καινοτόμων συστημάτων αποθήκευσης ενέργειας βασισμένα, (1) σε υλικά αλλαγής φάσης υψηλής λανθάνουσας θερμότητας (latent heat thermal energy storage systems), ή (2) σε συστήματα κοκκώδους ροής (μονάδες ρευστοποιημένης κλίνης - fluidized beds). Τα τελευταία βασίζονται είτε στην αποθήκευση ενέργειας υπό τη μορφή λανθάνουσας θερμότητας, είτε σε κύκλους φόρτισης-εκφόρτισης μέσω χημικής αντίδρασης, χρησιμοποιώντας για παράδειγμα έναν κύκλο ενδόθερμης-εξώθερμης αντίδρασης, όπως ο κύκλος δέσμευσης διοξειδίου του άνθρακα ασβεστοποίησης-ενανθράκωσης (calcium-looping cycle - CaL). Αμφότερα συστήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε διάφορες εφαρμογές διαφόρων κλιμάκων (από πειραματικές εγκαταστάσεις, μέχρι μονάδες παραγωγής ηλεκτρισμού) και μπορούν να χρησιμοποιηθούν είτε αυτόνομα, είτε σε σύζευξη με άλλες συμβατικές μονάδες παραγωγής ενέργειας. Επιπρόσθετα, οι θερμοκρασίες λειτουργίας τους στοχεύουν σε θερμοκρασίες άνω των 500-600 °C, οι οποίες είναι υψηλότερες σε σχέση με τα συμβατικά συστήματα αποθήκευσης θερμικής ενέργειας βασισμένων σε στήλες άλατος, χωρίς να αποκλείεται η λειτουργία τους και σε μεσαίες ή χαμηλές θερμοκρασίες.

Πιο συγκεκριμένα, τα συστήματα που εξετάζονται στην παρούσα διδακτορική διατριβή αποτελούν α) ένα καινοτόμο σύστημα αποθήκευσης ενέργειας υπό τη μορφή λανθάνουσας θερμότητας το οποίο εμπεριέχει πυρίτιο σαν υλικό αλλαγής φάσης και λειτουργεί σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες (~1410 °C), β) ο κύκλος ασβεστοποίησης-ενανθράκωσης ο οποίος λειτουργεί σε υψηλές θερμοκρασίες (~650-900 °C) και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για αποθήκευση ενέργειας υπό τη μορφή χημικής αντίδρασης και παράλληλη δέσμευση διοξειδίου του άνθρακα και γ) ένα σύστημα αποθήκευσης ενέργειας υπό τη μορφή αισθητής θερμότητας (~500-600 °C) το οποίο βασίζεται στη ροή κοκκώδους ροής υπό την μορφή φυσαλίδων και μπορεί να λειτουργεί είτε για αποθήκευση ενέργειας αλλά και ως εναλλάκτης θερμότητας. Ωστόσο η χρήση τέτοιων συστημάτων σε ευρεία κλίμακα απαιτεί εις βάθος γνώση διαφόρων μηχανισμών συναλλαγής θερμότητας και διαφόρων περίπλοκων ροϊκών φαινομένων. Η χρήση των εργαλείων υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (computational fluid dynamics - CFD tools) μπορεί να βοηθήσει στην κατανόηση τέτοιων μηχανισμών, καθώς και στη βελτιστοποίηση τέτοιων συστημάτων, όσον αφορά τις συνθήκες λειτουργίας τους, αλλά και τον σχεδιασμό τους. Η ανάπτυξη των διαφόρων υπολογιστικών εργαλείων γίνεται στη παρούσα διατριβή σε εμπορική πλατφόρμα προσομοίωσης (ANSYS Fluent™) και όπου κρίνεται απαραίτητο χρησιμοποιούνται διάφοροι κώδικες σε γλώσσα προγραμματισμού C και FORTRAN, ώστε να εμπλουτιστούν και να βελτιωθούν από άποψη ακρίβειας. Επιβεβαίωση των αριθμητικών μοντέλων γίνεται με τη χρήση πειραματικών αποτελεσμάτων, τα οποία ανακτήθηκαν είτε από

τη βιβλιογραφία, είτε από συνεργαζόμενα πανεπιστήμια/φορείς στα πλαίσια των ερευνητικών έργων, κατά την διάρκεια των οποίων εκπονήθηκε η διδακτορική διατριβή.

Πιο συγκεκριμένα, στη περίπτωση των υλικών αλλαγής φάσης (phase change materials - PCMs) λαμβάνονται υπόψη οι μηχανισμοί μεταφοράς θερμότητας μέσω αγωγής και συναγωγής, η ανάπτυξη δενδριτικών μορφών κατά την στερεοποίησή τους, καθώς και η αλλαγή του όγκου τους κατά την αλλαγή φάσης αυτών. Το μοντέλο ενθαλπίας-πορώδους (enthalpy porosity approach) σε συνδυασμό με τη μέθοδο volume of fluid (VOF) χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση συστημάτων που βασίζονται σε υλικά αλλαγής φάσης. Κρίσιμη παράμετρος για την βελτιστοποίηση των συγκεκριμένων συστημάτων είναι οι απώλειες θερμότητας από τα τοιχώματά τους, οι οποίες αυξάνονται αντιστρόφως ανάλογα με τον όγκο τους, ενώ εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό και από το σχήμα που έχει το δοχείο αποθήκευσης του υλικού αλλαγής φάσης. Το μοντέλο αυτό εφαρμόζεται για την προσομοίωση της τριφασικής ροής μέσα σε ένα δοχείο το οποίο εμπεριέχει ένα υλικό που αλλάζει φάση από στερεό σε υγρό και αντίστροφα και ένα αδρανές αέριο το οποίο εμπεριέχεται μέσα στο ίδιο δοχείο πάνω από το υλικό. Εξετάζονται δύο τύποι υλικών αλλαγής φάσεων (α) κερί παραφίνης το οποίο αλλάζει φάση σε χαμηλές θερμοκρασίες (~40 °C) και (β) υλικά αλλαγής φάσης νέας γενιάς, όπως τα κράματα βορίου/πυριτίου τα οποία χαρακτηρίζονται από λανθάνουσα θερμότητα της τάξεως των 2-4 MJ·kg⁻¹ (μία τάξη μεγέθους μεγαλύτερη αυτής των τυπικών στηλών άλατος που χρησιμοποιούνται ευρέως σήμερα). Λόγω του υψηλού σημείου τήξεως τέτοιων υλικών (παραδείγματος χάριν το καθαρό πυρίτιο λιώνει περίπου στους 1400 °C) υπάρχουν πολλά τεχνικά προβλήματα στο ίδιο το σύστημα που πρέπει να μελετηθούν. Ένα σημαντικό πρόβλημα είναι οι μεγάλες θερμικές απώλειες από τα τοιχώματα του δοχείου. Ο τύπος μόνωσης (υλικά, πάχος υλικών), καθώς και το ίδιο το σχήμα και ο όγκος του δοχείου μπορούν να παίξουν ρόλο στο μέγεθος των απωλειών. Άλλες παράμετροι που διερευνώνται σε ένα τέτοιο σύστημα αποθήκευσης είναι ο ρυθμός φόρτισης-εκφόρτισης του, καθώς και ο χρόνος αποθήκευσης (ο χρόνος πριν χάσει όλη την αποθηκευμένη ενέργεια υπό τη μορφή λανθάνουσας θερμότητας). Όσον αφορά τα σχήματα μεγάλη έμφαση δίνεται στην βελτιστοποίηση του σχήματος του κόλουρου κώνου, καθώς παρουσιάζει μεγάλη ευελιξία στον σχεδιασμό σε σχέση παραδείγματος χάριν με το σφαιρικό σχήμα. Τέλος, γίνεται μία παραμετρική ανάλυση όσον αφορά την επίδραση των ιδιοτήτων του υλικού (θερμική αγωγιμότητα, ειδική θερμοχωρητικότητα κλπ.) στον ρυθμό φόρτισης εκφόρτισης του συστήματος.

Όσον αφορά στις ρευστοποιημένες κλίνες ανακυκλοφορίας, γίνεται μοντελοποίηση της πολυφασικής ροής με τη χρήση του αναπτυγμένου μοντέλου οπισθέλκουσας ελαχιστοποίησης ενέργειας διαφόρων κλιμάκων (EMMS) η οποία αυξάνει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων σε σχέση με συμβατικά μοντέλα (π.χ. το μοντέλο οπισθέλκουσας του Gidaspro). Επιπρόσθετα, άλλα στοιχεία που εξετάζονται είναι η επίδραση της μεταφοράς θερμότητας μέσω ακτινοβολίας (το συγκεκριμένο φαινόμενο χρήζει αξίας να μελετηθεί σε περιπτώσεις (α) ρευστοποιημένων κλινών αραιής ροής όπου η επίδραση μεταφοράς θερμότητας μέσω ακτινοβολίας μπορεί να είναι σημαντική, αλλά και σε (β) τύπους ρευστοποιημένων κλινών που αποθηκεύουν ενέργεια από τον ήλιο κλπ.). Στην τελευταία περίπτωση η επίδραση της ακτινοβολίας είναι πολύ σημαντική, καθώς τα αιωρούμενα σωματίδια απορροφούν ενέργεια από τους τοίχους της μονάδας οι οποίοι είναι είτε διαπερατοί στην ηλιακή ακτινοβολία (άμεση απορρόφηση ενέργειας) είτε αδιαπέραστοι (έμμεση απορρόφηση ενέργειας). Σημαντική προστιθέμενη αξία στην επιστημονική κοινότητα είναι ότι τα αναπτυγμένα μοντέλα επικυρώνονται έναντι πειραματικών αποτελεσμάτων από πιλοτικές μονάδες (300 kW_{th}-1 MW_{th}) οι οποίες μπορούν να προσφέρουν μία πιο ρεαλιστική εικόνα των ροϊκών φαινομένων

σε μεγάλη κλίμακα. Πιο συγκεκριμένα οι αριθμητικές προσομοιώσεις περιλαμβάνουν, (α) κατασκευή και επικύρωση του μοντέλου EMMS σε σύστημα ρευστοποιημένης κλίνης ανακυκλοφορίας 1 MW_{th} , το οποίο λαμβάνει υπόψη τη διάμετρο του αντιδραστήρα, (β) μοντελοποίηση συστήματος ρευστοποιημένης κλίνης σε δύο κλίμακες (1 MW_{th} και $20 \text{ MW}_{\text{th}}$) το οποίο λειτουργεί ως εναναθρακωτής και βελτιστοποίηση του σχεδιασμού του μέσω της μελέτης διαφόρων σεναρίων, και (γ) μοντελοποίηση συστήματος ρευστοποιημένης κλίνης το οποίο λειτουργεί ως ασβεστοποιητής και λαμβάνει θερμότητα, είτε μέσω της εγγενούς καύσεως στερεού καυσίμου (oxy-fired CaL), είτε μέσω έμμεσης πρόσδοσης θερμότητας (Indirectly heated calcium looping). Επιπρόσθετα η διδακτορική διατριβή επικεντρώνεται στη μοντελοποίηση συστήματος ρευστοποιημένης κλίνης με φυσαλίδες το οποίο λειτουργεί ως δοχείο αποθήκευσης/εναλλάκτης θερμότητας (2φασική ροή) – Στη συγκεκριμένη μονάδα υπάρχει μία σειρά από σωληνώσεις μέσα στις οποίες ρέει ατμός ο οποίος τραβάει θερμότητα από τη ρευστοποιημένη κλίνη. Για τη ροή του ατμού μέσα στις σωληνώσεις χρησιμοποιούνται συναρτήσεις κατάλληλα διαμορφωμένες από το χρήστη (UDF – User Defined Functions).

Τέλος τίθεται ένα γενικό πλαίσιο εφαρμογής των τριών μελετημένων τεχνολογιών αποθήκευσης ενέργειας (αποθήκευση ενέργειας σε στερεά κοκκώδη σωματίδια υπό τη μορφή αισθητής θερμότητας (α) και χημικής αντίδρασης (β), καθώς και αποθήκευση ενέργειας υπό τη μορφή λανθάνουσας θερμότητας σε υλικά αλλαγής φάσης (γ)). Πιο συγκεκριμένα, παρουσιάζεται μια θεωρητική σύγκριση για τους διαφορετικούς τύπους μεθόδων θέρμανσης και αποθήκευσης ενέργειας όσον αφορά τους ρυθμούς φόρτισης και το χρόνο φόρτισης τους.

Λέξεις κλειδιά: Υπολογιστική ρευστοδυναμική, συστήματα αποθήκευσης ενέργειας, συστήματα κοκκώδους ροής, υλικά αλλαγής φάσης, πολυφασική ροή, μεταφορά θερμότητας

Αθήνα, 2023



National Technical University of Athens
School of Mechanical Engineering
Thermal Section
Laboratory of Steam Boilers and Thermal Plants (LSBTP)

Numerical investigation of novel energy storage systems based on multi-phase flows

Myrto Zeneli

Supervisor: Sotirios Karellas, Professor NTUA

Summary of PhD Thesis

The scope of the present Doctoral Thesis is to model and optimize novel energy storage systems operating at high and ultra-high temperatures based on either (1) phase change materials (PCMs), or (2) granular materials. The latter can be part of sensible heat storage fluidized bed systems or thermochemical energy storage systems, such as the carbon capture calcium looping (CaL) cycle. All three types of systems (latent heat, sensible and thermochemical) can be used in applications of various scales (from experimental facilities to industrial scale units) as stand-alone technological options or in conjunction with other conventional power generation units. In addition, they are aimed at temperatures above 500-600 °C, without excluding their operation at medium or low temperatures.

More specifically, the innovative systems examined in this doctoral thesis are a) a latent heat thermal energy storage system that contains silicon as a phase change material and operates at ultra-high temperatures (~1410 °C), b) the calcium looping cycle, which operates at high temperatures (~650-900 °C) and can be used for energy storage in the form of chemical reaction and simultaneous capture of carbon dioxide and c) a sensible heat storage system based on a gas-solid fluidized bed (~500-600 °C), which can operate either for energy storage or as a heat exchanger in power plants. However, the use of such systems on a large scale requires in-depth knowledge of various heat transfer mechanisms and various complex fluid flow phenomena taking place during their operation. The use of computational fluid dynamics (CFD) tools can help to understand such mechanisms, as well as to optimize such systems, in terms of their operating conditions, but also of their design. In the framework of this doctoral thesis, the development of several CFD based tools has been achieved by utilizing a commercial simulation platform (ANSYS Fluent™) and where it has been deemed necessary, in-house codes in C and FORTRAN programming language have been used, in order to improve the accuracy of the developed models. Validation of the numerical models has been done using experimental data, which have been retrieved either from the literature, or from cooperating universities carrying out the experimental campaigns of the studied systems in the context of the research projects, during which the doctoral thesis has been prepared. Verification of the CFD models against theoretical models has been also done in cases where there has been lack of experimental data.

As regards phase change materials (PCMs), the heat transfer mechanisms through conduction and convection, the development of dendritic formations during the PCM solidification and their effect on system performance, as well as the PCM volume change during their phase change are taken into account. The enthalpy porosity approach combined with the volume of fluid (VOF) method are used to simulate systems based on phase change materials. A critical

parameter for the optimization of these systems is the heat losses from the crucible sidewalls, which increase inversely to their volume, while they also depend to a large extent on the shape of the storage container of the phase change material. This model is applied for modeling the three-phase flow inside a container that contains a PCM that changes phase from solid to liquid and vice versa and an inert gas that is inside the same container over the material. Two types of PCMs are tested (i) paraffin wax, which changes phase at low temperatures (~ 40 °C) and (ii) new generation PCMs, such as boron/silicon alloys, which are characterized by a latent heat of the order of 2- 4 MJ·kg⁻¹ (an order of magnitude greater than that of standard molten salts widely used today). Due to the high melting point of such materials (for example pure silicon melts at about 1400 °C), there are many technical problems in the system itself that need to be studied. A major problem is the high heat losses from the vessel sidewalls. The type of insulation (materials, thickness of materials), as well as the shape and volume of the container itself can play a high role in the amount of lateral losses. Other parameters investigated in such a storage system are its charging-discharging rate, as well as the storage time (the time before it loses all of its stored energy in the form of latent heat). Regarding the shapes, great emphasis has been placed on the optimization of the shape of the truncated cone, as it presents great flexibility in design in relation to, for example, the spherical shape. Finally, a parametric analysis has been made regarding the effect of the material properties (thermal conductivity, specific heat capacity, etc.) on the charging-discharging rate of the system.

Regarding the circulating fluidized beds, the multiphase flow is modeled using the developed energy minimization multi-scale drag model (EMMS), which increases the accuracy of the results in terms of the overall pressure drop predictions, solids recirculation flux and predicted flow patterns compared to conventional homogeneous models (e.g., Gidaspow's drag model). Furthermore, other elements investigated are the effect of radiative heat transfer (this particular phenomenon is worth studying in cases of (i) dilute flow fluidized beds, where the effect of radiative heat transfer can be significant in (ii) types of fluidized beds that store energy from the sun etc.). In the last case (i.e. solar particle receiver) the effect of radiation is very important, as the suspended particles absorb energy from the walls of the unit which are either permeable to solar radiation (direct energy absorption) or impermeable (indirect energy absorption). An important added value to the scientific community is that the developed models have been validated against experimental results from pilot units (300 kW_{th}-1 MW_{th}), which can provide a more realistic view of large-scale flow phenomena. More specifically, the modeling activities include, (a) construction and validation of the EMMS model in a 1 MW_{th} circulating fluidized bed carbonator, (b) modeling of the carbonator reactor at two scales (1 MW_{th} and 20 MW_{th}) and optimizing its design through the study of various scenarios, and (c) modeling of a fluidized bed system that acts as calciner and receives heat either through the in-situ combustion of solid fuel (oxy-fired CaL) or through indirect heat transfer (indirectly heated calcium looping). Finally, the present thesis focuses on modeling a bubbling fluidized bed system that acts as a storage vessel/heat exchanger (2-phase flow). In this unit, there is a series of tube buddles, in which steam flows and draws heat from the fluidized bed. Appropriate user defined functions (UDFs) have been used to implicitly model the steam flow inside the pipelines. Added to this, a theoretical model has been used to carry out extra parametric studies on the effect of several parameters (e.g. fluidizing agent type) on the overall heat transfer process inside the sensible heat storage system.

Finally, a general framework is set for the application of the three main technologies studied (energy storage in solid granular particles in the form of sensible heat (a) and chemical reaction (b), as well as energy storage in the form of latent heat with change materials phase (c)). More

specifically, a theoretical comparison is set by comparing the different types of heating and storing methods studied in this Thesis in terms of charging rates and charging time.

Keywords: computational fluid dynamics, thermal energy storage systems, granular flows, phase change materials, multi-phase flow, heat transfer

Athens, 2023